

# 氟奋乃静的密度泛函理论研究

刘存海, 柳叶, 周鸣宇, 金靓婕

海军航空大学航空基础学院, 山东 烟台

收稿日期: 2024年11月20日; 录用日期: 2024年12月18日; 发布日期: 2024年12月26日

## 摘要

本研究运用了密度泛函理论框架下的B3LYP算法, 并在6-31G(d)基组层次上深入探究了氟奋乃静分子的理论特性, 成功获取了该分子的稳定结构及对应的红外光谱图。通过对红外光谱的细致分析, 我们依据分子振动模式的差异性, 将光谱区间划分为三个主要部分: 低频区(0~500)  $\text{cm}^{-1}$ 、中频区(500~3000)  $\text{cm}^{-1}$ 和高频区(3000~4000)  $\text{cm}^{-1}$ 三个区域。研究表明, 由于简并振动模式的存在以及部分振动模式不具备红外活性, 导致红外光谱图中实际显示的谱线条数少于理论上的简正振动总数。

## 关键词

氟奋乃静, 振动模式, 密度泛函理论, 红外光谱, 简并

# Study on Density Functional Theory of Fluphenazine

Cunhai Liu, Ye Liu, Mingyu Zhou, Liangjie Jin

School of Basic Sciences for Aviation, Naval Aviation University, Yantai Shandong

Received: Nov. 20<sup>th</sup>, 2024; accepted: Dec. 18<sup>th</sup>, 2024; published: Dec. 26<sup>th</sup>, 2024

## Abstract

This study uses B3LYP algorithm within the framework of Density Functional Theory (DFT) and conducts an in-depth exploration of the theoretical characteristics of the fluphenazine molecule at the 6-31G(d) basis set level. The stable structural features of the molecule and its corresponding infrared spectrum were successfully obtained. After meticulous analysis of the infrared spectroscopy graph, we divided the spectral range into three main parts based on the differences in molecular vibration modes: the low-frequency region (0~500)  $\text{cm}^{-1}$ , the mid-frequency region (500~3000)  $\text{cm}^{-1}$  and the high-frequency region (3000~4000)  $\text{cm}^{-1}$ . Due to the existence of degenerate vibrational modes and the lack of infrared activity in some vibrational modes, the actual number of spectral lines displayed in the infrared spectrum is less than the total number of theoretical normal

vibrations.

## Keywords

Fluphenazine, Vibration Mode, Density Functional Theory, Infrared Spectrum, Degenerate

Copyright © 2024 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

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



Open Access

## 1. 引言

氟奋乃静( $C_{22}H_{26}Cl_2F_3N_3OS$ ), 归类于吩噻嗪类哌嗪衍生物家族。作为一种针对多巴胺 D1 及 D2 受体具有阻滞效应的物质, 并展现出与 5-羟色胺(5-HT)受体的高亲和特性, 氟奋乃静在精神医学领域, 特别是针对单纯性、紧张型及慢性精神分裂症的治疗中, 显示出明确的疗效, 对患者的情感淡漠、行为退缩等问题进行有效干预, 并且在处理恶心与呕吐方面亦有所应用。尽管氟奋乃静在医学实践中展现出的治疗效果普遍得到肯定, 但其应用也伴随着一定的争议与挑战。特别是, 使用该药物后, 患者可能出现一系列椎体外系反应, 包括但不限于眼球斜视或固定向外上方、肢体异常扭转、角弓反张姿态、颈部僵硬、斜颈现象、无法静坐、肌肉抽搐以及舌根僵硬等运动功能障碍。为了缓解或预先防止这些副作用的出现, 临床实践中常考虑联合使用抗震颤麻痹药物。近年来, 科研界对氟奋乃静的兴趣持续升温, 研究视角广泛而深入, 不仅聚焦于其药理机制的深入剖析, 还涵盖了其在不同临床情境下的应用实践, 以及与其他药物间复杂相互作用关系的探索[1]-[3]。这些研究为氟奋乃静的更安全、有效使用提供了宝贵的科学依据。

本文基于密度泛函理论[4]-[7], 对氟奋乃静分子的结构特征和红外振动光谱的分布规律进行了详细分析, 有助于全面了解其各类药理特性, 更深入地洞察精神疾病的起源与演变历程, 为新药研发提供理论依据。

## 2. 计算方法

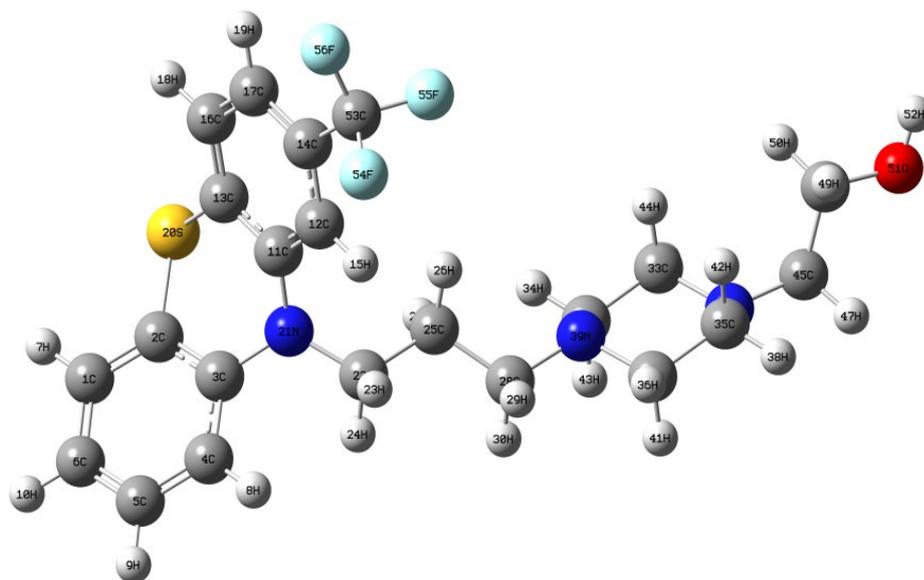
运用 GaussView 分子构型构建软件, 成功建构了氟奋乃静分子的结构模型, 运用 Gaussian09 这一计算平台, 依据 B3LYP 方法与 6-31G (d)基组设定进行深入的运算分析, 对初步构建的分子结构进行了全面且细致的优化, 并同步执行了频率分析步骤, 确保未检测到任何虚频, 从而有力地证明了所得分子构型的稳定性。通过深入剖析了频率计算的结果, 我们成功地获得了氟奋乃静分子的红外振动光谱图。针对该光谱中清晰展现的每一条谱带, 我们都进行了详尽的识别与解析, 并深入探讨了这些谱线形成的潜在机理。为了增强频率计算的精准度至更高水平, 采纳 0.9613 的修正因子[8]进行了修正。

