

# Study on Characters of Arginine by Density Functional Theory

Ye Liu, Cunhai Liu, Jilei Zhang, Xiaodong Cui

School of Basic Sciences for Aviation, Naval Aviation University, Yantai Shandong  
Email: cunhai1118@163.com

Received: Feb. 1<sup>st</sup>, 2019; accepted: Feb. 14<sup>th</sup>, 2019; published: Feb. 21<sup>st</sup>, 2019

---

## Abstract

In this paper, the arginine is studied at the 6-31G(d) basis set level, using the B3LYP method of density functional theory. Through calculation, the stable structure and its infra-red spectrum are gained. The results show that the infrared vibration spectrum includes four regions on the base of molecular vibration type. The vibration type is the whole rotation or oscillation of group in the region of (0 - 800)  $\text{cm}^{-1}$ . In the region of (800 - 1500)  $\text{cm}^{-1}$ , the vibration type is main out-plane bending vibration, the out-plane bending vibration mode is the main vibration type in the region of (1500 - 2800)  $\text{cm}^{-1}$ , and in the region of (2800 - 4000)  $\text{cm}^{-1}$ , the vibration type is main stretching vibration mode. Besides, there are non-infrared and activity in the infra-red spectrum.

## Keywords

Arginine, Infra-Red Spectrum, Infrared Activity, Degeneracy

---

# 精氨酸的密度泛函理论研究

柳 叶, 刘存海, 张纪磊, 崔晓东

海军航空大学航空基础学院, 山东 烟台  
Email: cunhai1118@163.com

收稿日期: 2019年2月1日; 录用日期: 2019年2月14日; 发布日期: 2019年2月21日

---

## 摘 要

本文采用密度泛函理论的方法在B3LYP/6-31G(d)水平上对精氨酸进行了研究, 计算得到了精氨酸的稳定分子构型及其红外振动光谱, 研究发现, 根据分子振动类型的不同可将红外光谱划分为四个区域, 其中在(0~800)  $\text{cm}^{-1}$ 区域对应的分子的振动类型主要为各基团的整体转动或摆动; 在(800~1500)  $\text{cm}^{-1}$ 范

围内谱峰所对应的分子振动模式主要是面外弯曲振动,在(1500~2800)  $\text{cm}^{-1}$ 分子的振动类型主要是面内弯曲振动,在(2800~4000)  $\text{cm}^{-1}$ 区域,分子的振动类型主要为各原子的伸缩振动。此外,在光谱中出现了无红外活性和简并的现象。

## 关键词

精氨酸, 红外光谱, 红外活性, 简并

Copyright © 2019 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

## 1. 引言

精氨酸 Arginine 是构成蛋白质的基本单元,是组成人体蛋白质的 21 种氨基酸之一。天然精氨酸为 L-型,从水中结晶的产物含两分子结晶水,在乙醇中结晶是无水物。性状为白色斜方晶系晶体或白色结晶粉末,熔点  $244^{\circ}\text{C}$ ,经水重新结晶后,已于  $105^{\circ}\text{C}$  失去结晶水。其水溶液呈强碱性,可以从空气中吸收二氧化碳。溶于水(15%,  $21^{\circ}\text{C}$ ),不溶于乙醚,微溶于乙醇[1]。天然品大量存在于鱼精蛋白中。研究表明,精氨酸对治疗心血管疾病、高氨血症、肝脏机能障碍等疾病颇有效果。精氨酸是一种双基氨基酸,对于成人来说虽然不是必须氨基酸,但在有些情况如机体发育不成熟或在严重应激条件下,如果缺乏氨基酸,机体便不能维持正氮平衡与正常的生理功能。若缺乏精氨酸会导致血氨过高,甚至昏迷。婴儿若先天性缺乏尿素循环的某些酶,精氨酸对其也是必须的,否则不能维持其正常的生长与发育。精氨酸的重要代谢功能是促进伤口的愈合作用,它可促进胶原组织的合成,故能修复伤口。

