

# Study on Density Functional Theory of Metoprolol

Cunhai Liu, Ye Liu, Yuliang Wang, Jilei Zhang

School of Basic Sciences for Aviation, Naval Aviation University, Yantai Shandong  
Email: 15949710996@163.com

Received: Apr. 25<sup>th</sup>, 2019; accepted: May 7<sup>th</sup>, 2019; published: May 14<sup>th</sup>, 2019

---

## Abstract

The Metoprolol is studied at the 6-31G(d) basis set level, using the B3LYP method of density functional theory, and the stable structure and its infra-red spectrum are gained. After researched, according to different types of vibration modes, the infra-red spectrum of methyl Metoprolol mainly lies in four different regions: (0 - 1000)  $\text{cm}^{-1}$ , (1000 - 1600)  $\text{cm}^{-1}$ , (1600 - 3000)  $\text{cm}^{-1}$  and (3000 - 4000)  $\text{cm}^{-1}$ . Because there are degeneracy and non-infrared activity in the spectrum, the practicable number of the spectral line is less than that of the normal vibration modes.

## Keywords

Metoprolol, Density Functional Theory, Infra-Red Spectrum, Infrared Activity

---

# 美托洛尔的密度泛函理论研究

刘存海, 柳叶, 王玉良, 张纪磊

海军航空大学航空基础学院, 山东 烟台  
Email: 15949710996@163.com

收稿日期: 2019年4月25日; 录用日期: 2019年5月7日; 发布日期: 2019年5月14日

---

## 摘要

本文应用密度泛函理论的B3LYP方法, 在6-31G(d)基组水平上对美托洛尔分子进行了理论计算, 得到了分子的稳定构型及其红外光谱。研究发现根据分子振动类型的不同, 美托洛尔的红外振动光谱主要分布在(0~1000)  $\text{cm}^{-1}$ 、(1000~1600)  $\text{cm}^{-1}$ 、(1600~3000)  $\text{cm}^{-1}$ 和(3000~4000)  $\text{cm}^{-1}$ 四个区域。由于存在简并和无红外活性的现象, 红外谱中实际谱线的数目小于实际简正振动的数目。

## 关键词

美托洛尔, 密度泛函理论, 红外光谱, 红外活性

Copyright © 2019 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

## 1. 引言

美托洛尔, 属于 2A 心脏选择性  $\beta_1$ -受体阻断药, 它对  $\beta_1$ -受体有选择性阻断作用, 其阻断  $\beta_1$ -受体的作用约与普萘洛尔相等, 对  $\beta_1$ -受体的选择性稍逊于阿替洛尔。主要用于治疗心绞痛、心率失常、高血压、甲状腺机能亢进、心肌梗塞, 指证盐酸普萘洛尔。适用于轻、中型高血压, 其降压效果与拉贝洛儿、地尔硫卓、硝苯地平和氯噻酮一样有效。尤其用于伴有哮喘或糖尿病的高血压患者。用于稳定劳累型心绞痛, 可降低心绞痛发作心率和硝酸甘油用量, 提高运动耐量, 与等量普萘洛尔、氧烯洛儿和维拉帕米一样有效。还可用于治疗心肌梗塞和急性心肌缺血, 具有缓解胸痛、缩小梗死面积、降低心梗后快速型心率失常的发生及死亡率的作用。近年来, 人们对美托洛尔的研究越来越热衷。2008 年[1], 孙建华等人利用毛细管电泳法测定了酒石酸美托洛尔片的含量, 证明了毛细管测定法是一种方法简便, 准确, 快速, 重复性好的测定法。2012 年[2], 李东辉等人利用碳糊电极法测定了美托洛尔片中的美托洛尔, 结果表明结果电极的 Nernst 响应范围为  $0.01\sim 5.0 \times 10^{-6} \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$ , 级差为  $30.2 \text{ mV}\cdot\text{pC}^{-1}$ , 检出限为  $3.2 \times 10^{-6} \text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$ , 证明碳糊美托洛尔电极法可简便、快速、准确地检测片剂中美托洛尔的含量。2016 年[3], 张文骥等对汗液中美托洛尔及其代谢物的提取与检测进行了研究, 结果表明可依据汗液中美托洛尔和  $\alpha$ -羟基美托洛尔的检测对排汗人进行识别。

