

研究论文

溶液小分子空间结构的NMR测定——Tranilast在丙酮溶液中的三维结构

吴冬辉; 沈联芳

中国科学院武汉物理研究所波谱与原子分子物理开放实验室, 武汉 430071

摘要:

本文应用矩阵分析的方法对相敏NOESY二维谱的峰强度进行处理, 从使用较长混合期的实验中获得了较为精确的交叉弛豫速率率, 进而得到有相关峰的各对核之间的距离, 此方法适用于研究处于极端窄化运动条件下的小分子的三维空间结构。本文运用此方法研究了药物TRANILAST在丙酮溶液中的三维空间结构, 并用分子力学计算方法对实验结果进行了验证。

关键词: 三维空间结构 核磁共振 驰豫矩阵分析 分子力学计算 Tranilast

收稿日期 1990-08-27 修回日期 1991-01-05 网络版发布日期 1992-02-15

通讯作者: 沈联芳 Email:

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

[PDF\(1024KB\)](#)

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](#)

[文章反馈](#)

[浏览反馈信息](#)

本文关键词相关文章

▶ [三维空间结构](#)

▶ [核磁共振](#)

▶ [驰豫矩阵分析](#)

▶ [分子力学计算](#)

▶ [Tranilast](#)

本文作者相关文章

▶ [吴冬辉](#)

▶ [沈联芳](#)