甲氧氯普胺的量化计算理论研究

刘存海,刘芬芬,金靓婕,郭 冰

海军航空大学航空基础学院,山东 烟台

收稿日期: 2024年11月27日; 录用日期: 2024年12月14日; 发布日期: 2025年2月8日

摘要

本文借助密度泛函理论中的B3LYP算法,基于6-31G(d)理论基组,深入探讨了甲氧氯普胺分子的结构特性,成功获取了其稳定的分子构象及红外光谱属性。研究揭示,甲氧氯普胺的红外振动光谱因振动模式的 差异,主要分布于三个频率范围:低频段(0~500) cm⁻¹、中频段(500~2000) cm⁻¹和高频段(2000~4000) cm⁻¹。此外,由于简并振动及非红外活性振动的存在,实际红外光谱中可辨识的谱线少于理论预测的简 正振动数目。

关键词

甲氧氯普胺分子, DFT (密度泛函理论), 简并, 红外光谱分

Theoretical Study on Quantitative Calculation of Metoclopramide

Cunhai Liu, Fenfen Liu, Liangjie Jin, Bing Guo

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

Received: Nov. 27th, 2024; accepted: Dec. 14th, 2024; published: Feb. 8th, 2025

Abstract

In this paper, the B3LYP algorithm within Density Functional Theory (DFT), based on the 6-31G(d) theoretical basis set, is employed to delve into the structural characteristics of the metoclopramide molecule. Stable molecular conformations and infrared spectral properties of metoclopramide are successfully obtained. The study reveals that the infrared vibrational spectrum of metoclopramide is mainly distributed across three frequency ranges due to different vibrational modes: the low-frequency range (0~500) cm⁻¹, the mid-frequency range (500~2000) cm⁻¹, and the high-frequency range (2000~4000) cm⁻¹. Additionally, due to the presence of degenerate vibrations and non-infrared-active vibrations, the number of identifiable spectral lines in the actual infrared spectrum is less than the number of normal vibrations theoretically predicted.

Keywords

Metoclopramide Molecule, DFT (Density Functional Theory), Degenerate, Infrared Spectral Analysis

Copyright © 2025 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/

1. 引言

甲氧氯普胺,化学式为 C₁₄H₂₂ClN₃O₂, 白色结晶粉末形态,无异味而带有苦味。其溶解特性表现为 在三氯甲烷中高度可溶,于乙醇或丙酮中略溶,于乙醚中溶解度极低,而在水中几乎不溶解。其熔点范 围处于 147℃至 151℃之间。在临床医学应用中,甲氧氯普胺能够有效阻断胃肠道的多巴胺 D2 受体,从 而减轻多巴胺能中间神经元对胃肠道初级运动神经元的抑制效应。此外,它还能激活 5-羟色胺 4 受体, 进而激发胆碱能中间神经元的活动,并最终促进初级运动神经元释放乙酰胆碱。对于胃肠道,甲氧氯普 胺主要作用于上消化道,增强其动力功能。这包括提升胃肠道在静止状态下的括约肌张力,增加食管下 端括约肌的张力和收缩幅度,从而升高食管下端压力,有效防止胃内容物逆流至食管。同时,它还能促 进幽门和十二指肠的扩张,加强十二指肠以及空肠和回肠的蠕动,加速食物的通过过程。

近年来,甲氧氯普胺的研究日益受到学术界的瞩目。在 2021 年的一项研究中,许梦君及其团队深入 探讨了甲氧氯普胺在预防术后恶心呕吐(PONV)方面的机制、优势,并分析了其他麻醉药物在降低 PONV 风险方面的临床策略,为 PONV 的防治提供了新的见解[1]。同年稍早,孟黎鹰等人则聚焦于甲氧氯普胺 与佐米曲普坦在治疗偏头痛患者中的联合应用,发现该组合能够显著改善患者的血液流变学指标,有效 缓解头痛症状,减少疼痛发作频率,进而提升患者的生活质量,对患者的身心健康具有积极影响[2]。2020 年,张亚丽针对甲状腺切除术后患者常出现的头晕和呕吐问题,研究了甲氧氯普胺与托烷司琼的联合应 用效果,结果显示该方法能显著减轻患者术后头晕和呕吐的程度,且未显著增加不良反应的发生,显示 出较高的安全性[3]。同年,尹青春等人开发了一种基于超高效液相色谱法检测肉类食品中甲氧氯普胺含 量的新方法,并验证了该方法在检测肉类食品中甲氧氯普胺残留量方面具有高度的准确性和可靠性[4]。