红外光谱分析法作为一种有效而广泛的分析方法, 它主要可以用作分子结构的基础研究, 以及物质化学组成的定性和定量分析。密度泛函理论[4] [5]采用电子密度来处理复杂电子体系, 已被广泛地应用于各个领域, 可方便的研究物质的各种特性。本文运用 Gaussian 09 计算程序, 在 B3LYP/6-31G(d)水平上研究了美托洛尔分子的结构特点及红外光谱分布规律, 并对谱峰的形成机理进行了探讨, 以期能为更好的了解美托洛尔的药理特性提供理论支持。

## 2. 计算方法

首先, 运用 GaussView 图形构建软件猜测构建两了美托洛尔分子的初始构型, 然后运用 Gaussian 09 计算程序先后在 hf/3-21g 和 b3lyp/6-31G(d)的水平上, 并在标准状况下对初始构型进行了结构优化, 频率计算发现该构型所对应的分子振动频率中未出现虚频, 进而确定该构型即为稳定构型, 然后经频率分析获得了该稳定构型的红外光谱, 并对光谱中出现的各条谱线进行了指认, 对谱线形成的机理进行了分析。文中对计算所得到的振动频率均采用 0.9613 [6]的修正因子进行修正。

## 3. 结果与讨论

### 3.1. 美托洛尔的结构特点

美托洛尔分子的稳定构型如图 1 所示, 在苯环的对位位置出现两个链式结构。表 1 中列出了美托洛尔分子的相关结构参数。计算结果表明, 整个美托洛尔分子的构型存在非对称性的结构特点。整个分子

中含有 C-H、C-C、C-O、C-N、H-N 和 H-O 和键六种化学键。在分子结构中仅有一个 H-O 键，即 21H-20O 键，键长为 0.947 Å，而 22N 所形成的分子键中，22N-17C 和 24C-22N 的键长分别为 1.446 Å 和 1.454 Å，23H-22N 的键长仅为 1.000 Å。在各 C-C 键中，苯环中 2C-1C 和 4C-3C 的键长相同，均为 1.384 Å，3C-2C 和 5C-4C 键长均为 1.385 Å，6C-5C 键长 1.390 Å，而所有 C-C 键中 30C-24C 的键长最长，为 1.535 Å，而在两个链式结构所形成的 C-C 键中，37C-34C 的键长为 1.524 Å，15C-12C 和 34C-6C 的键长分别为 1.522 Å 和 1.513 Å，17C-15C 和 26C-24C 的两键长仅相差 0.001 Å，分别为 1.527 Å 和 1.528 Å。在所形成的 C-O 键中，20O-15C 的键长最长为 1.411 Å，11O-3C 和 12C-11O 的键长分别为 1.365 Å 和 1.408 Å，而 40O-37C 和 41C-40O 的键长分别为 1.392 Å 和 1.392 Å。在 N 原子所参与形成的化学键中，24C-22N 的键长最大，为 1.454 Å，22N-17C 和 23H-22N 的键长分别为 1.446 Å 和 1.000 Å。而分子结构中存在的唯一一个 H-O 键，即 21H-20O，其键长为 0.947 Å。在分子结构中的 C-H 键中，苯环中的 7H-1C 和 10H-5C 两键长均为 1.076 Å，8H-2C 和 9H-4C 的键长分别为 1.075 Å。对分子结构中的 H-C 键而言，各化学键的键长相差较小，其中 44H-41C、38H-37C 和 39H-37C 的键长均为 1.089 Å，14H-12C、19H-17C、29H-26C、31H-30C 和 42H-41C 五个 H-C 键键长均为 1.088 Å，13H-12C、27H-26C 和 33H-30C 三个键的键长为 1.086 Å，18H-17C 和 28H-26C 的键长均为 1.083 Å，而 43H-41C 和 25H-24C 两化学键的键长分别为 1.081 Å 和 1.087 Å。

