

光谱学与光谱分析

基于密度泛函方法的梓醇红外光谱的预测

孙晓丽¹,董春红²,孙雨安¹,符德学²,谢冰¹,王国庆^{1*}

1. 郑州轻工业学院应用化学系, 河南 郑州 450002
2. 焦作大学怀药工程研究中心, 河南 焦作 454003

收稿日期 2008-5-12 修回日期 2008-8-18 网络版发布日期 2009-9-1

摘要 梓醇是一种具有特殊药理活性的环烯醚萜苷类化合物。采用密度泛函(DFT)B3LYP/6-311G^{**}方法对梓醇分子的几何构型进行全优化,得到其几何构型参数,进一步计算得到梓醇的红外振动光谱,振动频率校正因子为0.96。对计算得到的振动频率进行归属和解析并与实验测定得到的梓醇IR光谱特征峰比较,发现理论计算出的IR光谱与实验测定IR特征峰位具有很好的一致性,说明所采用的DFT方法能够用于梓醇分子几何构型的优化,预测难以得到标准对照品的环烯醚萜苷类化合物的IR光谱数据。

关键词 [梓醇](#) [红外光谱\(IR\)](#) [密度泛函](#)

分类号 [O644.1](#)

DOI: 10.3964/j.issn.1000-0593(2009)09-2383-05

通讯作者:

王国庆 gqwang@zzuli.edu.cn

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(572KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(OKB\)](#)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [参考文献](#)

服务与反馈

▶ [把本文推荐给朋友](#)

▶ [加入我的书架](#)

▶ [加入引用管理器](#)

▶ [引用本文](#)

▶ [Email Alert](#)

相关信息

▶ [本刊中包含“梓醇”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [孙晓丽](#)

· [董春红](#)

· [孙雨安](#)

· [符德学](#)

· [谢冰](#)

· [王国庆](#)