## 3. 结果与讨论

### 3.1. 氟奋乃静分子的结构

氟奋乃静分子的稳定构型如图 1 所示。表 1 中详细列出了氟奋乃静分子的各项结构特征参数。根据计算结果, 氟奋乃静分子的整体构型呈现出良好的对称性, 该分子的构成中囊括了七种不同的化学键类型, 具体包括 C-C 键、H-C 键、C-N 键、S-C 键、F-C 键、O-C 键及 H-O 键。在 C-C 键中, 发现链式结构中的 C-C 键较长, 而 25C-22C 的键长为 1.531 Å, 48C-45C 的键长为 1.528 Å, 28C-25C 的键长为 1.530 Å; 而在由 39N 和 40N 所在的环状结构中, 33C-31C 的键长最长, 达到 1.522 Å, 这也是整个分子中四个环状结构中最长 C-C 键; 此外, 35C-32C 的键长为 1.521 Å。在由 20S 和 21N 所构成的环状结构中, 13C-

11C 和 3C-2C 的键长分别为 1.398 Å 和 1.394 Å；而在 14C 所在的环状结构中，14C-12C 键长最长，为 1.388 Å，12C-13C 键长为 1.386 Å，值得注意的是，17C-14C 和 16C-13C 键长相同，均为 1.381 Å；同时，三氟甲基与环状结构所形成的 53C-14C 键长为 1.503 Å；另外，在 5C 所在的分子结构中，4C-3C 键长最长，为 1.390 Å，5C-4C 键长为 1.386 Å。在 H-C 键中，呈现出一定的规律性。具体而言，30H-28C 键长最长，为 1.096 Å，在含 17C 的环状结构中，18H-16C 键长相对较长，为 1.074 Å，而 15H-12C 和 19H-17C 的键长均为 1.072 Å；在含 5C 的环状结构中，除 8H-4C 键长为 1.073 Å 外，其余 10H-6C、7H-1C 和 9H-5C 三个 H-C 键长均为 1.075 Å；在含 40N 的环状结构中，41H-32C 和 43H-31C 键长均为 1.094 Å，也是该环状结构中最长的 H-C 键；在链式结构中的 H-C 键中，30H-28C 的键长最长，为 1.096 Å，50H-48C 和 49H-48C 键长均为 1.088 Å，46H-45C 和 47H-45C 键长均为 1.085 Å，最短 H-C 键为 24H-22C，为 1.080 Å。在 C-N 键中，22C-21N 键长最长，为 1.456 Å，而 11C-21N 键最短，为 1.408 Å；45C-40N 和 35C-40N 的键长均为 1.448 Å。此外，分子中仅含有两个 20S-13C 和 20S-2C S-C 键，键长分别为 1.773 Å 和 1.776 Å。在 F-C 键中，56F-53C 键长最长为 1.322 Å，54F-53C 和 55F-53C 键长均为 1.325 Å。同时，分子结构中还分别包含一个 O-C 键和一个 H-O 键，键长分别为 1.405 Å 和 0.946 Å。



**Figure 1.** Stable structure of fluphenazine  
**图 1.** 氟奋乃静分子的稳定构型

在探讨该分子各原子间的键角分布时， $\angle 27\text{H}-25\text{C}-22\text{C}$ 、 $\angle 29\text{H}-28\text{C}-25\text{C}$ 、 $\angle 44\text{H}-33\text{C}-31\text{C}$ 、 $\angle 42\text{H}-35\text{C}-32\text{C}$ 、 $\angle 47\text{H}-45\text{C}-40\text{N}$  以及  $\angle 46\text{H}-45\text{C}-40\text{N}$  均约为  $108^\circ$ ，显示出较强的结构稳定性。而  $\angle 52\text{H}-51\text{O}-48\text{C}$ 、 $\angle 40\text{N}-35\text{C}-32\text{C}$  以及  $\angle 30\text{H}-28\text{C}-25\text{C}$  与之略有增加，约为  $110^\circ$ ，这可能与局部电子云分布或空间位阻效应有关。此外，结构中一些键角展现出更大的偏离，如  $55\text{F}-53\text{C}-14\text{C}$ 、 $54\text{F}-53\text{C}-14\text{C}$ 、 $23\text{H}-22\text{C}-21\text{N}$  以及  $56\text{F}-53\text{C}-14\text{C}$ ，这些键角均约为  $112^\circ$ ，可能反映了分子中特定官能团或取代基的影响。最后，键角如  $53\text{C}-14\text{C}-12\text{C}$ 、 $9\text{H}-5\text{C}-4\text{C}$ 、 $7\text{H}-1\text{C}-2\text{C}$  以及  $18\text{H}-16\text{C}-13\text{C}$ ，它们均接近  $119^\circ$ ，这一角度接近理想平面三角形的内角，表明这些原子可能位于一个相对平坦的分子平面上。各二面角中， $\angle 24\text{H}-22\text{C}-21\text{N}-11\text{C}$ 、 $\angle 28\text{C}-25\text{C}-22\text{C}-21\text{N}$ 、 $\angle 39\text{N}-28\text{C}-25\text{C}-22\text{C}$ 、 $\angle 53\text{C}-14\text{C}-12\text{C}-11\text{C}$  和  $\angle 56\text{F}-53\text{C}-14\text{C}-12\text{C}$  均为  $180^\circ$ ； $\angle 4\text{C}-3\text{C}-2\text{C}-1\text{C}$ 、 $\angle 5\text{C}-4\text{C}-3\text{C}-2\text{C}$ 、 $\angle 6\text{C}-5\text{C}-4\text{C}-3\text{C}$ 、 $\angle 7\text{H}-1\text{C}-2\text{C}-3\text{C}$  和  $\angle 9\text{H}-5\text{C}-4\text{C}-3\text{C}$  等 12 个二面角均为  $0^\circ$ ，间接表明氟奋乃静分子构型的良好对称性。