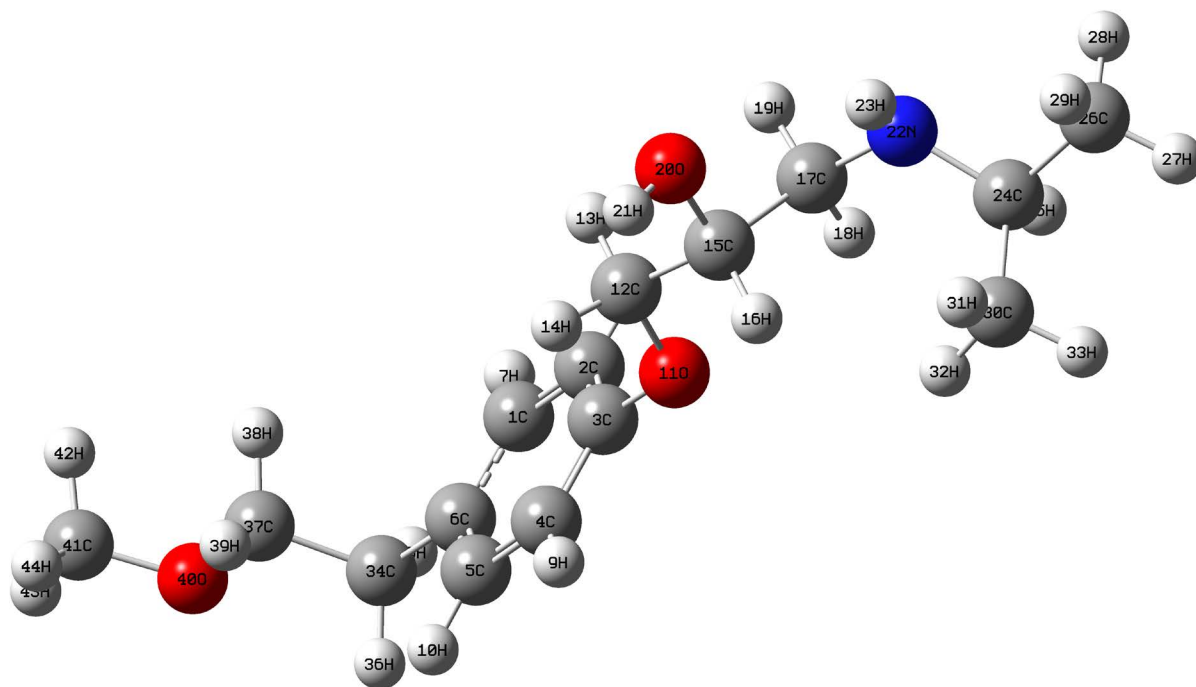


Figure 1. Stable structure of Metoprolol

图 1. 美托洛尔分子稳定构型

分子结构中，苯环中的骨架 C 原子所形成的  $\angle 3C-2C-1C$ 、 $\angle 4C-3C-2C$ 、 $\angle 5C-4C-3C$  和  $\angle 6C-5C-4C$  均，以及  $\angle 11O-3C-2C$  均为  $120^\circ$ ， $\angle 7H-1C-2C$ 、 $\angle 9H-4C-3C$ 、 $\angle 10H-5C-4C$  和  $\angle 24C-22N-17C$  均为  $119^\circ$ ， $\angle 41C-40O-37C$  和  $\angle 22N-17C-15C$  分别为  $114^\circ$  和  $115^\circ$ ， $\angle 43H-41C-40O$ 、 $\angle 18H-17C-15C$  和  $\angle 20O-15C-12C$  均为  $109^\circ$ ，而  $\angle 12C-11O-3C$  和  $\angle 30C-24C-22N$  均为  $116^\circ$ 。在各原子所形成地二面角中，中也存在大量  $0^\circ$  和  $180^\circ$  二面角，表面参与形成这些二面角的各原子出现在同一面内。但也存在其他角度的二面角，这也间接表明美托洛尔分子构型的对称性比较差的现象。

