

光谱学与光谱分析

## 丹参酮II A及丹参酮II A-Cu(II)配合物的分子结构和电子吸收光谱研究

石晶<sup>1</sup>, 宋毅<sup>2</sup>, 张昌华<sup>1</sup>, 彭金风<sup>1</sup>, 李萍<sup>1\*</sup>

1. 四川大学原子与分子物理研究所, 四川 成都 610065

2. 四川大学华西医院药剂科, 四川 成都 610041

收稿日期 2010-11-22 修回日期 2011-2-20 网络版发布日期 2011-10-1

**摘要** 用ICCD瞬态光谱探测系统, 检测了乙醇溶剂中丹参酮II A及其与Cu(II)形成的配合物的紫外-可见吸收光谱。采取密度泛函(DFT)方法优化几何构型, 获得了丹参酮II A及丹参酮II A-Cu(II)配合物的稳定几何结构。在此基础上, 运用含时密度泛函(TD-DFT)方法, 计算了丹参酮II A及丹参酮II A-Cu(II)配合物的气相和乙醇溶剂(PCM)中的电子吸收光谱。结果表明, 乙醇溶剂效应使丹参酮II A的吸收光谱红移, 配合物的吸收光谱蓝移。计算得到的溶液相丹参酮II A及丹参酮II A-Cu(II)配合物电子吸收光谱与实验测量光谱符合较好。本文首次测量和计算得到了丹参酮II A与Cu(II)形成的配合物的电子吸收光谱。

**关键词** [丹参酮II A-Cu\(II\)配合物](#) [电子吸收光谱](#) [ICCD](#) [TD-DFT](#)

分类号 [O433.5](#)

DOI: [10.3964/j.issn.1000-0593\(2011\)10-2668-04](#)

通讯作者:

李萍 [lpscun@163.com](mailto:lpscun@163.com)

### 扩展功能

#### 本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(1437KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(OKB\)](#)

▶ [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“丹参酮II A-Cu\(II\)配合物”的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [石晶](#)

· [宋毅](#)

· [张昌华](#)

· [彭金风](#)

· [李萍](#)