**Table 1.** Structure parameters of fluphenazine  
**表 1.** 氟奋乃静分子的结构参数

键长(Å)		键角(°)		二面角(°)	
2C-1C	1.384	3C-2C-1C	121	4C-3C-2C-1C	0
3C-2C	1.394	4C-3C-2C	118	5C-4C-3C-2C	0
4C-3C	1.390	5C-4C-3C	121	6C-5C-4C-3C	0
5C-4C	1.386	6C-5C-4C	121	7H-1C-2C-3C	0
6C-5C	1.383	7H-1C-2C	119	8H-4C-3C-2C	-177
7H-1C	1.075	8H-4C-3C	120	9H-5C-4C-3C	0
8H-4C	1.073	9H-5C-4C	119	10H-6C-5C-4C	0
9H-5C	1.075	10H-6C-5C	121	11C-3C-2C-1C	-157
10H-6C	1.075	11C-3C-2C	96	12C-11C-3C-2C	148
12C-11C	1.386	13C-11C-3C	95	14C-12C-11C-3C	-144
13C-11C	1.398	14C-12C-11C	121	15H-12C-11C-3C	36
14C-12C	1.388	15H-12C-11C	120	16C-13C-11C-3C	157
15H-12C	1.072	16C-13C-11C	121	17C-14C-12C-11C	0
16C-13C	1.381	17C-14C-12C	121	18H-16C-13C-11C	0
17C-14C	1.381	18H-16C-13C	119	19H-17C-14C-12C	0
18H-16C	1.074	19H-17C-14C	121	20S-13C-11C-3C	-25
19H-17C	1.072	20S-13C-11C	118	21N-11C-3C-2C	-140
20S-13C	1.773	21N-11C-3C	32	22C-21N-11C-3C	-159
21N-11C	1.408	22C-21N-11C	120	23H-22C-21N-11C	64
22C-21N	1.456	23H-22C-21N	112	24H-22C-21N-11C	180
23H-22C	1.089	24H-22C-21N	107	25C-22C-21N-11C	-61
24H-22C	1.080	25C-22C-21N	113	26H-25C-22C-21N	64
25C-22C	1.531	26H-25C-22C	111	27H-25C-22C-21N	-53
26H-25C	1.083	27H-25C-22C	108	28C-25C-22C-21N	180
27H-25C	1.084	28C-25C-22C	111	29H-28C-25C-22C	-53
28C-25C	1.530	29H-28C-25C	108	30H-28C-25C-22C	63
29H-28C	1.086	30H-28C-25C	110	31C-28C-25C-22C	156
30H-28C	1.096	31C-28C-25C	100	32C-31C-28C-25C	150
33C-31C	1.522	34H-31C-28C	89	35C-32C-31C-28C	-158
34H-31C	1.082	35C-32C-31C	90	36H-32C-31C-28C	-34
35C-32C	1.521	36H-32C-31C	144	37H-33C-31C-28C	0
36H-32C	1.085	37H-33C-31C	109	38H-35C-32C-31C	-148
37H-33C	1.085	38H-35C-32C	109	39N-28C-25C-22C	180
38H-35C	1.085	39N-28C-25C	113	40N-35C-32C-31C	-29
39N-28C	1.451	40N-35C-32C	110	41H-32C-31C-28C	93

续表

40N-35C	1.448	41H-32C-31C	94	42H-35C-32C-31C	95
41H-32C	1.094	42H-35C-32C	108	43H-31C-28C-25C	-118
42H-35C	1.093	43H-31C-28C	94	44H-33C-31C-28C	-63
43H-31C	1.094	44H-33C-31C	108	45C-40N-35C-32C	-167
44H-33C	1.093	45C-40N-35C	116	46H-45C-40N-35C	171
45C-40N	1.448	46H-45C-40N	108	47H-45C-40N-35C	56
46H-45C	1.085	47H-45C-40N	108	48C-45C-40N-35C	-67
47H-45C	1.085	48C-45C-40N	117	49H-48C-45C-40N	60
48C-45C	1.528	49H-48C-45C	111	50H-48C-45C-40N	-60
49H-48C	1.088	50H-48C-45C	111	51O-48C-45C-40N	0
50H-48C	1.088	51O-48C-45C	106	52H-51O-48C-45C	0
51O-48C	1.405	52H-51O-48C	110	53C-14C-12C-11C	180
52H-51O	0.946	53C-14C-12C	119	54F-53C-14C-12C	-41
53C-14C	1.503	54F-53C-14C	112	55F-53C-14C-12C	78
54F-53C	1.325	55F-53C-14C	112	56F-53C-14C-12C	180
55F-53C	1.325	56F-53C-14C	112		
56F-53C	1.322				

### 3.2. 氟奋乃静分子的红外振动光谱

红外振动光谱的形成根源在于分子内部电子在振动能级之间的跃迁过程。光谱中谱线的强度直接关联于电子跃迁的概率，这一概率又紧密依赖于跃迁过程中所涉及的偶极矩的数值。红外振动光谱的强度大小取决于由振动所导致的偶极矩变动幅度。在振动进程中，若偶极矩发生较大幅度的变化，则会促使电子跃迁的几率增加，进而增强光谱的强度表现。相反地，若分子在振动过程中偶极矩的变化幅度较小，电子跃迁的几率则会相应减小，从而使得红外光谱的强度展现出较弱的特点[8]。

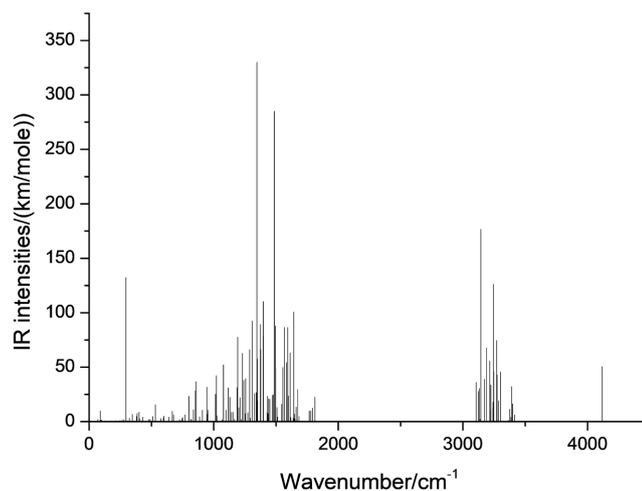


Figure 2. Infrared spectrum of fluphenazine

图 2. 氟奋乃静分子红外光谱

图 2 为计算所得氟奋乃静的红外振动光谱。经过我们的深入探究，发现尽管分子存在大量的简正振动，但在光谱中观测到的谱线条数却相对较少。这一现象的产生，主要是因为部分振动模式未能导致分子偶极矩发生显著变化，因此这些模式在红外光谱中并不活跃，即缺乏红外活性。此外，简并效应也是造成谱线条数减少的一个重要因素。基于分子振动的不同特性，我们可以将氟奋乃静的红外振动光谱划分为三个主要区域进行进一步探讨：即低频区(0~500)  $\text{cm}^{-1}$ 、中频区(500~3000)  $\text{cm}^{-1}$  和高频区(3000~4000)  $\text{cm}^{-1}$ 。