**Table 1.** Structure parameters of Metoprolol  
**表 1.** 美托洛尔分子的结构参数

键长(Å)		键角(°)		二面角(°)	
2C-1C	1.384	3C-2C-1C	120	4C-3C-2C-1C	0
3C-2C	1.385	4C-3C-2C	120	5C-4C-3C-2C	0
4C-3C	1.384	5C-4C-3C	120	6C-5C-4C-3C	0
5C-4C	1.385	6C-5C-4C	120	7H-1C-2C-3C	180
6C-5C	1.390	7H-1C-2C	119	8H-2C-1C-6C	180
7H-1C	1.076	8H-2C-1C	121	9H-4C-3C-2C	180
8H-2C	1.075	9H-4C-3C	119	10H-5C-4C-3C	180
9H-4C	1.075	10H-5C-4C	119	11O-3C-2C-1C	180
10H-5C	1.076	11O-3C-2C	120	12C-11O-3C-2C	87
11O-3C	1.365	12C-11O-3C	116	13H-12C-11O-3C	-58
12C-11O	1.408	13H-12C-11O	111	14H-12C-11O-3C	61
13H-12C	1.086	14H-12C-11O	110	15C-12C-11O-3C	180
14H-12C	1.088	15C-12C-11O	108	16H-15C-12C-11O	-55
15C-12C	1.522	16H-15C-12C	108	17C-15C-12C-11O	67
16H-15C	1.085	17C-15C-12C	112	18H-17C-15C-12C	-58
17C-15C	1.527	18H-17C-15C	109	19H-17C-15C-12C	57
18H-17C	1.083	19H-17C-15C	107	20O-15C-12C-11O	-175
19H-17C	1.088	20O-15C-12C	109	21H-20O-15C-12C	75
20O-15C	1.411	21H-20O-15C	110	22N-17C-15C-12C	180
21H-20O	0.947	22N-17C-15C	115	23H-22N-17C-15C	-36
22N-17C	1.446	23H-22N-17C	111	24C-22N-17C-15C	96
23H-22N	1.000	24C-22N-17C	119	25H-24C-22N-17C	55
24C-22N	1.454	25H-24C-22N	106	26C-24C-22N-17C	171
25H-24C	1.087	26C-24C-22N	108	27H-26C-24C-22N	-176
26C-24C	1.528	27H-26C-24C	111	28H-26C-24C-22N	-55
27H-26C	1.086	28H-26C-24C	110	29H-26C-24C-22N	65
28H-26C	1.083	29H-26C-24C	111	30C-24C-22N-17C	-64
29H-26C	1.088	30C-24C-22N	116	31H-30C-24C-22N	-58
30C-24C	1.535	31H-30C-24C	111	32H-30C-24C-22N	62
31H-30C	1.088	32H-30C-24C	112	33H-30C-24C-22N	180
32H-30C	1.085	33H-30C-24C	111	34C-6C-5C-4C	180
33H-30C	1.086	34C-6C-5C	121	35H-34C-6C-5C	-149
34C-6C	1.513	35H-34C-6C	110	36H-34C-6C-5C	-31
35H-34C	1.085	36H-34C-6C	110	37C-34C-6C-5C	90
36H-34C	1.085	37C-34C-6C	112	38H-37C-34C-6C	59
37C-34C	1.524	38H-37C-34C	110	39H-37C-34C-6C	-59
38H-37C	1.089	39H-37C-34C	110	40O-37C-34C-6C	180
39H-37C	1.089	40O-37C-34C	108	41C-40O-37C-34C	180
40O-37C	1.392	41C-40O-37C	114	42H-41C-40O-37C	61
41C-40O	1.392	42H-41C-40O	111	43H-41C-40O-37C	180
42H-41C	1.088	43H-41C-40O	109	44H-41C-40O-37C	-61
43H-41C	1.081	44H-41C-40O	111		
44H-41C	1.089				

### 3.2. 美托洛尔的红外振动光谱

红外振动光谱是由分子的振动能级发生跃迁而产生的。红外谱线的强度主要取决于分子振动时偶极矩的变化大小和跃迁几率的大小[7]。分子振动时偶极矩的变化大小确定了红外吸收的强弱，若振动时无偶极矩的变化，即红外光谱的强度为零，这种形成红外吸收的振动称为“红外活性的”，相反则称为“无红外活性的”。

在标准状况下，美托洛尔分子的红外光谱如图 2 所示，分析发现在整个光谱中出现两红外活性和简并现象，致使光谱中实际出现的谱线数目较理论数偏少，根据分子振动模式的不同，可将红外光谱划分为(0~1000)  $\text{cm}^{-1}$ 、(1000~1600)  $\text{cm}^{-1}$ 、(1600~3000)  $\text{cm}^{-1}$  和(3000~4000)  $\text{cm}^{-1}$  四个区域。