红外光谱分析技术,作为一种高效且普及的分析手段,在分子结构的基础探索以及物质化学组成的 定性与定量评估中扮演着重要角色。密度泛函理论(DFT)[5][6],一个通过电子密度来探究复杂电子体系 的理论框架,已在众多科研领域展现出其广泛的应用价值,为揭示物质的各种特性提供了有力工具。本 研究借助 Gaussian 09 这一先进的计算软件,在 B3LYP 方法和 6-31G(d)基组的理论框架下,对甲氧氯普 胺分子的结构特性及其红外光谱的分布模式进行了详尽的探讨,并进一步分析了谱峰产生的内在机制。 本研究旨在深化对甲氧氯普胺药理特性的理解,为其后续的理论与实验研究提供坚实的理论基础。

2. 计算方法

首先,我们采用 GaussView 图形化工具初步搭建了甲氧氯普胺分子的基础结构模型。接着,利用 Gaussian 09 这一强大的计算平台,分别在 HF/3-21G 与 B3LYP/6-31G(d)这两种理论模型下,对初步搭建 的分子结构进行了深入的优化处理,从而获得了该分子的稳定空间构型。然后,在 B3LYP/6-31G(d)上对 获得的稳定构型进行了频率计算。最后,通过对频率计算数据进行分析,成功获取了甲氧氯普胺的红外 光谱图。对于光谱图中出现的每一条谱线,我们都进行了细致的归属与深入的机理探讨。值得一提的是,

为了确保计算结果的准确性,我们还参考了文献[7],对所得的振动频率应用了 0.9613 的校正系数进行了 适当的调整。

3. 结果与讨论

3.1. 甲氧氯普胺的结构特点



Figure 1. Infrared spectrum of metoclopramide 图 1. 甲氧氯普胺分子红外光谱

图1为甲氧氯普胺分子的稳定构型,其由苯环的环状结构以及一系列链状结构所构成。表1详细列 出了该分子的各项关键结构参数。经过精确的计算分析,我们发现甲氧氯普胺分子在结构上呈现出一定 程度的对称性。在化学键的组成方面,该分子包含了 C-C、H-N、H-C、O-C、C-N 以及 Cl-C 这六种主要 类型的化学键。对于 C-C 键, 我们注意到由苯环上的 C 原子所构成的 C-C 键相较于链状结构中的 C-C 键 要稍短一些。具体来说, 苯环上的 3 C-1 C 与 5 C-4 C 键的键长均为 1.385 Å, 而 3 C-2 C 与 6 C-5 C 键的 键长则均为 1.402 Å, 4 C-3 C 键的键长为 1.408 Å。在链状结构中, 共形成了四个 C-C 键, 其中 21 C-18 C 键的键长最长,达到了 1.504 Å,而 31 C-25 C 与 35 C-28 C 键的键长则相等,均为 1.529 Å, 14 C-3 C 键的键长也为 1.504 Å。在 H-N 键方面,我们观察到 N 原子共参与了三个 H-N 键的形成。其中, 10 N 参 与形成的两个 H-N 键的键长相等, 均为 1.011 Å, 而 16 N 参与形成的 H-N 键的键长则稍长一些, 为 1.015 Å。此外,我们还发现大量 H-N 键的键长相等,例如 19 H-18 C、42 H-39 C、37 H-35 C、34 H-31 C 和 32 H-31 C 键的键长均为 1.095 Å, 33 H-31 C 和 27 H-25 C 键的键长均为 1.096 Å, 23 H-21 C 和 38 H-35 C 键 的键长均为 1.097 Å, 以及 40 H-39 C、30 H-28 C 和 29 H-28 C 键的键长均为 1.098 Å。在所有 H-C 键中, 26 H-25 C 键的键长最长,为 1.109 Å,而 7 H-2 C 键的键长最短,仅为 1.084 Å。对于 O 原子所参与形成 的化学键,我们发现150与14C之间形成的双键相较于90与4C之间的键长要稍短一些,分别为1.229 Å和 1.379 Å。在 N-C 键方面, 24 N 共参与了三个 N-C 键的形成。其中, 28 C-24 N 键的键长最长, 为 1.476 Å, 而 25 C-24 N 与 24 N-21 C 键的键长则相等, 均为 1.460 Å。此外, 18 C-16 N 键的键长为 1.462 Å,相较于16N-14C之间形成的键长要稍长一些。而10N-6C键的键长则为1.381Å。最后,分子中唯 一的 Cl-C 键的键长为 1.765 Å。