密度泛函方法[2] [3]是在量子力学基础上发展起来的一种计算方法,已被广泛地应用于计算化学、物理等领域,可成功地预测和解释各种材料中存在的现象。调研发现,目前国内外对精氨酸的理论和实验研究较少。本文运用 Gaussian 09 计算程序,在 B3LYP/6-31G(d)水平上利用量化计算的方法对精氨酸分子的结构特点和红外光谱分布及形成规律进行了研究,以期能为精氨酸的快速检测提供理论支持。

## 2. 计算方法

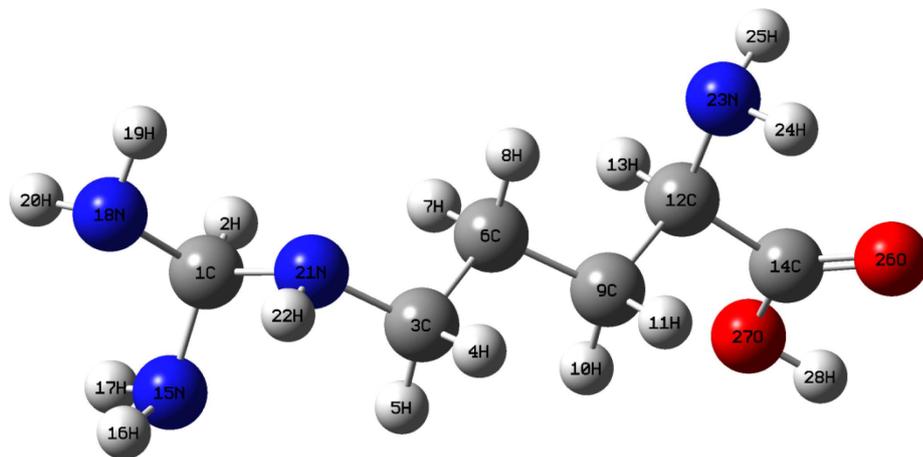
首先利用 Gauss View 和 Chem Office 软件猜测构建了精氨酸分子的初始构型,运用 Gaussian09 计算程序中的 HF/3-21G(d)方法对分子构型进行了初步优化,然后利用 B3LYP/6-31G(d)方法,在优化所得初始构型基础上优化得到了分子和离子的最终稳定构型,最后对所得构型进行频率计算和分析,得到了分子和离子的红外振动光谱。文中频率计算采用 0.9613 [4]的修正因子进行矫正。

## 3. 结果与讨论

### 3.1. 精氨酸分子的结构

精氨酸分子结构如图 1 所示。表 1 中列出了精氨酸分子的部分结构参数。分子结构中骨架 C、N、O 原子呈现出链式结构的特点。结构中共存在 N-H、N-C、C-H、C-C、C=O、C-O、O-N、O-H 共 6 种化学键。在分子结构中,3C-6C 键和 9C-6C 键键长近似相等,均为  $1.533 \text{ \AA}$ ,9C-12C 键键长为  $1.556 \text{ \AA}$ ,12C-14C 键键长为  $1.530 \text{ \AA}$ ;结构中 15N-1C 键和 18N-1C 键键长均为  $1.466 \text{ \AA}$ ,而 21N-1C 键键长为  $1.452 \text{ \AA}$ ,23N-12C 键键长为  $1.459 \text{ \AA}$ ;14C=26O 键键长为  $1.212 \text{ \AA}$ ,14C-27O 键键长为  $1.356 \text{ \AA}$ ;分子中 15N-16H 和 15N-17H