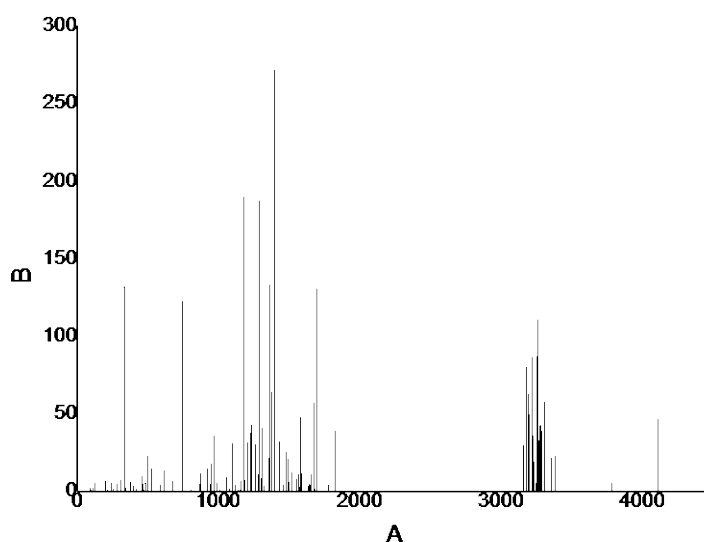


Figure 2. Infra-red spectrum of Metoprolol  
图 2. 美托洛尔分子的红外光谱

在(0~1000)  $\text{cm}^{-1}$  区域，分子振动类型主要是各基团的整体转动或摆动，以及苯环的呼吸振动。该区域中红外光谱的整体强度较低，这主要是由于该区域中的谱峰所对应的分子振动没有引起分子偶极矩的较大变化，甚至大量分子振动模式出现了无红外活性的现象造成地。该区域的最强峰出现在 332  $\text{cm}^{-1}$  位置，它是由含 26C 的甲基基团整体转动和含 30C 的甲基基团整体转动的复合振动引起地，次强峰出现在 740  $\text{cm}^{-1}$  位置，其对应的分子振动模式主要是含 41C 的甲基基团整体转动。此外，含 41C 的甲基基团整体转动和含 30C 的甲基基团整体摆动的复合振动在 969  $\text{cm}^{-1}$  位置引起一较强共振峰，而含 30C 的甲基基团的整体摆动在 499  $\text{cm}^{-1}$  位置引起一共振峰，但强度较前者低；945  $\text{cm}^{-1}$  位置共振峰是由苯环的呼吸振动引起地，而苯环的呼吸振动与含 41C 的甲基基团的整体摆动的复合振动在 919  $\text{cm}^{-1}$  位置形成一较强共振峰。在 525  $\text{cm}^{-1}$  位置出现两双重简并的现象，其分子振动模式分别为含 30C 的甲基基团的整体转动和 26C 的甲基基团整体摆动，而同时在 612  $\text{cm}^{-1}$  位置出现了三重简并现象，其分子振动模式分别为含 41C 的甲基基团整体摆动、苯环的呼吸振动与含 40C 的甲基基团的整体摆动的复合振动，以及含 26C、30C 和 41C 三个甲基基团的整体转动的复合振动。此外，在 55  $\text{cm}^{-1}$ 、38  $\text{cm}^{-1}$  和 703  $\text{cm}^{-1}$  三个位置出现了无红外活性的现象，对应的分子振动模式分别为羟基基团的整体摆动、含 26C 的甲基基团的整体转动，以及含 26C 和 41C 两个甲基基团的整体摆动的复合振动。

