

文章编号: 2095-4980(2023)09-1073-07

葡萄糖与果糖太赫兹吸收谱仿真计算

刘智星, 舒敬懿, 赵国忠*

(首都师范大学 物理系, 北京 100048)

摘 要: 利用 Gaussian 软件, 选取密度泛函理论(DFT)、哈特里—福克理论(HF)对葡萄糖、果糖的单分子在 0~3 THz 波段的吸收谱进行仿真计算, 并与参考文献中的实验结果进行比对。仿真计算结果验证了利用 Gaussian 软件进行单分子吸收谱计算的可行性。最后基于密度泛函理论得到的结果分析了不同位置吸收峰对应的分子内振动模式。

关键词: 太赫兹吸收谱; 密度泛函理论; 哈特里—福克理论; 葡萄糖; 果糖; 振动模式

中图分类号: TN201

文献标志码: A

doi: 10.11805/TKYDA2022171

Simulation calculation of glucose and fructose terahertz absorption spectra

LIU Zhixing, SHU Jingyi, ZHAO Guozhong*

(Department of Physics, Capital Normal University, Beijing 100048, China)

Abstract: Gaussian software, Density Functional Theory(DFT) and Hartl–Fokker theory(HF) are selected to simulate the absorption spectra of glucose and fructose single molecules in the 0~3 THz band, and the results are compared with that in the reference literatures. The feasibility of using Gaussian software for single molecule absorption spectra calculation is verified, and the intramolecular vibration patterns corresponding to the absorption peaks at different locations are analyzed based on the results obtained by DFT.

Keywords: terahertz absorption spectrum; Density Functional Theory; Hartley–Fokker theory; glucose; fructose; vibration mode

太赫兹(THz)波指频率在 0.1~10 THz 范围内的电磁波, 介于红外与微波之间^[1-3]。20 世纪 80 年代中期, 超快激光技术的发展, 为太赫兹的产生提供了可靠的激发源, 使太赫兹的产生、应用技术得以蓬勃发展^[4]。由于许多生物大分子的振动、平动及转动能级均落在太赫兹波段, 因此, 通过分析物质材料的太赫兹光谱可对其进行定性、定量鉴别。

葡萄糖(化学式: $C_6H_{12}O_6$, CAS: 492-62-6)是自然界中分布最广泛的一种单糖, 是生物的主要供能物质。果糖(化学式: $C_6H_{12}O_6$, CAS: 7600-25-5)与葡萄糖属同分异构体, 大量存在于水果、蜂蜜中, 二者可结合形成蔗糖, 具有补充能量、缓解疲劳等作用, 在医学、生物学方面已被广泛研究、应用^[5-13]。当前, 已有学者对葡萄糖、果糖的太赫兹光谱进行了研究。2008 年, 张同军等^[14]利用太赫兹时域光谱系统(THz Time-Domain Spectroscopy, THz-TDS), 测量了葡萄糖在 0.2~3 THz 范围的时域光谱, 并利用密度泛函理论(DFT)对其单分子的低频集体振动模式进行了简单分析。2016 年, 王文爱等利用 THz-TDS 系统, 测量了葡萄糖在 0~3 THz 范围的时域光谱, 并基于 DFT 对葡萄糖单分子、双分子、三分子、四分子在太赫兹波段的振动频率进行了计算。2022 年, 燕芳等利用 THz-TDS 系统, 测量了葡萄糖、果糖在 0.2~1.8 THz 波段的时域光谱, 并利用 Gaussian 软件对葡萄糖单分子、晶胞的振动模式进行了分析。

本文以葡萄糖、果糖为研究对象, 应用 Gaussian 软件, 选取 DFT、哈特里—福克理论(HF), 在 6~31G(d,p)基组下, 对 2 种单糖的单分子在 0~3 THz 波段的吸收谱进行理论计算。与参考文献实验结果进行比对发现, 选用 DFT 得到的计算结果与实验结果更接近, 验证了利用 Gaussian 软件进行单分子吸收谱计算的可行性。