分子键键长均为 1.021 Å, 15N-19H、21N-22H 和 18N-22H 三个分子键键长均为 1.019 Å, 23N-24H 和 23N-25H 两个分子键键长均为 1.023 Å; 结构中 12C-13H、10H-9C、3C-4H 键键长均为 1.097 Å, 11H-9C、5H-3C 和 2H-1C 三个键的键长均为 1.101 Å, 7H-6C 键长为 1.099 Å, 8H 和 6C 键长为 1.094 Å。结构中各原子间所成键角中,  $\angle 6C-3C-1C$ 、 $\angle 28H-27C-14C$  和  $\angle 22H-21N-1C$  均为  $106^\circ$ ,  $\angle 17H-15N-1C$ 、 $\angle 18N-1C-15N$  和  $\angle 23N-12C-9C$  均为  $111^\circ$ ,  $\angle 7H-6C-3C$ 、 $\angle 8H-6C-3C$ 、 $\angle 10H-9C-6C$ 、 $\angle 11H-9C-6C$  和  $\angle 20H-18N-1C$  均为  $110^\circ$ ,  $\angle 13H-12C-9C$ 、 $\angle 16H-15N-1C$  和  $\angle 24H-23N-12C$  均为  $108^\circ$ ,  $\angle 26O-14C-12C$  为  $125^\circ$ ,  $\angle 4H-3C-1C$  为  $136^\circ$ ,  $\angle 5H-3C-1C$  和  $\angle 3C-1C-2H$  均为  $89^\circ$ 。在各原子所形成的二面角中,  $\angle 12C-9C-6C-3C$  和  $\angle 28H-27C-14C-12C$  两个二面角均为  $180^\circ$ , 因此分别参与形成三个二面角的四个原子处于同一平面内。



**Figure 1.** Stable structure of arginine  
**图 1.** 精氨酸分子的稳定构型

**Table 1.** Partial structural parameter of arginine  
**表 1.** 精氨酸分子的部分结构参数

键长(Å)		键角( $^\circ$ )		二面角( $^\circ$ )	
2H-1C	1.101	3C-1C-2H	89	4H-3C-1C-2H	157
3C-1C	2.473	4H-3C-1C	136	5H-3C-1C-2H	-92
4H-3C	1.097	5H-3C-1C	89	6C-3C-1C-2H	18
5H-3C	1.101	6C-3C-1C	106	7H-6C-3C-1C	-27
6C-3C	1.533	7H-6C-3C	110	8H-6C-3C-1C	89
7H-6C	1.099	8H-6C-3C	110	9C-6C-3C-1C	-148
8H-6C	1.094	9C-6C-3C	112	10H-9C-6C-3C	60
9C-6C	1.533	10H-9C-6C	110	11H-9C-6C-3C	-57
10H-9C	1.097	11H-9C-6C	110	12C-9C-6C-3C	180
11H-9C	1.101	12C-9C-6C	113	13H-12C-9C-6C	-56
12C-9C	1.546	13H-12C-9C	108	14C-12C-9C-6C	-172
13H-12C	1.097	14C-12C-9C	109	15N-1C-3C-6C	124
14C-12C	1.530	15N-1C-3C	95	16H-15N-1C-3C	106
15N-1C	1.466	16H-15N-1C	108	17H-15N-1C-3C	-138
16H-15N	1.021	17H-15N-1C	111	18N-1C-15N-3C	-146
17H-15N	1.021	18N-1C-15N	111	19H-18N-1C-15N	177

Continued

18N-1C	1.466	19H-18N-1C	109	20H-18N-1C-15N	-65
19H-18N	1.019	20H-18N-1C	110	21N-1C-15N-18N	119
20H-18N	1.019	21N-1C-15N	113	22H-21N-1C-15N	-65
21N-1C	1.452	22H-21N-1C	106	23N-12C-9C-6C	63
22H-21N	1.019	23N-12C-9C	111	24H-23N-12C-9C	73
23N-12C	1.459	24H-23N-12C	108	25H-23N-12C-9C	-173
24H-23N	1.023	25H-23N-12C	109	26O-14C-12C-9C	-106
25H-23N	1.023	26O-14C-12C	125	27O-14C-12C-9C	73
26O-14C	1.212	27O-14C-12C	112	28H-27C-14C-12C	180
27O-14C	1.356	28H-27C-14C	106		
28H-27C	0.976				