在红外光谱的低频范围(0~500)  $\text{cm}^{-1}$  内，光谱的整体强度较为微弱。这一区域内的振动模式主要涉及分子内部基团的整体旋转、摆动以及环状结构的呼吸振动。具体而言，最强的振动特征出现在 296  $\text{cm}^{-1}$  处，它主要源于 52H 的摆动振动，如图 3 所示。次强峰则位于 89  $\text{cm}^{-1}$ ，其对应的分子振动模式如图 4 描绘，表现为包含 48C 的  $\text{CH}_2$  基团的整体摆动。此外，在 400  $\text{cm}^{-1}$  处，由 28C、32C 和 33C 的  $\text{CH}_2$  基团的整体旋转构成的复合振动产生了一个显著的共振峰。而在 384  $\text{cm}^{-1}$  位置，含 28C 的整体摆动与含 5C 环状结构的呼吸振动共同形成了一个较强的谱峰。在 346  $\text{cm}^{-1}$  处，共振峰则是由含 20 S 环状结构的呼吸与含 53C 的  $\text{CF}_3$  基团的整体摆动组合而成。另外，在 380  $\text{cm}^{-1}$  处观察到的共振峰与分子结构中的四个环状结构的呼吸振动相对应。同时，含有 28C 的  $\text{CH}_2$  基团的整体转动和整体摆动分别在 430  $\text{cm}^{-1}$  和 322  $\text{cm}^{-1}$  处形成了共振峰，其中 430  $\text{cm}^{-1}$  处的共振峰强度更为显著。然而，在 9  $\text{cm}^{-1}$ 、40  $\text{cm}^{-1}$ 、191  $\text{cm}^{-1}$  和 306  $\text{cm}^{-1}$  等位置，我们发现了无红外活性的现象。例如，9  $\text{cm}^{-1}$  处的共振峰对应于含 40N 的环状结构的呼吸振动，而 40  $\text{cm}^{-1}$  处的共振峰则与含 53C 的  $\text{CF}_3$  基团的整体转动相关。此外，在 48  $\text{cm}^{-1}$  位置，我们观察到了双重简并现象，其对应的分子振动模式分别为含 25C 的  $\text{CH}_2$  基团的整体转动和 50H 的摇摆振动。

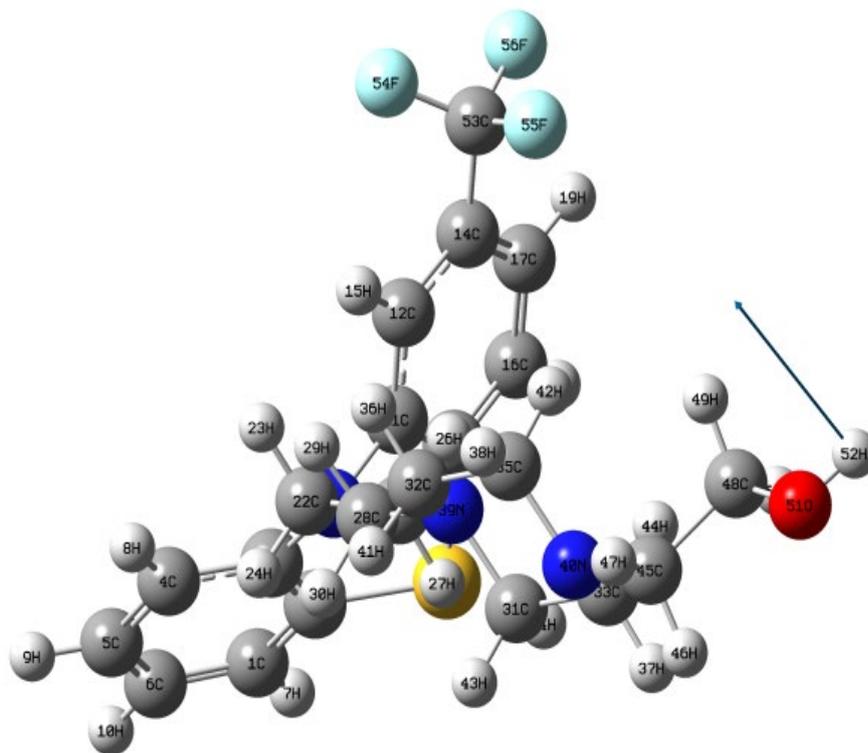


Figure 3. 296  $\text{cm}^{-1}$  vibration mode  
图 3. 296  $\text{cm}^{-1}$  振动模式