在探讨甲氧氯普胺分子的结构特性时,我们注意到其苯环部分受到周围基团的影响,展现出了一定 程度的不规则性。具体来说,在由骨架 C 原子所形成的键角中,我们观察到 /3 C-2 C-1 C 与 /6 C-5 C-4 C 的键角均为122°, 而∠4C-3C-2C 与∠5C-4C-3C 的键角则分别为117°和121°。值得注意的是, 当苯 环的 C 原子与链状结构的 C 原子相连时,所形成的 \angle 14 C-3 C-2 C 键角为 116°,这进一步体现了苯环结 构的不规则性。在分子中,两个 O 原子所参与的键角也呈现出特定的规律。其中, ∠9 O-4 C-3 C 的键角 为 122°, 而 ∠39 C-9 O-4 C 的键角则为 115°。此外, 与 9O 原子相连的 H 原子所形成的键角, 如 ∠40 H-39 C-9 O、∠41 H-39 C-9 O 和∠42 H-39 C-9 O,均为 112°。另一 O 原子 15O 与相邻 C 原子所形成的∠ 15 O-14 C-3 C 键角为 120°。在 N 原子所形成的键角方面,我们观察到多个键角均为 113°,包括∠31 C-25 C-24 N、∠35 C-28 C-24 N、∠28 C-24 N-21 C、∠25 C-24 N-21 C 和∠21 C-18 C-16 N。而与 N 原子相 连的 H 原子所形成的键角,如∠20 H-18 C-16 N、∠17 H-16 N-14 C、∠27 H-25 C-24 N、∠29 H-28 C-24 N和∠30H-28C-24N,则均为110°。此外,∠24N-21C-18C和∠26H-25C-24N的键角均为112°,而 与 10 N 原子相连的 H 原子所形成的键角,如 211 H-10 N-6 C 和 212 H-10 N-6 C,则均为 110°。在 H 原 子参与形成的∠H-C-C 键角中,我们观察到多个键角均为111°,包括∠33 H-31 C-25 C、∠34 H-31 C-25 C、∠36 H-35 C-28 C、∠37 H-35 C-28 C 和∠38 H-35 C-28 C。而∠7 H-2 C-1 C 和∠8 H-5 C-4 C 的键角 均为118°, ∠23 H-21 C-18 C 和∠22 H-21 C-18 C 的键角则为108°。在 Cl 原子参与形成的键角中,我们 注意到∠13 Cl-1 C-2 C 的键角为 119°。

在二面角的分析中,我们发现∠4 C-3 C-2 C-1 C、∠5 C-4 C-3 C-2 C 和∠6 C-5 C-4 C-3 C 的二面角均为 0°,这表明这些 C 原子几乎位于同一平面上。此外,∠7 H-2 C-1 C-6 C、∠8 H-5 C-4 C-3 C、∠9 O-4 C-3 C-2 C、∠10 N-6 C-5 C-4 C、∠13 Cl-1 C-2 C-3 C 和∠14 C-3 C-2 C-1 C 的二面角均为 180°,这进一步 证实了 7 H、8 H、9O、10 N、13 Cl、14 C 以及苯环骨架的 C 原子确实位于同一平面上。然而,我们也 注意到 11 H-10 N-6 C-5C 和 12 H-10 N-6 C-5 C 的二面角分别为-163°和-24°,这表明与苯环相连的 CH2 中的两个 C 原子并未与苯环处于同一平面内。

