

研究论文

分子旋光度的密度泛函计算及Soman绝对构型确定

丁晓琴<sup>\*1</sup>, 赵立峰<sup>2</sup>, 丁俊杰<sup>1</sup>, 陈冀胜<sup>1</sup>

(<sup>1</sup>北京药物化学研究所 北京 102205)

(<sup>2</sup>上海交通大学化学化工学院 上海 200240)

收稿日期 2005-10-9 修回日期 2005-12-29 网络版发布日期 2006-12-12 接受日期 2006-8-10

**摘要** 手性化合物绝对构型的确定一直是有机化学特别是手性药物合成研究过程中经常遇到的问题之一. 利用密度泛函DFT/B3LYP量子化学计算方法, 通过计算两种已知旋光度分子的旋光度, 确认计算条件和验证计算结果的可靠性, 并将此方法应用于Soman旋光度的计算.

结合文献报道的Soman分子实验旋光度测定结果, 首次采用理论计算方法确定了梭曼(Soman)分子四个异构体的绝对构型, 分别为P(R),C(S)-Soman→P(+ )C(+), P(R),C(R)-Soman→P(+ )C(-), P(S),C(S)-Soman→P(- )C(+), P(S),C(R)-Soman→P(- )C(-).

**关键词** [分子旋光度计算](#) [DFT](#) [梭曼](#) [绝对构型](#)

分类号

**Calculation of Optical Rotation Using Density Functional Theory and Determination of Absolute Configuration for Soman**

DING Xiao-Qin<sup>\*1</sup>, ZHAO Li-Feng<sup>2</sup>, DING Jun-Jie<sup>1</sup>, CHEN Ji-Sheng<sup>1</sup>

(<sup>1</sup> Beijing Institute of Pharmaceutical Chemistry, Beijing 102205)

(<sup>2</sup> School of Chemistry & Chemical Technology, Shanghai Jiaotong University, Shanghai 200240)

**Abstract** The determination of absolute configuration for chiral compounds is one of the most important problem in the organic chemistry, especially for chiral drug synthesis. Density functional theory (DFT/B3LYP) method with various basis sets were employed and verified by calculating the optical rotational properties of two tested chiral compounds, and then applied to the calculations of the optical rotational properties of soman to assign the absolute configuration of soman. The absolute configurations of four isomers for soman are P(R),C(S)-soman→P(+ )C(+), P(R),C(R)-soman→P(+ )C(-), P(S),C(S)-soman→P(- )C(+ ) and P(S),C(R)-soman→P(- )C(-).

**Key words** [calculation of optical rotation](#) [density functional theory](#) [soman](#) [absolute configuration](#)

DOI:

通讯作者 丁晓琴 [dingxq@cetin.net.cn](mailto:dingxq@cetin.net.cn), [dingxiaqin2008@126.com](mailto:dingxiaqin2008@126.com)

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(441KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“分子旋光度计算” 的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [丁晓琴](#)

·

· [赵立峰](#)

·

· [丁俊杰](#)

·

· [陈冀胜](#)