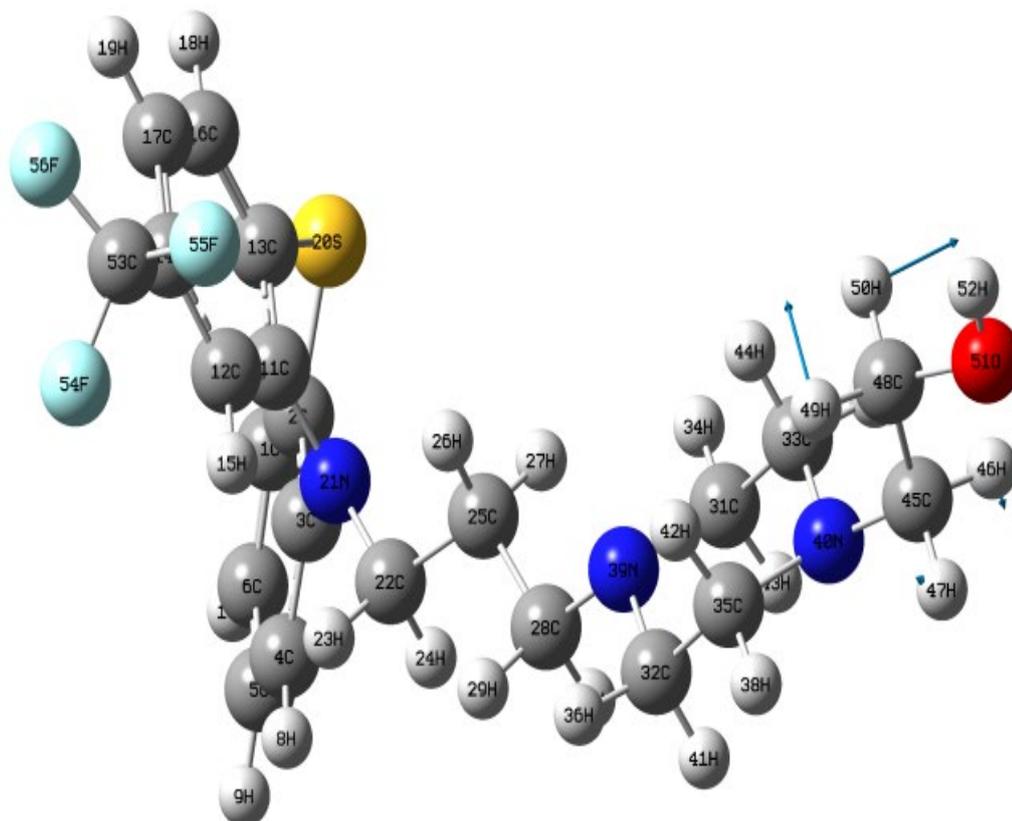


Figure 4.  $89\text{ cm}^{-1}$  vibration mode  
图 4.  $89\text{ cm}^{-1}$  振动模式

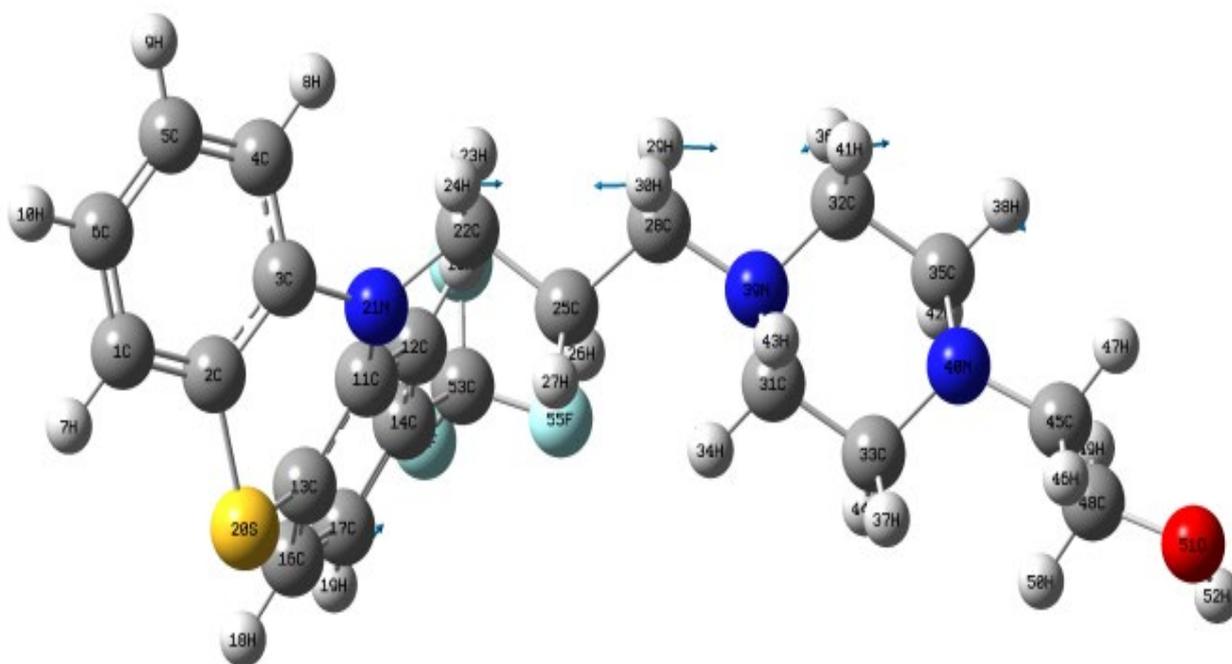


Figure 5.  $1346\text{ cm}^{-1}$  vibration mode  
图 5.  $1346\text{ cm}^{-1}$  振动模式

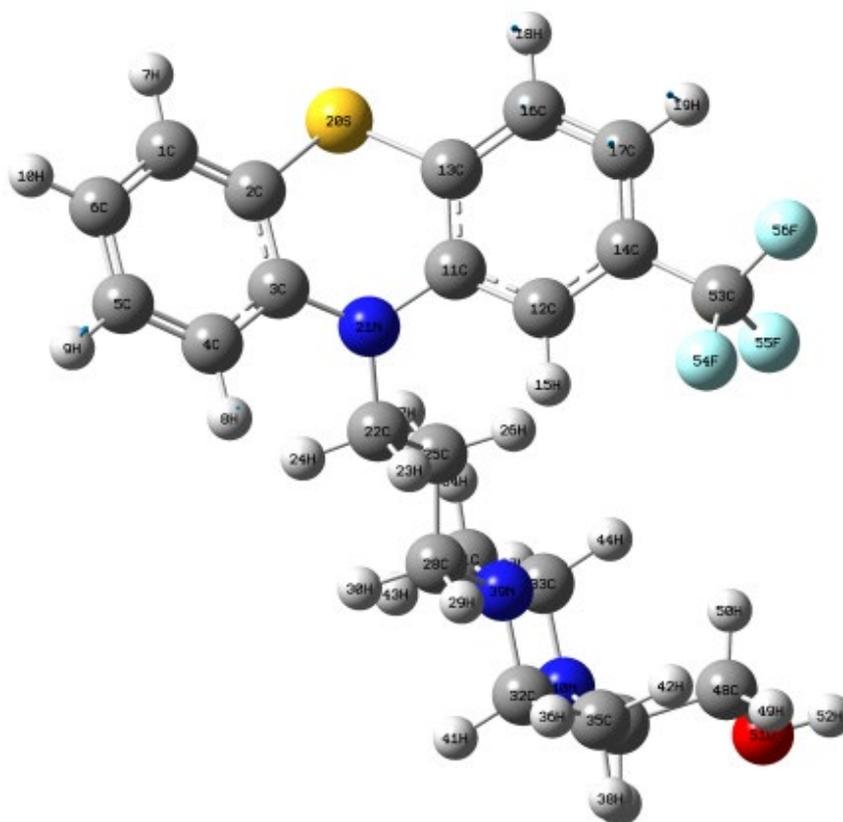


Figure 6.  $1486\text{cm}^{-1}$  vibration mode  
图 6.  $1486\text{cm}^{-1}$  振动模式

