化学学报 1997 55 (8): 729-733 ISSN: 0567-7351 CN: 31-1320/06

固体酪氨酸^1^3C核磁屏蔽张量的实验与理论研究

郑广,胡建治,张晓东,沈联芳,叶朝辉

中国科学院武汉物理研究所;中国科学院波谱与原子分子国家重点实验室

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 应用最近发展的三回波二维慢速魔角旋转(Triple-Echo 2D MAT)
实验方法测得了酪氨酸中各不等价碳的化学位移各向异性(CSA)
张量主值。由从头计算获得的结果与实验值符合较好, 说明对于具有复杂结构的多原子体系,
对杂原子使用较小的基函数, 而对所关心的碳原子使用较大的基函数以提高计算精度,
这样可以达到既节省计算机空间与计算时间而不影响计算精度的目的。

关键词 酪氨酸 化学位移 从头计算法

分类号 064

Experimental and theoretical studies of the ^1^3C chemical shift tensors of solid-state L-tyrosine

ZHENG AN,HU JIANZHI,ZHANG XIAODONG,SHEN LIANFANG,YE CHAOHUI

Abstract The principal values of ^1^3C chemical shift tensors in powdered L-tyrosine were measured by a newly developed Triple-echo two-dimensional magic angle turning (MAT) experiment. Theoretical results obtained by using the gauge invariant atomic orbitals (GIAO) ab initio method are basically in agreement with the observed values. It is shown that in complex system like L-tyrosine, using a locally dense basis set with a large number of atomic basis functions for the carbon atom of interest and smaller sets of atomic functions for the other atoms can not only save the disk capacity and computing time but also produce satisfactory results.

Key words TYROSINE CHEMICAL SHIFT AB INITIO CALCULATION

DOI:

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF(378KB)

[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“酪氨酸”的相关文章

本文作者相关文章

- 郑广
- 胡建治
- 张晓东
- 沈联芳
- 叶朝辉

通讯作者