

研究简报

阿普唑仑的波谱学数据和结构确证

屈智博¹; 陈晓岚^{1*}; 屈凌波^{1,2}; 袁金伟¹; 卢建莎¹; 赵玉芬^{1,3}

(1. 郑州大学 化学系, 河南省化学生物与有机化学重点实验室, 河南 郑州 450052;

2. 河南工业大学 化学化工学院, 河南 郑州 450002; 3. 清华大学 化学系, 教育部生命有机磷化学和化学生物学重点实验室, 北京 100084)

收稿日期 2008-11-14 修回日期 2008-12-18 网络版发布日期 2009-6-5 接受日期

摘要 阿普唑仑是一种临床上广泛应用的具有抗抑郁作用的药物. 本文对阿普唑仑进行了¹H、¹³C NMR检测, 通过DEPT和¹H-¹H COSY、¹³C-¹H HSQC、¹³C-¹H HMBC等2D NMR技术对该化合物的¹H、¹³C NMR谱的信号进行了全归属, 通过量子化学计算和NMR数据证实了化合物中亚甲基上2个氢的磁不等价性. 讨论了红外吸收光谱的特征峰, 并对阿普唑仑的TOF MS的裂解途径进行了分析.

关键词 [核磁共振 \(NMR\)](#); [归属](#); [IR](#); [TOF MS](#); [阿普唑仑](#)

分类号 [O641](#)

DOI:

通讯作者:

陈晓岚 chenxl@zzu.edu.cn

作者个人主页: [屈智博¹](#); [陈晓岚^{1*}](#); [屈凌波^{1,2}](#); [袁金伟¹](#); [卢建莎¹](#); [赵玉芬^{1,3}](#)

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF \(476KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\] \(0KB\)](#)

▶ [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“核磁共振 \(NMR\); 归属; IR; TOF MS; 阿普唑仑” 的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [屈智博; 陈晓岚; 屈凌波; 袁金伟; 卢建莎; 赵玉芬](#)