最后, 利用 GaussView 软件的视频功能, 基于 DFT 的计算结果, 对 2 种糖的不同吸收峰对应的分子内振动模式进行了分析。

收稿日期: 2022-09-12; 修回日期: 2022-12-22

*通信作者: 赵国忠 email:Guozhong-zhao@126.com

1 理论简介

1.1 HF 理论

HF 理论是一种利用变分法计算多电子体系波函数的方程,其思想是:将每个电子看作是在其余电子构成的平均势场中运动的粒子,用迭代法对薛定谔方程进行求解。

考虑一个电子在原子核和其他电子组成的势场内运动,根据变分原理,分子轨道的展开系数公式满足:

$$\sum_{v=1}^N (F_{\mu v} - \varepsilon_i S_{\mu v}) C_{vi} = 0 \quad (1)$$

式中: $F_{\mu v}$ 为自由能; $S_{\mu v}$ 为熵; ε_i 为轨道能; C_{vi} 为分子轨道。矩阵表达式为 $\mathbf{FC} = \mathbf{SC}\boldsymbol{\varepsilon}$, 其中, $\mathbf{F}$ 为自由能、 $\mathbf{C}$ 为分子轨道、 $\mathbf{S}$ 为熵、 $\boldsymbol{\varepsilon}$ 为轨道能。

在原子中,一个电子受其余电子、原子核的作用,可近似一个平均场代替其作用效果。假设原子的基态波函数可写成各单电子的波函数之积:

$$\Phi(\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_s) = \Phi_{k1}(\vec{R}_1) \Phi_{k2}(\vec{R}_2) \dots \Phi_{ks}(\vec{R}_s) \quad (2)$$

式中 $\vec{R}_i$ 为电子距原子核的距离。

则单电子波函数满足的方程(Hartree 方程)为:

$$\left[H_i + \sum_{j(j \neq i)} \int |\phi_{kj}|^2 \frac{1}{r_{ij}} d^3x_j \right] \phi_{kj} = \varepsilon_i \phi_{kj} \quad (3)$$

式中: $i=1,2,\dots,Z$, Z 为电子数; $H_i = -\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{z}{r_i}$, z 为原子核电荷数, r_i 为第 i 个电子与原子核间距离; ϕ_{kj} 为第 j 个粒子的波函数; r_{ij} 为电子 i 与电子 j 间距离; x_j 为第 j 个电子与场中心的距离。

方程(3)中左边方括号内第 2 项是剩余电子 $j(j \neq i)$ 对第 i 个电子的库伦斥力。为简化 Hartree 方程, Hartree 提出逐步近似法,最后以自洽的方式求解,即先假设一个合适的中心场 $V^{(0)}(r_i)$ 来代替式(3)中的:

$$-\frac{z}{r_i} + \sum_{j(j \neq i)} \int |\phi_{kj}|^2 \frac{1}{r_{ij}} d^3x_j \quad (4)$$

计算的具体步骤为:先求出单电子的波函数 $\phi_{ki}^{(0)}(i=1,2,\dots,Z)$,然后用获得的波函数代入式(4),求出式(4)的值,并比较计算值与原假设 $V^{(0)}(r_i)$ 值的差别;根据差别,调整中心力场为 $V^{(1)}(r_i)$,继续重复上述步骤,直到达到要求的精确度范围。这种计算方法称为自洽场法。Hartree 波函数虽然没有考虑电子的交换反对称性,但仍需遵循泡利原理,这是因为 Hartree 波函数式(2)的每个电子的量子态都不同。

HF 理论将难于求解的多电子方程简化成可迭代自洽求解的方程,是一种重要的量化计算方法,但它在近似中没有考虑体系电子间的相关作用,在计算体系能量时存在一定误差。

1.2 DFT

DFT 是 Hohenberg 和 Kohn 在研究均匀电子气 Thomas-Fermi(TF)模型的理论基础时,基于 2 个重要的结论提出的。

在 TF 模型的理论公式中,总动能 $T_{TF}[\rho] = c_F \int \rho^{5/3}(r) dr$, $c_F = [3 \times (3\pi^2)^{2/3}]/10 = 2.871$, 其中 $\rho(r)$ 为每一元胞的电子密度。式(5)为 TF 模型的能量计算公式,公式中只考虑了核与电子、电子与电子相互作用。

$$E_{TF} = c_F \int \rho^{5/3}(r) dr - z \int \frac{\rho(r)}{r} dr + \frac{1}{2} \iint \frac{\rho_1(r) \rho_2(r)}{|r_1 - r_2|} dr_1 dr_2 \quad (5)$$