在(1000~1600)  $\text{cm}^{-1}$  区域，分子振动类型主要是面外弯曲振动(含面外摇摆振动和扭曲振动)和变形振

动(含对称变形振动和不对称变形振动)。该区域中红外光谱的整体强度较强,该区域的最强峰出现在  $1396\text{ cm}^{-1}$  位置,其分子振动模式为 9H 和 10H 的扭曲振动与 13H 和 14H 的面外摇摆振动的复合振动,该振动峰也是整个红外光谱的最强峰;该区域最强峰出现在  $1178\text{ cm}^{-1}$  位置,它主要是由 27H 和 28H 的扭曲振动造成地,它也是整个红外光谱的次强峰。27H 和 29H 的面外摇摆振动与 31H 和 32H 的扭曲振动的复合振动在  $1284\text{ cm}^{-1}$  位置引起一共振峰,而同时 27H 和 29H 的面外摇摆振动与 31H 和 32H 的面外振动的复合振动在  $1362\text{ cm}^{-1}$  位置形成一较强共振峰,但强度相比前者略低。含 26C 的甲基基团中三个碳氢键的对称变形振动在  $1376\text{ cm}^{-1}$  位置形成一共振峰,而同时含 30C 的甲基基团中三个碳氢键的不对称变形振动在  $1577\text{ cm}^{-1}$  位置引起一共振峰,二者强度无较大差别。35H 和 36H 的面外摇摆振动在  $1236\text{ cm}^{-1}$  位置引起一共振峰,但二者的扭曲振动在  $1309\text{ cm}^{-1}$  位置形成一共振峰。 $1224\text{ cm}^{-1}$  位置的共振峰分子振动模式主要是 38H 和 39H 的扭曲振动,但该振动峰强度较低, $1290\text{ cm}^{-1}$  位置共振峰则是由 43H 和 42H 的扭曲振动形成地。42H 和 44H 的面外摇摆振动与 38H 和 39H 的扭曲振动的复合振动在  $1432\text{ cm}^{-1}$  位置引起一共振峰, $1209\text{ cm}^{-1}$  位置的共振峰是由 35H 和 36H 的面外摇摆振动与 13H 和 14H 的扭曲振动的复合振动引起地。含 41C 的甲基基团中的三个碳氢键的对称变形振动在  $1097\text{ cm}^{-1}$  位置一较强共振峰,而含 41C 的甲基基团中的三个碳氢键的不对称变形振动与 31H 和 32H 的复合振动在  $1259\text{ cm}^{-1}$  位置造成一共振峰的出现,但强度较弱。此外,在  $1479\text{ cm}^{-1}$  位置出现了三重简并的现象,其对应的分子振动模式分别为含 41C 的甲基基团中的三个碳氢键的不对称变形振动、35H 和 36H 的面外摇摆振动和 32H 和 33H 的扭曲振动的复合振动,以及 27H 和 29H 的面外摇摆振动、38H 和 39H 的扭曲振动及 42H 和 44H 的扭曲振动的复合振动。在  $1006\text{ cm}^{-1}$ 、 $1150\text{ cm}^{-1}$  和  $1025\text{ cm}^{-1}$  三个位置出现了无红外活性的现象,其对应的分子振动模式分别为 13H 和 14H 的扭曲振动与 43H 和 44H 的扭曲振动的复合振动、38H 和 39H 的面外摇摆振动与 28H 和 29H 的面外摇摆振动的复合振动,以及含 41C、30C 和 26C 的三个甲基基团中的碳氢键的对称变形振动的复合振动。

在  $(1600\sim 3000)\text{ cm}^{-1}$  区域,分子振动类型主要是面内曲振动(含面内摇摆振动和剪式振动)。该区域中红外光谱主要集中在  $(1600\sim 1850)\text{ cm}^{-1}$  区域,而在  $(1850\sim 3000)\text{ cm}^{-1}$  区域没有振动峰的出现。该区域的最强峰出现在  $1695\text{ cm}^{-1}$  位置,其分子振动模式为 7H、8H、9H 和 10H 的面内摇摆振动,分子振动模式如图 3 所示。该区域次强峰出现在  $1675\text{ cm}^{-1}$  位置,是由 23H 的面内摇摆振动造成地,振动模式如图 4 所示。 $1822\text{ cm}^{-1}$  位置共振峰是由 7H 和 8H 的剪式振动与 9H 和 10H 的剪式振动的复合振动引起地, $1672\text{ cm}^{-1}$  位置共振峰是由 13H 和 14H 的剪式振动造成地,如图 5 所示。 $1675\text{ cm}^{-1}$  位置的共振峰是由 18H 和 19H 的剪式振动、28H 和 29H 的剪式振动,以及 31H 和 33H 的剪式振动的复合振动引起地。42H 和 43H 的剪式振动在  $1645$  位置形成一共振峰,分子振动模式如图 6 所示。18H 和 19H 的剪式振动与 42H 和 43H 的剪式振动的复合振动在  $1641\text{ cm}^{-1}$  位置引起一较强共振峰。此外,在  $1636\text{ cm}^{-1}$ 、 $1643\text{ cm}^{-1}$  和  $1682\text{ cm}^{-1}$  三个位置出现两无红外活性的现象,其对应的分子振动模式分别为 42H 和 43H 的剪式振动与 42H 和 44H 的剪式振动的复合振动、38H 和 39H 的面内摇摆振动,以及 13H 和 14H 的扭曲振动与 28H 和 29H 的剪式振动的复合振动。