键长(Å)		键角(°)		二面角(°)		
	2 C-1 C	1.385	∠2 C-2 C-1 C	122	∠4 C-3 C-2 C-1 C	0
	3 C-2 C	1.402	∠4 C-3 C-2 C	117	∠5 C-4 C-3 C-2 C	0
	4 C-3 C	1.408	∠5 C-4 C-3 C	121	∠6 C-5 C-4 C-3 C	0
	5 C-4 C	1.385	∠6 C-5 C-4 C	122	∠7 H-2 C-1 C-6 C	180
	6 C-5 C	1.402	∠7 H-2 C-1 C	118	∠8 H-5 C-4 C-3 C	180
	7 H-2 C	1.084	∠8 H-5 C-4 C	118	∠9 O-4 C-3 C-2 C	180
	8 H-5 C	1.086	∠9 O-4 C-3 C	122	∠10 N-6 C-5 C-4 C	180
	9 O-4 C	1.379	∠10 N-6 C-5 C	121	∠11 H-10 N-6 C-5 C	-163
	10 N-6 C	1.381	∠11 H-10 N-6 C	116	∠12 H-10 N-6 C-5 C	-24
	11 H-10 N	1.011	∠12 H-10 N-6 C	116	∠13 Cl-1 C-2 C-3 C	180
	12 H-10 N	1.011	∠13 Cl-1 C-2 C	119	∠14 C-3 C-2 C-1 C	180
	13 Cl-1 C	1.765	∠14 C-3 C-2 C	116	∠15 O-14 C-3 C-2 C	41
	14 C-3 C	1.504	∠15 O-14 C-3 C	120	∠16 N-14 C-3 C-2 C	-139
	15 O-14 C	1.229	∠16 N-14 C-3 C	119	∠17 H-16 N-14 C-3 C	176
	16 N-14 C	1.377	∠17 H-16 N-14 C	110	∠18 C-16 N-14 C-3 C	28
	17 H-16 N	1.015	∠18 C-16 N-14 C	127	∠19 H-18 C-16 N-14 C	-164

 Table 1. Structure parameters of metoclopramide

 表 1. 甲氧氯普胺分子的结构参数

刘存海	等
-----	---

续表					
18 C-16 N	1.462	∠19 H-18 C-16 N	108	∠20 H-18 C-16 N-14 C	-48
19 H-18 C	1.095	∠20 H-18 C-16 N	110	∠21 C-18 C-16 N-14 C	76
20 H-18 C	1.089	∠21 C-18 C-16 N	113	∠22 H-21 C-18 C-16 N	-57
21 C-18 C	1.539	∠22 H-21 C-18 C	108	∠23 H-21 C-18 C-16 N	58
22 H-21 C	1.108	∠23 H-21 C-18 C	108	∠24 N-21 C-18 C-16 N	177
23 H-21 C	1.097	∠24 N-21 C-18 C	112	∠25 C-24 N-21 C-18 C	-157
24 N-21 C	1.460	∠25C-24N-21 C	113	∠26 H-25 C-24 N-21 C	-74
25 C-24 N	1.460	∠26 H-25 C-24 N	112	∠27 H-25 C-24 N-21 C	43
26 H-25 C	1.109	∠27 H-25 C-24 N	110	∠28 C-24 N-21 C-18 C	72
27 H-25 C	1.096	∠28 C-24 N-21 C	113	∠29 H-28 C-24 N-21 C	119
28 C-24 N	1.476	∠29 H-28 C-24 N	110	∠30 H-28 C-24 N-21 C	4
29 H-28 C	1.098	∠30 H-28 C-24 N	110	∠31 C-25 C-24 N-21 C	163
30 H-28 C	1.098	∠31 C-25 C-24 N	113	∠32 H-31 C-25 C-24 N	64
31 C-25 C	1.529	∠32 H-31 C-25 C	112	∠33 H-31 C-25 C-24 N	-177
32 H-31 C	1.095	∠33 H-31 C-25 C	111	∠34 H-31 C-25 C-24 N	-57
33 H-31 C	1.096	∠34 H-31 C-25 C	111	∠35 C-28 C-24 N-21 C	-118
34 H-31 C	1.095	∠35 C-28 C-24 N	113	∠36 H-35 C-28 C-24 N	-59
35 C-28 C	1.529	∠36 H-35 C-28 C	111	∠37 H-35 C-28 C-24 N	60
36 H-35 C	1.095	∠37 H-35 C-28 C	111	∠38 H-35 C-28 C-24 N	-180
37 H-35 C	1.095	∠38 H-35 C-28 C	111	∠39 C-9 O-4 C-3 C	74
38 H-35 C	1.097	∠39 C-9 O-4 C	115	∠40 H-39 C-9 O-4 C	61
39 C-9 O	1.431	∠40 H-39 C-9 O	112	∠41 H-39 C-9 O-4 C	180
40 H-39 C	1.098	∠41 H-39 C-9 O	112	∠42 H-39 C-9 O-4 C	-61
41 H-39 C	1.092	∠42 H-39 C-9 O	112		
42 H-39 C	1.095				