式中: E_{TF} 为体系能量; c_F 为常数。

Hohenberg-Kohn 定理 1 证明了 $v(r)$ 为 DFT 的基本物理量,即 $v(r)$ 是电子密度 $\rho(r)$ 的唯一确定泛函。基于此,式(5)可变为式(6):

$$E_v(\rho) = T(\rho) + V_{ne}(\rho) + V_{ee}(\rho) = \int \rho(r) v(r) dr + F_{HK}[\rho] \quad (6)$$

式中: $E_v(\rho)$ 为交换相关泛函; $T(\rho)$ 为动能; $V_{ne}(\rho)$ 为相互作用项; $V_{ee}(\rho)$ 为外势场项; $v(r)$ 为晶体场势能; $F_{HK}[\rho]$

为交换相关项, $F_{\text{HK}}[\rho] = T[\rho] + V_{\text{ee}}(\rho)$, $V_{\text{ee}}(\rho) = J(\rho) + \text{非经典项}$, $J(\rho) = \frac{1}{2} \iint \frac{1}{r_{12}} \rho_1(r) \rho_2(r) dr_1 dr_2$ 为经典排斥作用力, 非经典的排斥作用不易处理, 但在计算中必须考虑, 它的主要组成部分是交换相关能。

Hohenberg-Kohn 定理2使用变分原理确定了体系的基态电子密度 $\rho_0(r)$, 其数学表述如下: 对于一个确定的 N 电子体系 $\left(\int \rho(r) dr = N\right)$, 在给定的外势 $v(r)$ 下, 存在一个 $\rho(r)$ 的泛函 $E_v[\rho(r)]$ 满足下面的变分原理:

$$E_v[\rho(r)] \geq E[\rho_0(r)] = E_0 \quad (7)$$

式中: $\rho_0(r)$ 为真实电子密度分布; E_0 为基态能量。此定理指出了真实的基态电子密度 $\rho_0(r)$ 可使能量泛函 $E_v[\rho(r)]$ 取极小值。

Kohn 等引入一个虚构的无相互作用的多电子体系来确定能量泛函的具体数学形式。这个体系和需要研究的有相互作用的多电子体系具有相同的电子密度。Kohn 和 Sham 先将容易表示的部分写出显式, 能量的表示式见式(8):

$$E_v = \int \rho(r) v(r) dr + \frac{1}{2} \iint \frac{\rho(r) \rho(r')}{|r - r'|} dr dr' + T[\rho] + E_{\text{xc}}[\rho] \quad (8)$$

式中: 第1项为核和电子的作用能; 第2项为静电排斥力; 第3项为体系动能; 第4项为体系交换能的相关项。由式(8)可见, 体系能量计算的难点在于交换相关泛函的计算。对此, 他们提出了定域密度近似(Local-Density Approximation, LDA), 利用均匀电子气 r 点的电子密度构造能量相关泛函:

$$E_{\text{xc}} \approx \int \rho(r) \varepsilon_{\text{xc}}(\rho(r)) dr \quad (9)$$

式中 ε_{xc} 为均匀电子气体的单电子交换相关能。尽管如此, LDA 并不适用于电子非常少的体系, 通常会高估结合能, 因此, 发展出广义梯度近似(Generalized Gradient Approximation, GGA)。

由于DFT理论包涵了电子相关能量, 而HF理论只是在平均的意义上处理电子相关能量, 这使得在某些体系和同等的时间耗费上, DFT算法具有比HF算法更高的精确度, 而且计算速度更快, 因此DFT理论在量化计算中应用得比较广泛。

2 结果与讨论

本文使用 Gaussian 程序包, 分别用 DFT、HF 理论在 6-31G(d,p) 基组水平上对葡萄糖和果糖进行结构优化和频率计算, 计算结果没有负频率产生, 说明得到的结构是一个稳定的构象。