### 3.2. 精氨酸分子的红外振动光谱

物质因受红外光的作用,引起分子或原子基团的振动,若振动频率恰与红外光波段的某一频率相等时就引起共振吸收,使光的透射强度减弱,由此所得的光谱称为红外光谱[5]。红外吸收强度决定于振动时偶极矩变化的大小。若振动过程中偶极矩变化较大,则跃迁几率就会越大,红外光谱强度就会较强;反之,强度就会较弱[6][7]。

标准状况下,精氨酸分子的红外光谱如图2所示。为了更好地分析精氨酸的特性,我们对精氨酸分子的红外光谱进行了详细分析,对光谱中出现的各条谱线进行了指认,对谱线形成所对应的各振动形式进行了归属。分析发现,精氨酸分子的红外光谱中谱线数目少于分子的简正振动的数目,分析认为这主要是由于光谱中出现了无红外活性的现象[8]。根据分子的振动类型的不同可将精氨酸分子的红外振动光谱划分为四个区域:(0~800)  $\text{cm}^{-1}$ 、(800~1500)  $\text{cm}^{-1}$ 、(1500~2800)  $\text{cm}^{-1}$ 和(2800~4000)  $\text{cm}^{-1}$ 。此外,基本上红外光谱的每条谱峰都是由多个振动模式叠加而成的,且在光谱中出现了无红外活性和简并的现象。

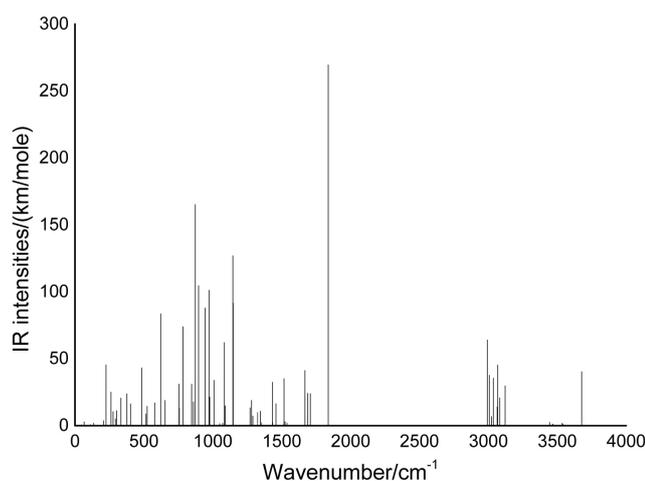


Figure 2. Infra-red spectrum of arginine  
图2. 精氨酸分子的红外光谱

在(0~800)  $\text{cm}^{-1}$ 区域,分子振动类型主要是各基团的整体转动或摆动。本区域的红外光谱强度相比其他区域的光谱强度整体较低,且在该区域中出现了无红外活性的现象,这主要是由于在该区域中的谱峰所对应的分子振动没有在较大程度上引起分子偶极矩的变化造或有些分子振动没有引起偶极矩