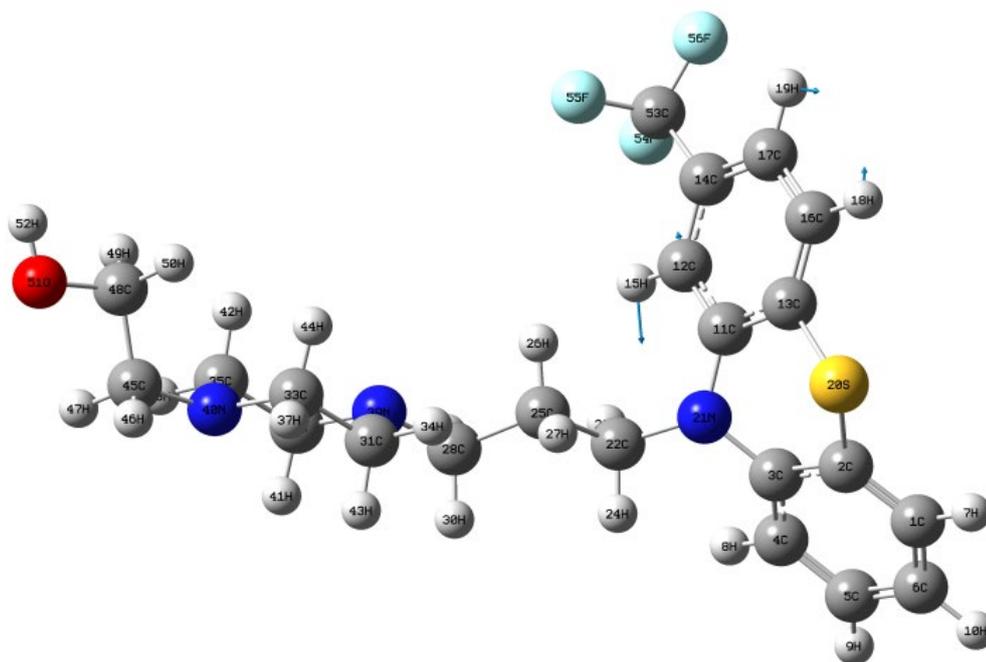


Figure 7.  $1497\text{cm}^{-1}$  vibration mode  
图 7.  $1497\text{cm}^{-1}$  振动模式

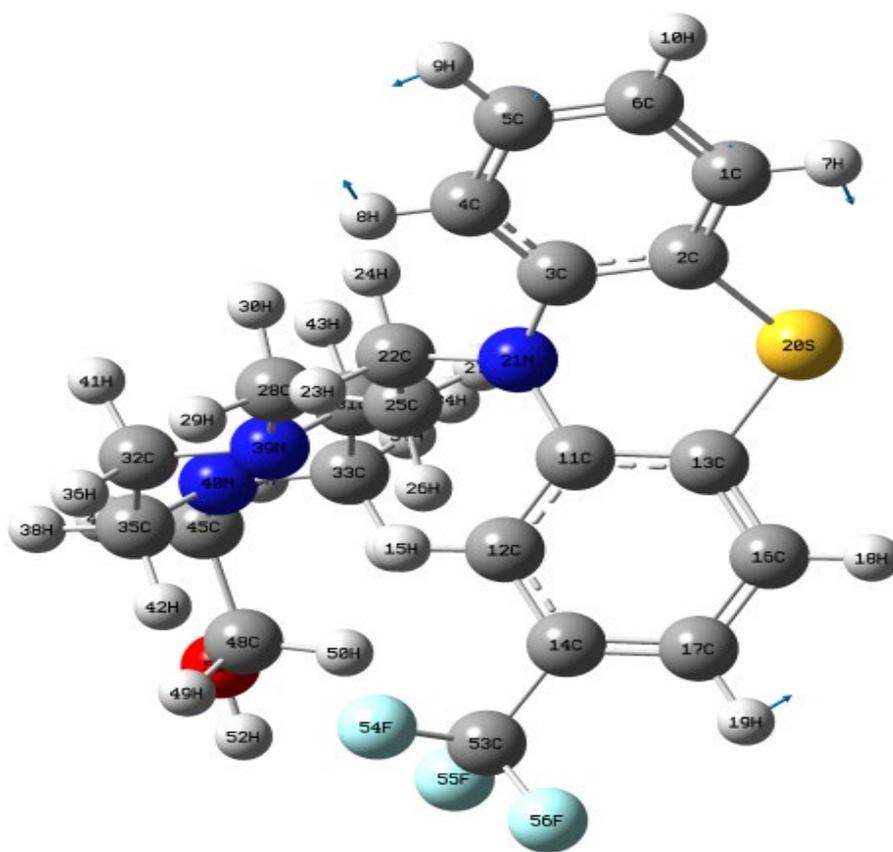


Figure 8. 1593  $\text{cm}^{-1}$  vibration mode  
图 8. 1593  $\text{cm}^{-1}$  振动模式

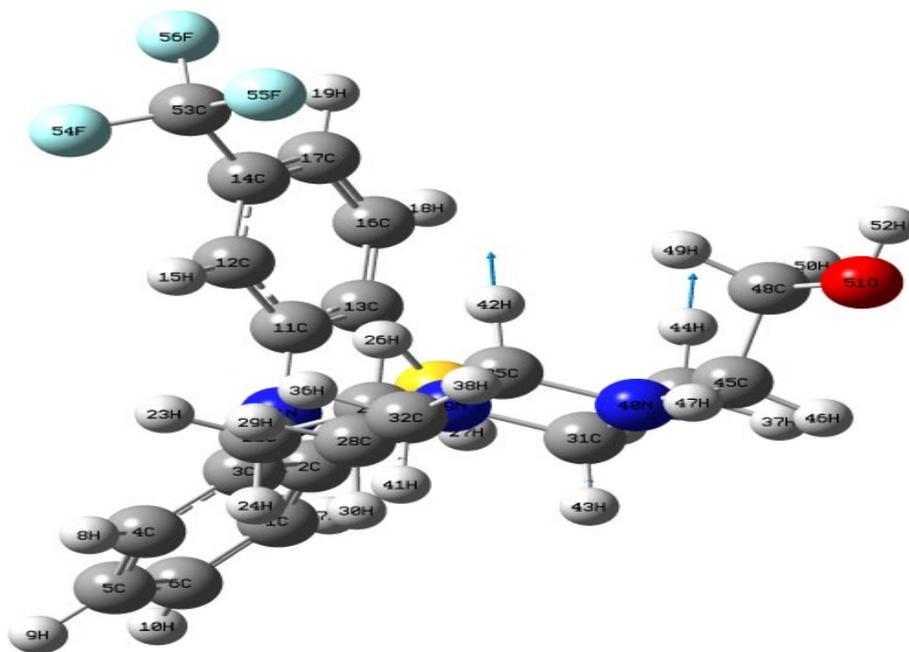


Figure 9. 3144  $\text{cm}^{-1}$  vibration mode  
图 9. 3144  $\text{cm}^{-1}$  振动模式