2.1 葡萄糖

葡萄糖在太赫兹波段的吸收谱已有过研究: 2008年, 张同军等^[14]测得葡萄糖在 1.44 THz、2.08 THz、2.65 THz、2.94 THz 处存在吸收峰; 2009年, 马晓菁等^[15]测得的吸收峰位于 1.44 THz; 2011年, Zheng 等^[16]测得的吸收峰位于 1.27 THz、1.42 THz、1.78 THz、2.05 THz、2.51 THz、2.64 THz、2.91 THz; 2016年, 王文爱等^[17]测得的吸收峰位于 0.94 THz、1.30 THz、1.44 THz、1.67 THz、1.88 THz、2.08 THz、2.31 THz、2.55 THz、2.70 THz、2.84 THz、2.96 THz; 2019年, 吴建等^[18]测得的吸收峰位于 1.45 THz、1.8 THz、1.98 THz、2.7 THz; 2021年, 王文爱等^[19]测得的吸收峰位于 1.30 THz、1.44 THz、1.88 THz、2.05 THz、2.08 THz、2.70 THz、2.84 THz、2.96 THz。通过对比各文献实验结果发现, 葡萄糖在 1.44 THz、1.8 THz、2.08 THz、2.7 THz、2.94 THz 处的吸收峰重复率较高, 更有参考价值。

图1为葡萄糖单分子结构图。图2为模拟计算得到的葡萄糖在 0~3 THz 范围内的吸收谱, 使用 HF 理论得到的吸收峰为 1.85 THz、2.47 THz, 使用 DFT 理论得到的吸收峰分别位于 1.04 THz、2.13 THz、2.70 THz。

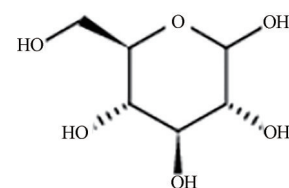


Fig.1 Schematic diagram of glucose single molecule structure

图1 葡萄糖单分子结构示意图

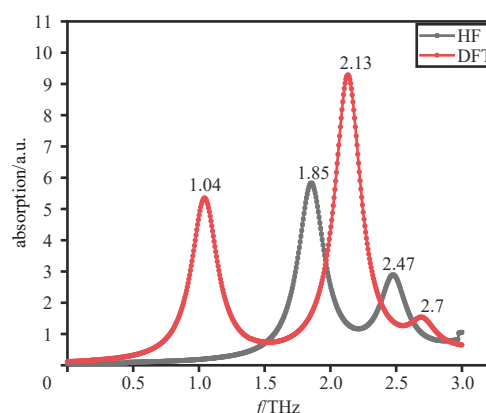


Fig.2 Theoretically calculated glucose absorption profile

图2 理论计算得到的葡萄糖吸收谱

表 1 为葡萄糖仿真计算结果和参考文献中实验结果的对比，在 0~3 THz 范围内，利用 HF 理论计算得到的 1.85 THz 处吸收峰与文献[17,19]中的 1.88 THz、文献[18]中的 1.8THz 相对应；2.47 THz 处吸收峰与文献[16]中的 2.51 THz、文献[17]中的 2.55 THz 相对应。利用 DFT 理论计算得到的 1.04 THz 处吸收峰与文献[17]中的 0.94 THz 相对应；2.13 THz 处吸收峰与文献[14,17,19]中的 2.08 THz、文献[16]中的 2.05 THz 相对应；2.70 THz 处吸收峰与文献[16]中的 2.64 THz、文献[14]中的 2.65 THz、文献[17~19]中的 2.7 THz 相对应。利用 DFT 理论计算得到的吸收峰位与文献中吻合的较多，因此利用 DFT 理论计算的结果更好。

表 1 葡萄糖理论计算吸收峰位与其他文献中实验结果对比(单位:THz)
Table1 The peak level of absorption calculated by Glucose theory compared with the experimental results in other literatures (unit:THz)

Ref.[14]	Ref.[15]	Ref.[16]	Ref.[17]	Ref.[18]	Ref.[19]	DFT	HF theory
			0.94			1.04	
		1.27	1.30		1.30		
1.44	1.44	1.42	1.44	1.45	1.44		
		1.78	1.67				
			1.88	1.80	1.88		1.85
				1.98	2.05		
2.08		2.05	2.08		2.08	2.13	
			2.31				
		2.51	2.55				2.47
2.65		2.64	2.70	2.70	2.70	2.70	
			2.84		2.84		
2.94		2.91	2.96		2.96		