3.2. 甲氧氯普胺的红外振动光谱





红外振动光谱源自分子内部振动能级间的跃迁现象,其谱线强度深受分子振动过程中偶极矩变动幅 度及跃迁概率的影响,这一观点在文献[8]中得到了详尽阐述。偶极矩在振动中的变化直接决定了红外吸 收效应的显著程度:若振动不伴随偶极矩的改变,则红外光谱强度将归零,此类振动被定义为"红外非 活性",反之则展现出"红外活性"。

在标准测试条件下,甲氧氯普胺分子的红外光谱特性如图 2 清晰展示。深入分析该光谱,我们发现 其中既存在红外活性振动,也伴随着简并效应,这导致了实际观测到的谱线数量少于理论预期。依据振 动模式的差异,红外光谱可被细分为三个频段: (0~500) cm⁻¹、(500~2000) cm⁻¹及(2000~4000) cm⁻¹。

在(0~500) cm⁻¹低频段内,主导振动形式为苯环 C 原子的呼吸式振动,以及各类基团的整体旋转或摇摆。此频段光谱强度普遍较低,且简并现象及无红外活性振动频繁出现。具体而言,479 cm⁻¹处的最强峰源于 7 H、8 H、11 H、12 H 及 17 H 复合摇摆振动的贡献;366 cm⁻¹次强峰则主要归属于与苯环相连的 CH2 基团的整体旋转(图 3、图 4)。此外,405 cm⁻¹处的共振峰由 8 H 与 11 C 复合摇摆振动引发;468 cm⁻¹ 处存在一强度较低的共振峰,与含 31 C 甲基基团的整体旋转相关;344 cm⁻¹处的共振峰则是由 13 Cl 的 摇摆与含 39 C 的 CH3 基团整体摇摆共同作用所致;而 457 cm⁻¹处的振动模式则融合了苯环呼吸振动与 含 35 C、39 C 甲基基团整体摇摆的复合效应。值得注意的是,201 cm⁻¹位置发生了三重简并,涉及 13 Cl 摇摆、苯环骨架呼吸振动及含 31 C 甲基基团整体旋转;287 cm⁻¹位置则呈现双重简并,主要与 7 H 和 34 H 的摇摆,以及 15 O 和 23 H 的摇摆振动相关。另外,在 13 cm⁻¹、74 cm⁻¹、76 cm⁻¹及 270 cm⁻¹等位置,我们观察到了显著的无红外活性现象,对应的振动模式分别包括 13 Cl 与 32 H 的摇摆、11 H 与 12 H 的 整体旋转、90 与 26 H 的摇摆,以及含 31 C、35 H、39 H 甲基基团的整体旋转。