在  $(3000\sim 4000)\text{ cm}^{-1}$  区域,分子的振动类型主要为各原子的伸缩振动。该区域最强峰出现在  $3259\text{ cm}^{-1}$  位置,对应的分子振动模式为 31H 和 33H 的不对称伸缩振动与 27H 和 29H 不对称伸缩振动的复合振动,次强峰出现在  $3251\text{ cm}^{-1}$  位置,它是由 13H 和 14H 的不对称伸缩振动与 16H 的伸缩振动的复合振动造成地。 $3221\text{ cm}^{-1}$  位置的共振峰是由 42H 和 44H 的不对称伸缩振动引起地,而 38H、39H、42H、43H 和 44H 的对称伸缩振动复合振动在  $3179\text{ cm}^{-1}$  位置引起一较强共振峰。 $3194\text{ cm}^{-1}$  位置的共振峰对应的振动模式为 13H、14H 和 19H 的伸缩振动的复合振动,如图 7 所示。43H 的伸缩振动在  $3303\text{ cm}^{-1}$  位置引起一较强共振峰,如图 8 所示。此外, $3199\text{ cm}^{-1}$  位置出现了双重简并现象,其分子振动模式分别为 27H、28H、

29H、32H 和 33H 的伸缩振动的复合振动、21H 的伸缩振动。此外，在  $3783\text{ cm}^{-1}$  和  $3383\text{ cm}^{-1}$  两个位置对应的分子振动没有引起偶极矩的较大变化，出现了无红外活性的现象，对应的分子振动模式分别为 23H 的伸缩振动，以及 7H、8H、9H 和 10H 的伸缩振动。

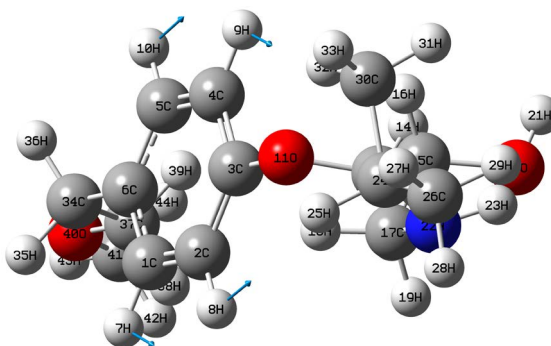


Figure 3.  $1695\text{ cm}^{-1}$  vibration mode  
图 3.  $1695\text{ cm}^{-1}$  振动模式

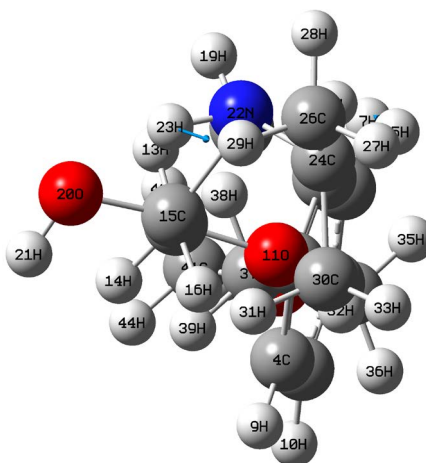


Figure 4.  $1675\text{ cm}^{-1}$  vibration mode  
图 4.  $1675\text{ cm}^{-1}$  振动模式

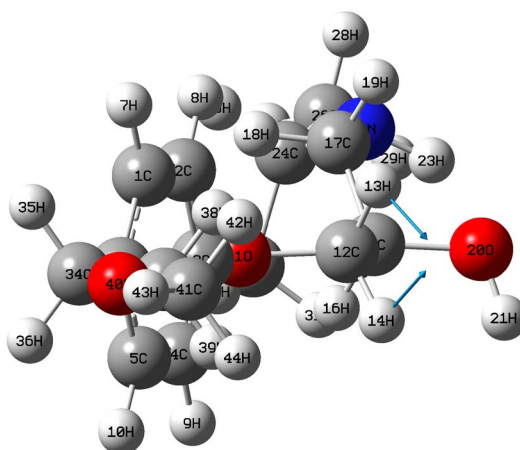


Figure 5.  $1672\text{ cm}^{-1}$  vibration mode  
图 5.  $1672\text{ cm}^{-1}$  振动模式