由于本文只对葡萄糖的单分子构型进行仿真计算，因此 DFT 理论计算得到的 1.04 THz、2.13 THz、2.7 THz 处的吸收峰主要源于分子内相互作用，其余没有算出的吸收峰可能源于分子间相互作用。

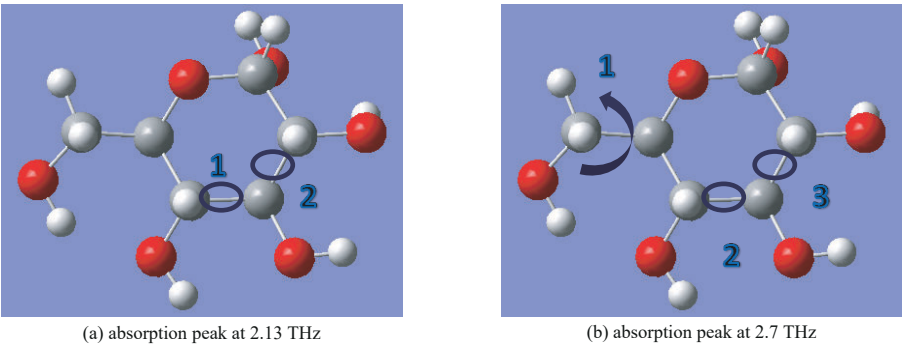


Fig.3 Intramolecular vibration mode corresponding to absorption peaks at 2.13 THz and 2.7 THz
图 3 2.13 THz、2.7 THz 处吸收峰对应的分子内振动模式

利用 GaussView 的视频功能，重点对葡萄糖 2.13 THz、2.70 THz 处吸收峰对应的振动模式进行分析。图 3 为不同吸收峰对应的分子内振动模式的示意图。如图所示：2.13 THz 处吸收峰由 1、2 处 C-C 键的面外摇摆振动引起；2.70 THz 处吸收峰由 1 处 C-C 键的扭转和 2、3 处 C-C 键面外摇摆振动引起。

2.2 果糖

果糖在太赫兹波段的吸收特性已取得了一些成果：2015 年，Zheng 等^[16]测得果糖在 1.29 THz、1.68 THz、2.11 THz、2.63 THz、2.93 THz 处存在吸收峰；2016 年，丁玲等^[20]测得的吸收峰位于 1.69 THz、2.12 THz、2.43 THz、2.65 THz、2.95 THz；2021 年，王文爱等^[19]测得的吸收峰位于 1.09 THz、1.33 THz、2.14 THz、2.62 THz、2.97 THz；2022 年，燕芳等^[21]测得的吸收峰位于 1.66 THz。通过对比各文献实验结果发现，果糖在 1.68 THz、2.12 THz、2.63 THz、2.93 THz 处的吸收峰重复率较高，更有参考价值。

图 4 为果糖单分子结构图。图 5 为模拟计算得到的果糖在 0~3 THz 范围内的

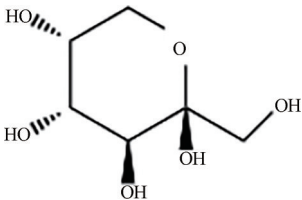


Fig.4 Schematic diagram of fructose monomolecular structure
图 4 果糖单分子结构示意图

吸收谱，使用 HF 理论得到的吸收峰为 2.72 THz，使用 DFT 理论得到的吸收峰分别位于 1.51 THz、1.96 THz、2.58 THz。

表 2 为果糖仿真计算结果和参考文献中实验结果的对比，在 0~3 THz 范围内，利用 HF 理论计算得到的 2.72 THz 处吸收峰与文献[19]中的 2.62 THz、文献[16]中的 2.63 THz、文献[20]中的 2.65 THz 处吸收峰相对应；利用 DFT 理论计算得到的 1.51 THz 处吸收峰与文献[21]中的 1.66 THz、文献[16]中的 1.68 THz、文献[21]中的 1.69 THz 处吸收峰相对应；1.96 THz 处吸收峰与文献[16]中的 2.11 THz、文献[20]中的 2.12 THz、文献[19]中的 2.14 THz 处吸收峰相对应；2.58 THz 处吸收峰与文献[19]中的 2.62 THz、文献[16]中的 2.63 THz、文献[20]中的 2.65 THz 处吸收峰相对应。利用 DFT 理论计算得到的吸收峰位与文献中吻合的较多，因此 DFT 理论的计算结果更好。