的变化而引起地。此外还在多个频率位置上出现了简并现象。该区域中最强峰出现在  $83\text{ cm}^{-1}$  位置, 它是由含 18N 的  $\text{NH}_2$  基团整体摆动引起地。次强峰出现在  $784\text{ cm}^{-1}$  位置, 它是由含 15N 的  $\text{NH}_2$  和含 23N 的两个  $\text{NH}_2$  基团的个子整体摆动的复合振动引起地。 $225\text{ cm}^{-1}$  位置谱峰是由含 15N 的  $\text{NH}_2$  基团的左右摆动和含 23N 的  $\text{NH}_2$  基团的整体转动以及含 18N 的  $\text{NH}_2$  基团的整体转动的复合振动引起地, 而  $484\text{ cm}^{-1}$  位置的振动峰则是由 18N 的  $\text{NH}_2$  基团整体转动引起地。此外, 在  $755\text{ cm}^{-1}$  位置出现了三重简并现象, 分别与含 C18 的  $\text{NH}_2$  基团的整体转动、含 C23 的  $\text{NH}_2$  基团的整体转动和 18N 的  $\text{NH}_2$  基团整体摆动相对应, 并且在  $112\text{ cm}^{-1}$ 、 $47\text{ cm}^{-1}$  和  $20\text{ cm}^{-1}$  三个位置出现了无红外活性的现象, 其中  $112$  位置的分子振动为含 N15 的  $\text{NH}_2$  基团的整体转动,  $47\text{ cm}^{-1}$  位置的分子振动类型为含 N23 的  $\text{NH}_2$  基团的整体转动的左右摆动,  $20\text{ cm}^{-1}$  位置的分子振动类型为含 23C 的  $\text{NH}_2$  的整体摆动和含 N18 的  $\text{NH}_2$  基团的整体转动的复合振动。

在  $(800\sim 1500)\text{ cm}^{-1}$  区域, 分子的振动类型主要是面外弯曲振动, 即面外摇摆振动和扭曲振动。该区域最强峰出现在  $872\text{ cm}^{-1}$  位置, 它也是整个光谱中的次强峰, 是由 16H 和 17H 的面外摇摆振动引起地, 次强峰出现在  $1145\text{ cm}^{-1}$  位置, 是由 19H 和 20H 的扭曲振动引起地, 而  $897\text{ cm}^{-1}$  位置的谱峰则是由 16H 和 17H 的扭曲振动与 24H 和 25H 的面外摇摆振动的复合振动引起地, 而同时 16H 和 17H 的摇摆振动与 24H 和 25H 的面外摇摆振动的复合振动的在  $1148\text{ cm}^{-1}$  位置引起一较强共振峰。此外, 在该区域光谱中, 出现了双重简并现象, 位置在  $978\text{ cm}^{-1}$ , 分别与 10H 和 11H 的扭曲振动, 以及 24H 和 25H 的扭曲振动相对应; 同时, 在  $1458\text{ cm}^{-1}$  位置出现了三重简并现象, 分别与 16H 和 17H 的扭曲振动与 19H 和 20H 的扭曲振动的额复合振动, 25H 和 24H 的面外摇摆振动, 以及 10H 和 11H 的面外摇摆振动相对应。此外, 由于 8H 和 7H 的剪式振动及 19H 和 20H 的面外摇摆振动时均没有引起偶极矩的变化, 致使在  $1072\text{ cm}^{-1}$  和  $1050\text{ cm}^{-1}$  两个位置出现了无红外活性的现象。

在  $(1500\sim 2800)\text{ cm}^{-1}$  区域, 分子的振动类型主要为面内弯曲振动, 即面内摇摆振动和剪式振动。该区域最强峰出现在  $1838\text{ cm}^{-1}$  位置, 它也是整个红外光谱的最强峰, 是由 19H 和 20H 的剪式振动、24H 和 25H 的面内摇摆振动及 26O 和 27O 的剪式振动的复合振动引起地。该区域的次强峰出现在  $1668\text{ cm}^{-1}$  位置, 起对应的分子振动类型是 19H 和 20H 的面内摇摆振动, 如图 3 所示。16H 和 17H 的剪式振动及 7H 和 8H 的面内摇摆振动的复合振动在  $1517$  位置引起一较强共振峰。16H 和 17H 的剪式振动在  $1689\text{ cm}^{-1}$  位置引起一较强共振峰, 振动模式如图 4 所示。24H 和 25H 的剪式振动在  $1708$  位置引起一共振峰, 而 7H 和 8H 的剪式振动、4H 和 5H 的剪式振动及 22H 的面内摇摆振动的复合振动在  $1525\text{ cm}^{-1}$  位置引起一共振峰。此外, 在  $1539\text{ cm}^{-1}$  和  $1515\text{ cm}^{-1}$  两个位置的共振峰出现了无红外活性的现象, 它们分别与 4H 和 5H 的剪式振动及 7H 和 8H 剪式振动的复合振动, 以及 10H 和 11H 的剪式振动及 7H 和 8H 剪式振动的复合振动相对应。

