

研究论文

药物小分子化学位移的量子化学计算研究

苏永超, 郑安民, 李申慧, 陈雷, 邓风

1. 波谱与原子分子物理国家重点实验室(中国科学院 武汉物理与数学研究所), 湖北 武汉 430071; 2. 中国科学院 研究生院, 北京 100049

收稿日期 2006-3-10 修回日期 2006-3-27 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 核磁共振的谱峰归属对分子结构的确定至关重要, 用理论计算方法预测化学位移对谱峰的正确归属是极其有帮助的. 我们用量子化学的方法预测了乙酰水杨酸及其衍生物分子上碳原子的化学位移, 并通过比较计算值和实验值得到不同理论计算方法的误差范围. 用HF和DFT理论计算芳环碳的化学位移时, CSGT方法比GIAO方法更为准确. 与其它方法相比, B3PW91//CSGT 在6-311G(d, p)基组下得到的芳环碳的化学位移最接近实验值. 采用B3LYP//GIAO计算时, 使用不同的基组 6-31G(d, p)和6-311++G(3df, 3pd)得到的化学位移计算值只有 $\delta$  0.01~2.04的差异. MP2方法非常耗时, 且对于计算精度的改善并不显著; 并且, 由于电子相关性的影响, 碳原子周围的电子环境对化学位移计算的准确性影响很大. 与实验值比较, HF方法由于忽略电子相关效应所以表现较差. 另外, 碳链的增长对计算准确性也存在一定影响.

**关键词** [核磁共振](#); [化学位移](#); [乙酰水杨酸](#); [量化计算](#); [密度泛函](#)

**分类号** [O641.12](#)

**DOI:**

通讯作者:

邓风 [dengf@wipm.ac.cn](mailto:dengf@wipm.ac.cn)

作者个人主页: [苏永超](#); [郑安民](#); [李申慧](#); [陈雷](#); [邓风](#)

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF \(395KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\] \(0KB\)](#)
- ▶ [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; 化学位移; 乙酰水杨酸; 量化计算; 密度泛函”的相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)
- ▶ [苏永超, 郑安民, 李申慧, 陈雷, 邓风](#)