由于本文只对果糖的单分子构型进行仿真计算，因此 DFT 理论计算得到的 1.51 THz、1.96 THz、2.58 THz 处的吸收峰主要源于分子内相互作用，其余没有算出的吸收峰可能源于分子间相互作用。

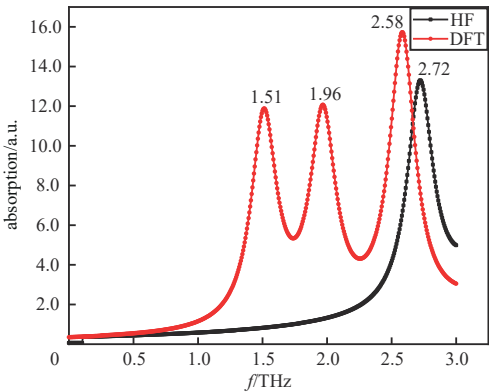


Fig.5 Theoretically calculated fructose absorption profile
图 5 理论计算得到的果糖吸收谱

表 2 果糖理论计算吸收峰位与其他文献中实验结果对比(单位:THz)

Table2 The peak level of absorption calculated by Fructose theory compared with the experimental results in other literatures(unit:THz)					
Ref.[16]	Ref.[20]	Ref.[19]	Ref.[21]	DFT	HF theory
		1.09			
1.29		1.33			
1.68	1.69		1.66	1.51	
2.11	2.12	2.14		1.96	
	2.43				
2.63	2.65	2.62		2.58	2.72
2.93	2.95	2.97			

利用 GaussView 软件的视频功能，对果糖各吸收峰对应的振动模式进行分析。图 6 为不同吸收峰对应的振动模式的示意图。如图所示：1.51 THz 处吸收峰由 1、3 处 C-C 键和 2 处 C-O 键的不对称变形振动引起；1.96 THz 处吸收峰由 C-C 键的扭转引起；2.58 THz 处吸收峰由 1、2 处 C-O 键和 3、4 处 C-C、C-O 键的面外摇摆振动引起。

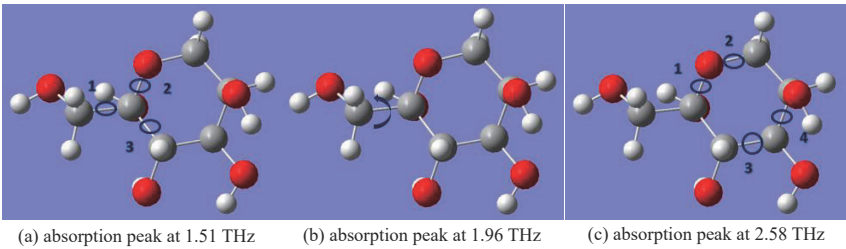


Fig. 6 Intramolecular vibration patterns corresponding to absorption peaks at 1.51 THz, 1.96 THz and 2.58 THz
图 6 1.51 THz、1.96 THz、2.58 THz 处吸收峰对应的分子内振动模式

3 结论

本文利用 Gaussian 软件，基于 DFT、HF 理论，在 6~31G(d,p) 基组水平上计算了葡萄糖、果糖单分子在 0~3 THz 波段的吸收峰，并与参考文献中的实验结果进行对照，结果表明采用 DFT 理论得到的计算结果与实验值更为吻合。对仿真、实验结果分析可知：对于葡萄糖，其 2.08 THz、2.7 THz 处的吸收峰来自于分子内相互作用，1.8 THz、2.08 THz、2.94 THz 处吸收峰可能来自于分子间相互作用；对于果糖，其 1.68 THz、2.11 THz、2.63 THz 处的吸收峰来自于分子内相互作用，2.93 THz 处吸收峰可能来自于分子间相互作用。仿真结果与实验结果吻合较好，验证了利用 Gaussian 软件进行单分子吸收谱计算的可行性。

本文没有对葡萄糖、果糖的分子间作用力进行仿真计算和详细分析，主要是因为 Gaussian 软件适合对单分子进行仿真计算，对晶胞的计算效果不如 Materials Studio，因此没有对二者的晶胞进行研究。