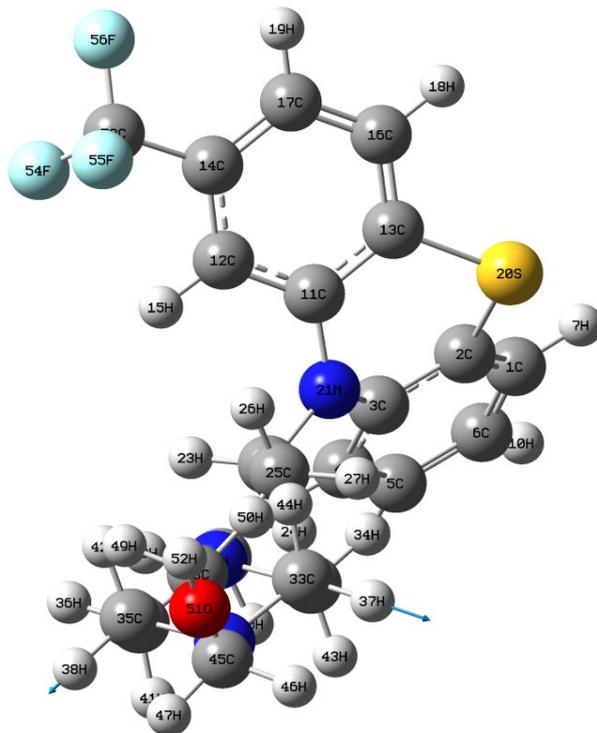


Figure 10. 3245  $\text{cm}^{-1}$  vibration mode  
图 10. 3245  $\text{cm}^{-1}$  振动模式

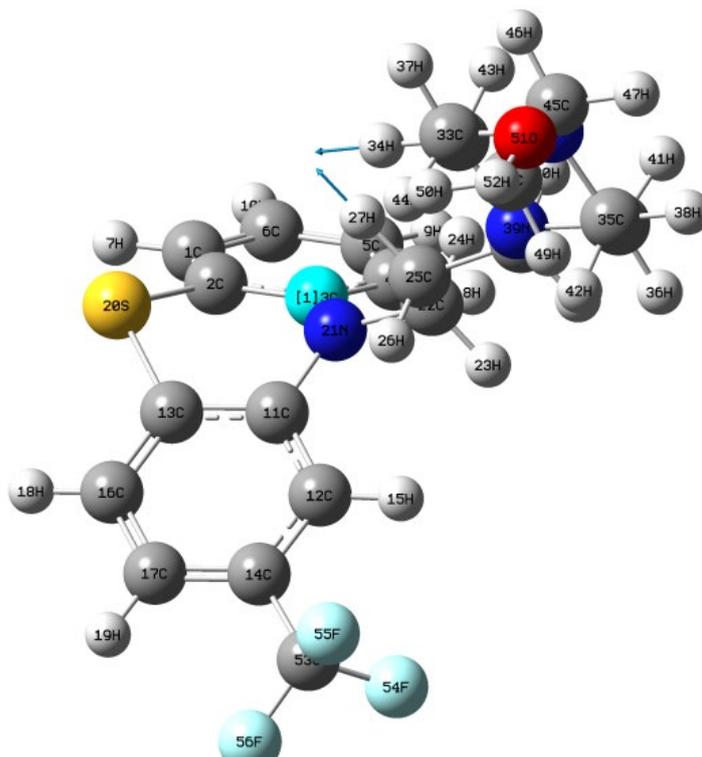
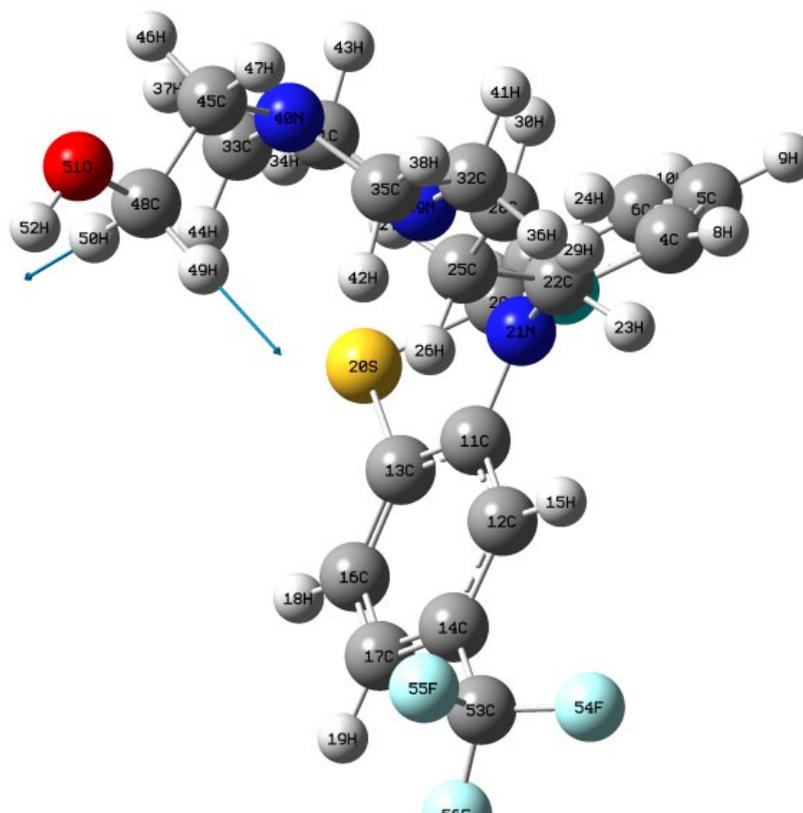


Figure 11. 3285  $\text{cm}^{-1}$  vibration mode  
图 11. 3285  $\text{cm}^{-1}$  振动模式