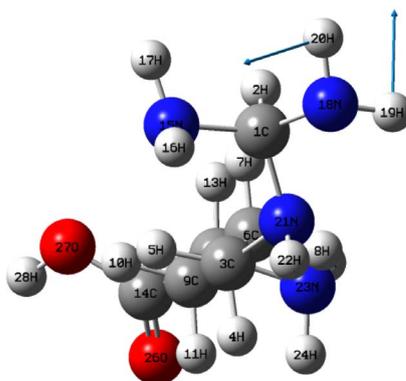
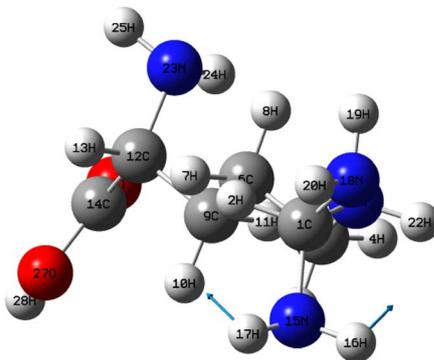
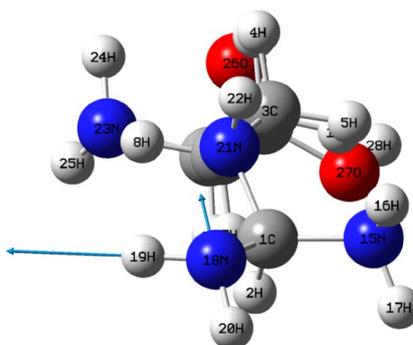


Figure 3.  $1668\text{ cm}^{-1}$  vibration mode  
图 3.  $1668\text{ cm}^{-1}$  振动模式

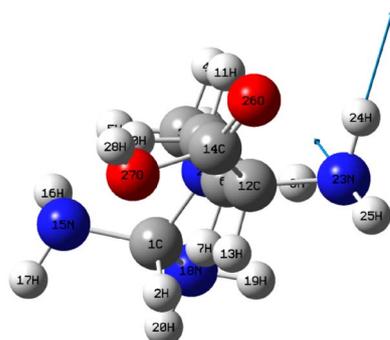


**Figure 4.**  $1689\text{ cm}^{-1}$  vibration mode  
**图 4.**  $1689\text{ cm}^{-1}$  振动模式

在 $(2800\sim 4000)\text{ cm}^{-1}$ 区域, 分子的振动类型主要为各原子的伸缩振动。区域最强峰出现在 $2992\text{ cm}^{-1}$ 位置, 主要是由 $2\text{H}$ 的伸缩振动引起地, 区域次强峰出现在 $3067\text{ cm}^{-1}$ 位置对应, 它与 $4\text{H}$ 的伸缩振动对应, 而 $28\text{H}$ 的伸缩振动在 $3676\text{ cm}^{-1}$ 位置引起一较强共振峰。在 $3006\text{ cm}^{-1}$ 位置的共振峰与 $4\text{H}$ 和 $5\text{H}$ 的对称伸缩振动相对应, 而 $10\text{H}$ 和 $11\text{H}$ 的对称伸缩振动则与 $3021\text{ cm}^{-1}$ 位置共振峰相对应。 $7\text{H}$ 的伸缩振动在 $3035\text{ cm}^{-1}$ 位置形成一较强共振峰, 其强度与 $8\text{H}$ 伸缩振动在 $3120\text{ cm}^{-1}$ 位置共振峰相近。在反对称伸缩振动引起地共振峰中较强的共振峰出现在 $3536\text{ cm}^{-1}$ 位置, 它是由 $16\text{H}$ 和 $17\text{H}$ 的反对称伸缩振动形成地, 而 $19\text{H}$ 和 $20\text{H}$ 的反对称伸缩振动, 以及 $24\text{H}$ 和 $25\text{H}$ 的反对称伸缩振动在 $3558\text{ cm}^{-1}$ 和 $3490\text{ cm}^{-1}$ 两个位置所引起的两个共振峰出现了无红外活性的现象, 其分子振动模式如图5和图6所示。