参考文献:

- [1] 孙博,姚建铨. 基于光学方法的太赫兹辐射源[J]. 中国激光, 2006,33(10):1349–1359. (SUN Bo,YAO Jianquan. Generation of terahertz wave based on optical methods[J]. Chinese Journal of Lasers, 2006,33(10):1349–1359.)
- [2] 刘盛纲. 太赫兹科学技术的新发展[J]. 中国基础科学, 2006,8(1):7–12. (LIU Shenggang. Recent development of terahertz science and technology[J]. China Basic Science, 2006,8(1):7–12.)
- [3] 贾刚,汪力,张希成. 太赫兹波科学与技术[J]. 中国科学基金, 2002,16(4):200–203. (JIA Gang,WANG Li,ZHANG Xicheng. Terahertz science and technology[J]. Bulletin of National Natural Science Foundation of China, 2002,16(4):200–203.)
- [4] 郑转平. 结构相似有机分子太赫兹谱实验与理论研究[D]. 西安:西安光学精密机械研究所, 2015. (ZHENG Zhuanping. The terahertz experimental and theoretical study on organic molecules with similar structure[D]. Xi'an, China: Xi'an Institute of Optics and Precision Mechanics, 2015.)
- [5] 夏前芳,罗丹,李在均. 石墨烯基葡萄糖生物传感器的电化学制备及应用[J]. 化学学报, 2012,70(19):2079–2084. (XIA Qianfang,LUO Dan,LI Zaijun. Electrochemical fabrication and application of the glucose biosensor based on graphene[J]. Acta Chimica Sinica, 2012,70(19):2079–2084.)
- [6] 谭学才,翟海云,李荫,等. 基于溶胶-凝胶壳聚糖/SiO₂杂化材料的安培型葡萄糖生物传感器[J]. 高等学校化学学报, 2004,25(9):1645–1647. (TAN Xuecai,ZHAI Haiyun,LI Yin,et al. Amperometric glucose biosensor based on sol-gel chitosan/silica hybrid material[J]. Chemical Journal of Chinese Universities, 2004,25(9):1645–1647.)
- [7] 叶瑞洪,王万宗,林振宇. 一种新颖葡萄糖生化传感器的研制及其在鲁米诺电化学发光法测定葡萄糖含量的应用[J]. 理化检验(化学分册), 2011,47(7):761–763,773. (YE Ruihong,WANG Wanzong,LIN Zhenyu. Preparation of a novel biosensor for glucose and its application to the determination of glucose by the luminol-electrochemiluminescence[J]. Physical Testing and Chemical Analysis Part B:Chemical Analysis, 2011,47(7):761–763,773.)
- [8] 姜宇海,袁光生. 老年人血清中葡萄糖等生化指标分析[J]. 南京军医学院学报, 2003,25(2):133–134. (JIANG Yuhai,YUAN Guangsheng. Analysis of biochemical indicators such as glucose in the serum of elderly people[J]. Journal of Nanjing Military Medical College, 2003,25(2):133–134.)
- [9] MUSSO G,CASSADER M,ROSINA F,等. 目前推荐的肝脏疾病、葡萄糖代谢和心血管危险因素干预策略对非酒精性脂肪性肝病的影响[J]. 中华糖尿病杂志, 2013,5(5):319. (MUSSO G,CASSADER M,ROSINA F,et al. Impact of current treatments on liver disease,glucose metabolism and cardiovascular risk in Non-Alcoholic Fatty Liver Disease(NAFLD):a systematic review and meta-analysis of randomised trials[J]. Chinese Journal of Diabetes Mellitus, 2013,5(5):319.)
- [10] 张家庆. 血糖及其他体液葡萄糖测定进展[J]. 中华内分泌代谢杂志, 2003,19(4):333–335. (ZHANG Jiaqing. Progress in the determination of blood glucose and glucose of other body fluids[J]. Chinese Journal of Endocrinology and Metabolism, 2003,19(4):333–335.)
- [11] 凌腾芳,宣伟,樊颖瑞,等. 外源葡萄糖、果糖和NO供体(SNP)对盐胁迫下水稻种子萌发的影响[J]. 植物生理与分子生物学学报, 2005,31(2):205–212. (LING Tengfang,XUAN Wei,FAN Yingrui,et al. The effect of exogenous glucose,fructose and NO donor Sodium Nitroprusside(SNP) on rice seed germination under salt stress[J]. Journal of Plant Physiology and Molecular Biology, 2005,31(2):205–212.)
- [12] 王昕,杨文英,卜石,等. 果糖注射液对糖尿病患者血糖及胰岛素的影响[J]. 中华糖尿病杂志, 2005,13(5):378–380. (WANG Xin,YANG Wenying,BU Shi,et al. The effect of fructose infusion on the levels of blood glucose and insulin in T2DM[J]. Chinese Journal of Diabetes Mellitus, 2005,13(5):378–380.)
- [13] HOCINE L L,江波,王璋. 双酶法生产高纯度低聚果糖的研究[J]. 食品科学, 1997,18(9):24–27. (HOCINE L L,JIANG Bo,WANG Zhang. Study on the production of high purity fructooligosaccharides by double enzyme method[J]. Food Science, 1997,18(9):24–27.)
- [14] 张同军,侯迪波,曹丙花,等. 两种晶体己醛糖的太赫兹时域光谱研究[J]. 浙江大学学报(工学版), 2008,42(4):579–582. (ZHANG Tongjun,HOU Dibo,CAO Binghua,et al. Terahertz time-domain spectroscopy of two crystalline aldohexoses[J]. Journal of Zhejiang University(Engineering Science), 2008,42(4):579–582.)
- [15] 马晓菁,赵红卫,刘桂锋,等. 多种糖混合物的太赫兹时域光谱定性及定量分析研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2009,29(11):2885–2888. (MA Xiaojing,ZHAO Hongwei,LIU Guifeng,et al. Qualitative and quantitative analyses of some saccharides by THz-TDS[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2009,29(11):2885–2888.)
- [16] ZHENG Zhuanping,FAN Wenhui,LIANG Yuqing,et al. Application of terahertz spectroscopy and molecular modeling in isomers investigation:glucose and fructose[J]. Optics Communications, 2012,285(7):1868–1871.

