

研究论文

3种黄酮醇类化合物核磁共振碳谱的理论研究

刘珊; 张姝; 苏宇; 刘权; 廖显威

1. 四川师范大学 化学与材料科学学院, 四川 成都 610066; 2. 川北医学院 化学教研室, 四川 南充 637007

收稿日期 2006-8-1 修回日期 2006-12-1 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 在B3LYP/6-31G水平下优化了3种黄酮醇类(山奈酚, 槲皮素, 杨梅素)化合物的几何构型. 在振动分析中, 均未出现虚频率. 在B3LYP/6-31G的水平下计算了该类化合物的核磁共振碳谱. 研究表明: 3种分子均有分子内氢键形成, 且分子内氢键的键长为0.17~0.18 nm左右. 本文讨论了羟基引入之后对邻近C的化学位移的影响. 从取代基对NMR的影响来看, 随着取代基对苯环的供电子能力的加强, 取代基邻近的一些C的化学位移有所改变.

**关键词** [核磁共振](#); [化学位移](#); [黄酮醇类化合物](#)

分类号

**DOI:**

通讯作者:

廖显威 [xuyuanxin@yahoo.com](mailto:xuyuanxin@yahoo.com)

作者个人主页: [刘珊](#); [张姝](#); [苏宇](#); [刘权](#); [廖显威](#)

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF](#)(368KB)

▶ [\[HTML全文\]](#)(0KB)

▶ [参考文献\[PDF\]](#)

▶ [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](#)

▶ [引用本文](#)

▶ [Email Alert](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“核磁共振; 化学位移; 黄酮醇类化合物”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [刘珊](#); [张姝](#); [苏宇](#); [刘权](#); [廖显威](#)