在(500~2000) cm⁻¹ 的频率范围内,分子的振动形态多样,主要包括摇摆振动(涵盖面外与面内两种形式)和弯曲振动(涉及面内弯曲、面外弯曲及变形振动等多种类型)。此区间内的光谱强度较强,其中最为突出的吸收峰位于 510 cm⁻¹,它主要源于 11 H 和 12 H 的面外摇摆振动,这一特征在图 5 中得到了直观展示。紧随其后的是位于 1750 cm⁻¹ 的次强峰,该峰是 19 H 和 20 H、22 H 和 23 H,以及 32 H 和 33 H 面外弯曲振动的复合结果,如图 6 所示。在 1456 cm⁻¹ 处,我们观察到了一个较强的谱峰,它归因于含 39 C 的 CH3 基团中三个 H 原子的对称变形振动与 17 H 和 27 H 摇摆振动的复合效应。而在 652 cm⁻¹ 位置,虽然强度较弱,但也出现了一个谱峰,它是由含 39 C 的 CH3 基团中三个 H 原子的不对称变形振动和 13 Cl 的摇摆振动共同造成的。1238 cm⁻¹ 处的谱峰则是由 7 H 和 8 H 的摇摆振动所引发,同时,7 H 和 8 H 的摇摆振动与 11 H 和 12 H 弯曲振动中的剪式振动在相同位置形成了较强的共振峰。在图 7 中,我们可以看到 1689 cm⁻¹位置的谱峰对应于 11 H 和 12 H 的面内弯曲振动。而 22 H 和 23 H、19 H 和 20 H 面外摇摆振动中的扭曲效应在 1353 cm⁻¹ 处形成了共振峰,同样,22 H 和 23 H、26 H 和 27 H 面外摇摆振动中的扭曲效应在 1353 cm⁻¹ 处形成了共振峰,但强度相对较低。值得注意的是,1689 cm⁻¹位置的共振峰还涉及 11 H 和 12 H 的面内摇摆振动形成的谱峰,如图 8 所示。而在 1276 cm⁻¹位置,

一个强振动峰由 29 H 和 30 H 面外弯曲振动中的扭曲振动、18 H 和 20 H 面外摇摆振动及 17 H 和 26 H 摇 摆振动的复合效应造成。此外,我们还发现了两处简并现象。在 1371 cm⁻¹处存在双重简并,涉及 29 H 和 30 H 面外摇摆振动中的扭矩振动及 26 H 的摇摆振动。而在同一位置还观察到了三重简并,相应的振动模 式包括含 35 C 的 CH3 弯曲振动中的伞状振动、19 H 和 32 H 的摇摆振动,以及 11 H 和 12 H 面外摇摆振动 与 41 H 摇摆振动的复合振动。最后,我们注意到在 790 cm⁻¹ 和 540 cm⁻¹位置出现了无红外活性现象。790 cm⁻¹处的共振谱峰与 22 H 和 23 H、26 H 和 27 H、29 H 和 30 H 面内摇摆振动的复合模式相关,而 540 cm⁻¹ 处的共振谱峰则与 29 H 和 30 H 面内摇摆振动及 19 H 和 20 H 面外摆振动的复合模式有关。



Figure 3. 479 cm⁻¹ vibration mode **習 3.** 479 cm⁻¹ 振动模式



Figure 4. 366 cm⁻¹ vibration mode 图 4. 366 cm⁻¹ 振动模式



Figure 5. 510 cm⁻¹ vibration mode **图 5.** 510 cm⁻¹ 振动模式



Figure 6. 1750 cm⁻¹ vibration mode **图 6.** 1750 cm⁻¹ 振动模式



Figure 7. 1689 cm⁻¹ vibration mode 图 7. 1689 cm⁻¹ 振动模式



Figure 8. 1391 cm⁻¹ vibration mode **图 8.** 1391 cm⁻¹ 振动模式





Figure 10. 3573 cm⁻¹ vibration mode 图 10.3573 cm⁻¹ 振动模式

在(2000~4000) cm⁻¹的频率区间内,主导的振动类型是伸缩振动。对该区域的红外振动光谱进行深入 分析后,我们发现整体光谱强度相对较低,并且在(2000~2900) cm⁻¹的子区间内几乎未观察到红外振动光 谱的存在。最为显著的吸收峰位于 2936 cm⁻¹, 如图 9 所示, 该峰对应于 22 H 的伸缩振动模式。次强峰 则出现在 3039 cm⁻¹, 这是由含 39 C 的 CH3 基团中三个 H 原子的对称伸缩振动所引发的。此外,在 3052 cm⁻¹位置,含 39 C的 CH3 基团中三个 H 原子的对称伸缩振动与 29 H 和 30 H 的反对称伸缩振动的复合 效应形成了一个共振峰,尽管其强度稍弱。2920 cm⁻¹处的谱峰是 22 H 和 26 H 伸缩振动复合作用的结果。 而 3115 cm⁻¹ 的共振峰则源于含 39 C 的 CH3 基团中三个 H 原子的反对称伸缩振动。在图 10 中,我们可 以看到 11 H 和 12 H 的对称伸缩振动在 3573 cm⁻¹处产生了一个较强的共振峰,同时,32 H 和 33 H 的反 对称伸缩振动在 3118 cm⁻¹ 处也形成了一个共振峰。3075 cm⁻¹ 的共振峰则与 23 H 和 27 H 伸缩振动的复 合模式相关,而 19 H 和 20 H 的对称伸缩振动同样在 3075 cm⁻¹ 处有所贡献,形成了一个共振叠加。另 外,3011 cm⁻¹的共振峰对应于29 H和30 H的对称伸缩振动模式,而35 H和37 H的反对称伸缩振动在