**Figure 5.**  $3558\text{ cm}^{-1}$  vibration mode  
**图 5.**  $3558\text{ cm}^{-1}$  振动模式



**Figure 6.**  $3490\text{ cm}^{-1}$  vibration mode  
**图 6.**  $3490\text{ cm}^{-1}$  振动模式

## 4. 结论

本文通过量化计算的方法获得了精氨酸分子的稳定构型和红外振动光谱, 并对分子构型特点和红外光谱分布规律进行了研究分析。分析发现, 精氨酸分子的红外光谱主要分布在四个区域, 在(0~800)  $\text{cm}^{-1}$  区域, 谱线强度整体较低, 振动类型以各基团的整体转动或摆动为主。在(800~1500)  $\text{cm}^{-1}$  区域, 分子的振动类型主要是面外弯曲振动, 即面外摇摆振动和扭曲振动。在(1500~2800)  $\text{cm}^{-1}$  区域, 分子的振动类型主要为各原子面内弯曲振动, 即面内摇摆振动和剪式振动。在(2800~4000)  $\text{cm}^{-1}$  区域, 分子的振动类型主要为各原子的伸缩振动。此外, 红外光谱中出现无红外活性和多重简并的现象。

## 参考文献

- [1] 高鸿宾. 有机化学[M]. 北京: 高等教育出版社, 2005: 612-618.
- [2] Lee, C., Yang, W.T. and Parr, R.G. (1988) Development of the Colle-Salvetti Correlation-Energy Formula into a Functional of the Electron Density. *Physical Review*, **B37**, 785-789. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.37.785>
- [3] Becke, D.A. (1988) Density-Functional Exchange-Energy Approximation with Correct Asymptotic Behavior. *Physical Review*, **A38**, 3098-3102. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.38.3098>
- [4] Wong, M.W., Wiberg, K.B. and Frisch, M.J. (1991) Hartree-Fock Second Derivatives and Electric Field Properties in a Solvent Reaction Field: Theory and Application. *The Journal of Chemical Physics*, **95**, 8991-8996. <https://doi.org/10.1063/1.461230>
- [5] 宁永成. 有机化合物结构鉴定与有机波谱学[M]. 北京: 科学出版社, 2000: 327-328.
- [6] 董庆年. 红外光谱法[M]. 北京: 化学工业出版社, 1979: 8-10.
- [7] 王莉, 何勇, 刘飞, 等. 应用光谱技术和支持向量机分析方法快速检测啤酒糖度和 pH 值[J]. 红外与毫米波学报, 2008, 27(1): 51-55.
- [8] 朱淮武. 有机分子结构波谱分析[M]. 北京: 化学工业出版社, 2005: 31-38.

### 知网检索的两种方式:

1. 打开知网页面 <http://kns.cnki.net/kns/brief/result.aspx?dbPrefix=WWJD>  
下拉列表框选择: [ISSN], 输入期刊 ISSN: 2160-7567, 即可查询
2. 打开知网首页 <http://cnki.net/>  
左侧“国际文献总库”进入, 输入文章标题, 即可查询

投稿请点击: <http://www.hanspub.org/Submission.aspx>  
期刊邮箱: [app@hanspub.org](mailto:app@hanspub.org)