**Figure 12.**  $3617\text{ cm}^{-1}$  vibration mode  
**图 12.**  $3617\text{ cm}^{-1}$  振动模式

在红外光谱的中频范围( $500\sim 3000\text{ cm}^{-1}$ )内, 分子的振动模式主要集中在弯曲振动和摇摆振动上, 这些振动可以进一步细分为面内弯曲、面外弯曲、面内摇摆和面外摇摆振动。该区域内存在大量的无红外活性振动模式。在这一频段中, 最为显著的振动特征出现在  $1346\text{ cm}^{-1}$  处, 如图 5 所示, 这一强峰是由多种振动模式复合而成的, 包括 19H 的摇摆振动、含 22C 的  $\text{CH}_2$  基团的面外弯曲振动(剪式)、含 28C 的  $\text{CH}_2$  基团的面外弯曲振动(剪式)以及含 32C 的  $\text{CH}_2$  基团的面外摇摆振动。此峰不仅是该区域的最强峰。如图 6 所示, 次强峰位于  $1486\text{ cm}^{-1}$ , 其主要振动模式为 9H、18H 和 19H 的摇摆振动复合而成。此外, 在  $1497\text{ cm}^{-1}$  处, 38H 和 42H 的面内弯曲振动形成了一个较强的共振峰, 如图 7 所示。而在  $1642\text{ cm}^{-1}$  处, 共振峰则是由含 22C 的  $\text{CH}_2$  基团的面外摇摆振动和含 31C 的  $\text{CH}_2$  基团的面外弯曲振动共同引起的。同时, 含 53C 的  $\text{CH}_3$  基团的弯曲振动(伞状)在  $1310\text{ cm}^{-1}$  处产生了一个较强的共振峰。其他值得注意的振动特征包括: 24H、55F 和 44H 的摇摆振动复合振动在  $1373\text{ cm}^{-1}$  处形成共振峰; 46H 的摇摆振动与 29H 和 30H 的面内弯曲振动复合在  $1495\text{ cm}^{-1}$  处产生共振峰; 8H、34H、44H 和 46H 的摇摆振动复合在  $1593\text{ cm}^{-1}$  处形成共振峰, 如图 8 所示; 54F 和 56F 的面内弯曲在  $1567\text{ cm}^{-1}$  处产生共振峰; 34H 和 43H 的剪式振动以及 23H 和 24H 的面外摇摆振动在  $1396\text{ cm}^{-1}$  处形成共振峰。此外, 我们还观察到了一些简并现象。在  $1377\text{ cm}^{-1}$  和  $1251\text{ cm}^{-1}$  处分别出现了三重简并, 对应的振动模式分别为 46H 的摇摆振动、37H 和 44H 的剪式振动以及 29H 和 30H 的面内弯曲振动。在  $1288\text{ cm}^{-1}$  处出现了双重简并, 振动模式为  $\text{CF}_3$  基团的弯曲振动(伞状)与 7H 的摇摆振动复合, 以及 30H 的摇摆振动。同时, 我们也发现了一些无红外活性的振动模式, 如  $864\text{ cm}^{-1}$ 、 $980\text{ cm}^{-1}$ 、 $1111\text{ cm}^{-1}$ 、 $1088\text{ cm}^{-1}$  和  $1157\text{ cm}^{-1}$  等位置的共振峰, 这些无活性振动模式分别对应于不同的分子振动组合, 如 55F 和 44H 的摇摆振动、52H 和 7H 的摇摆振动、26H 和 27H 的面

外摇摆振动与 55F 和 56H 的面内弯曲振动复合、8H 的摇摆振动以及 49H 的摇摆振动等。

在红外光谱的高频区域( $3000\sim 4000\text{ cm}^{-1}$ )内, 谱线强度相对较高, 该区域内的分子振动模式以伸缩振动为主导, 其包含了两种形式, 即对称和反对称。尽管此区域的共振峰整体强度相较于其他区域稍弱, 然而仍存在一些明显的振动特性。最为突出的振动峰位于  $3144\text{ cm}^{-1}$ , 如图 9 所示, 这一特征是由 42H 和 44H 的伸缩振动共同引发的。紧随其后的是位于  $3245\text{ cm}^{-1}$  的次强峰, 其振动模式主要为 37H 和 38H 的伸缩振动, 具体如图 10。此外, 在  $3270\text{ cm}^{-1}$  处, 我们观察到了一个由 46H 和 47H 的反对称伸缩振动引起的较强共振峰。而在  $3285\text{ cm}^{-1}$  位置, 27H 和 34H 的伸缩振动则形成了一个共振峰, 其振动模式如图 11 所示。值得注意的是, 49H 和 50H 的对称伸缩振动在  $3617\text{ cm}^{-1}$  处产生了一个较强的振动峰, 具体振动模式如图 12 所示。另外, 我们还发现 54F 和 56H 的反对称伸缩振动在  $3215\text{ cm}^{-1}$  处形成了一个共振峰。同时, 含 6C 环状结构中的 7H、9H 和 10H 的伸缩振动在  $4118\text{ cm}^{-1}$  处引发了一个较强的振动峰。此外, 36H 和 41H 的对称伸缩振动和反对称伸缩振动分别在  $3248\text{ cm}^{-1}$  和  $3302\text{ cm}^{-1}$  处形成了两个共振峰, 但  $3248\text{ cm}^{-1}$  处的共振峰更为显著。

#### 4. 结论

本文致力于探索氟奋乃静分子的结构特征及其红外振动光谱的规律性分布。通过细致的研究, 我们发现该分子展现出良好的结构对称性, 其红外振动光谱可以清晰地划分为低频、中频和低频三个区域。在低频区, 红外光谱强度较低, 振动形式包括分子基团的整体旋转、摆动, 以及环状结构的呼吸振动。在中频区, 红外振动光谱强, 振动模式则转变为弯曲振动和摇摆振动, 且该区域包含了光谱中的最强峰和次强峰。至于高频区, 则以 C-H 和 C-F 键的伸缩振动为主导。此外, 光谱中各谱峰一般均为多种振动模式复合引起地。同时, 我们还注意到了红外光谱中存在的简并振动和无红外活性现象。这些发现为深入理解氟奋乃静分子的结构特性及其红外振动光谱提供了宝贵的见解。

#### 参考文献

- [1] 李春福, 李燕, 李懂, 等. 影响氟奋乃静用药因素的探讨[J]. 湖北理工学院学报, 2014(2): 11-16.
- [2] 韦勇. 氟奋乃静缓释颗粒研究[J]. 当代经理人, 2006(6): 149-150.
- [3] Becke, A.D. (1988) Density-Functional Exchange-Energy Approximation with Correct Asymptotic Behavior. *Physical Review A*, **38**, 3098-3100. <https://doi.org/10.1103/physreva.38.3098>
- [4] Miehlich, B., Savin, A., Stoll, H. and Preuss, H. (1989) Results Obtained with the Correlation Energy Density Functionals of Becke and Lee, Yang and Parr. *Chemical Physics Letters*, **157**, 200-206. [https://doi.org/10.1016/0009-2614\(89\)87234-3](https://doi.org/10.1016/0009-2614(89)87234-3)
- [5] 梁瑞玲, 李刚, 张耀光. 三聚氰胺和三聚氰酸的密度泛函理论研究[J]. 科技传播, 2010(18): 88-91.
- [6] 张李东, 谢代前. 碳酸脱氢酶催化中质子转移机理的密度泛函理论[J]. 科学通报, 2005(18): 72-75.
- [7] Wong, M.W., Wiberg, K.B. and Frisch, M. (1991) Hartree-Fock Second Derivatives and Electric Field Properties in a Solvent Reaction Field: Theory and Application. *The Journal of Chemical Physics*, **95**, 8991-8998. <https://doi.org/10.1063/1.461230>
- [8] 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: 223-227.