3131 cm⁻¹处引发了一个共振峰。值得注意的是,在 3157 cm⁻¹位置观察到了三重简并现象,涉及的分子 振动模式包括 41 H 和 42 H 的反对称伸缩振动(两次出现)以及 11 H 和 12 H 的反对称伸缩振动。在 3048 cm⁻¹位置则出现了双重简并,对应的振动模式为含 39 C 的 CH3 基团中三个 H 原子的对称伸缩振动和 17 H 的伸缩振动。此外,我们还发现了一些无红外活性的现象。在 3179 cm⁻¹、3062 cm⁻¹、3201 cm⁻¹、3052 cm⁻¹和 3233 cm⁻¹等不同位置,分别对应着 20 H 的伸缩振动、23 H 和 27 H 的伸缩振动、8 H 的伸缩振 动、29 H 和 30 H 的反对称伸缩振动以及 7 H 的伸缩振动等振动模式,但这些振动在红外光谱中并未产 生可观测的吸收峰。

4. 小结

本文借助量化计算手段,成功解析了甲氧氯普胺分子的结构特点,并对其红外振动光谱进行了详尽的探究,同时深入剖析了其结构特性。研究揭示,甲氧氯普胺的红外光谱特征可划分为三个关键区域, 且光谱中各谱峰对应的振动模式多为多种振动模式复合振动。首先,(0~500) cm⁻¹ 区间内的主要振动模式 为苯环碳原子的呼吸式振动以及分子各组成部分的整体旋转或摆动;其次,在(500~2000) cm⁻¹ 区间,振 动形式以面外弯曲及形变振动为主导;再者,(1600~3000) cm⁻¹ 区间内,分子的振动特征主要表现为摇摆 及弯曲振动;最后,于(2000~4000) cm⁻¹ 区间,振动模式则集中为各原子的伸缩振动。值得注意的是,在 光谱分析过程中,我们还观察到了简并振动现象以及部分振动模式在红外光谱中未显现活性,即无红外 活性现象。以上发现为深入理解甲氧氯普胺分子的结构及其红外振动光谱特性提供了有益参考。

参考文献

- [1] 许梦君, 阎文军. 甲氧氯普胺预防围术期恶心呕吐的应用进展[J]. 麻醉安全与质控, 2021, 5(6): 464-468.
- [2] 孟黎鹰, 蒋孝东. 甲氧氯普胺与佐米曲普坦对偏头痛的疗效[J]. 郑州卫生健康职业学院, 2020, 30(3): 25-27.
- [3] 张亚丽. 甲氧氯普胺结合托烷司琼对甲状腺术后呕吐的预防效果[J]. 山西卫生健康职业学院学报, 2020, 30(3): 39-41.
- [4] 尹青春, 邓浩, 谭高好, 等. 超高效液相色谱法测定肉类食品中甲氧氯普胺的含量[J]. 肉类研究, 2020, 34(1): 83-87.
- [5] 陈晓岚, 张守仁, 屈凌波, 等. 新型白杨素-7-氨基磷酸酯衍生物的合成与波谱学研究[J]. 波谱学杂志, 2009, 26(2): 239-246.
- [6] 张伏龙. 硅锗杂硫烯酮及其相关分子的量子化学计算研究[J]. 甘肃联合大学学报(自然科学版), 2008, 22(6): 54-59.
- [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.