- [17] 王文爱,刘维,杨茜,等. 无水葡萄糖的太赫兹时域光谱特性[J]. 中国激光, 2016,43(11):235–242. (WANG Wenai,LIU Wei, YANG Qian, et al. Terahertz time-domain spectroscopy of anhydrous glucose[J]. Chinese Journal of Lasers, 2016, 43(11): 235–242.)
- [18] 吴建,刘燕德,李斌,等. 基于太赫兹光谱的奶粉中葡萄糖及蔗糖定性定量检测方法[J]. 光谱学与光谱分析, 2019,39(8): 2568–2573. (WU Jian,LIU Yande,LI Bin, et al. Qualitative and quantitative detection of glucose and sucrose in milk powder based on terahertz spectroscopy[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2019,39(8):2568–2573.)
- [19] 王文爱,刘维. 不同糖类化合物的太赫兹光谱特性[J]. 光谱学与光谱分析, 2021,41(8):2391–2396. (WANG Wenai,LIU Wei. Terahertz spectroscopy characteristics of sugar compounds[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2021,41(8):2391–2396.)
- [20] 丁玲. 同分异构与分子结构相似有机物太赫兹波谱研究[D]. 西安:西安光学精密机械研究所, 2017. (DING Ling. Terahertz spectroscopy study on isomeric organics and organics with similar molecular structures[D]. Xi'an,China:Xi'an Institute of Optics and Precision Mechanics, 2017.)
- [21] 燕芳,张俊林,毛莉程,等. 基于太赫兹辐射的糖类异构体信息提取方法研究[J]. 光谱学与光谱分析, 2022,42(1):26–30. (YAN Fang,ZHANG Junlin,MAO Licheng, et al. Research on information extraction method of carbohydrate isomers based on terahertz radiation[J]. Spectroscopy and Spectral Analysis, 2022,42(1):26–30.)

作者简介:

刘智星(1997–), 男, 硕士, 主要研究方向为太赫兹光电子学 .email:2744131758@qq.com.

赵国忠(1964–), 男, 博士, 教授, 主要研究方向为太赫兹光电子学.

舒敬懿(1998–), 男, 硕士, 主要研究方向为太赫兹光电子学.