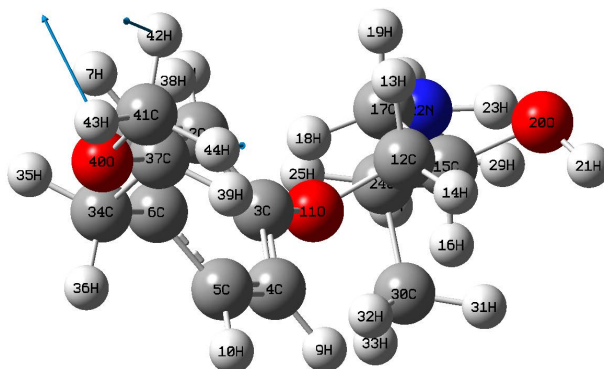


Figure 6. 1645  $\text{cm}^{-1}$  vibration mode  
图 6. 1645  $\text{cm}^{-1}$  振动模式

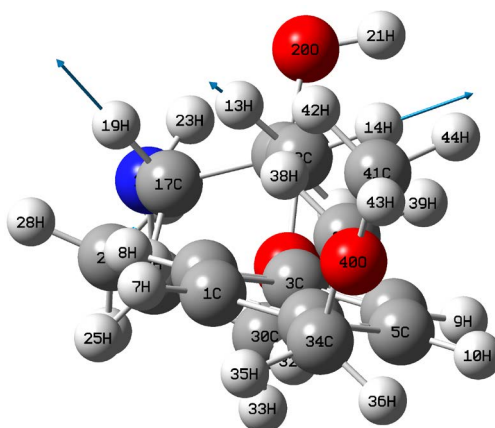


Figure 7. 3194  $\text{cm}^{-1}$  vibration mode  
图 7. 3194  $\text{cm}^{-1}$  振动模式

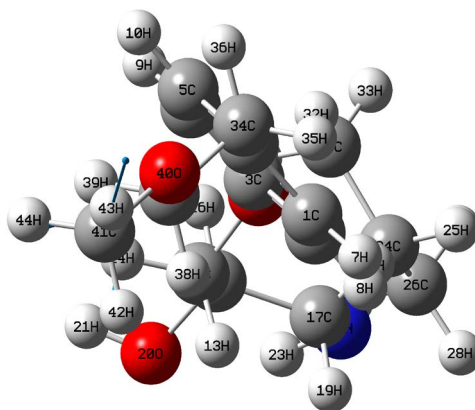


Figure 8. 3303  $\text{cm}^{-1}$  vibration mode  
图 8. 3303  $\text{cm}^{-1}$  振动模式

#### 4. 小结

本文通过理化计算获得了美托洛尔分子的稳定构型及红外振动光谱,并在此基础上详细分析了分子的结构特点。通过对红外光谱的研究发现,美托洛尔分子的红外光谱主要分布在四个区域,在(0~1000)



$\text{cm}^{-1}$  区域, 分子振动类型主要是各基团的整体转动或摆动, 以及苯环的呼吸振动; 在(1000~1600)  $\text{cm}^{-1}$  区域, 分子振动类型主要是面外弯曲振动和变形振动; 在(1600~3000)  $\text{cm}^{-1}$  区域, 分子振动类型主要是面内弯曲振动; 在(3000~4000)  $\text{cm}^{-1}$  区域, 分子的振动类型主要为各原子的伸缩振动。此外, 光谱中出现了简并和无红外活性的现象。

## 参考文献

- [1] 孙建华, 李海霞, 张红岭, 等. 毛细管电泳法测定酒石酸美托洛尔片的含量[J]. 郑州大学学报(医学版), 2008, 43(6): 1239-1241.
- [2] 李东辉, 李潇. 碳糊电极法测定美托洛尔片中的美托洛尔[J]. 华西药理学杂志, 2012, 27(2): 214-216.
- [3] 张文骥, 陈卓, 张婷, 许英健, 林子清. 汗液中美托洛尔及其代谢物的提取与检测[J]. 中国司法鉴定, 2016(6): 28-32.
- [4] 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.
- [5] 张伏龙. 硅锆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): 135-139.
- [6] Wong, M.W., Wiberg, K.B. and Frisch, M.J. (1991) Hartree-Fock Second Derivatives and Electric Field Properties in a Solvent Reaction Field: Theory and Application. *The Journal of Chemical Physics*, **95**, 8991-8996. <https://doi.org/10.1063/1.461230>
- [7] 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.

### 知网检索的两种方式:

1. 打开知网页面 <http://kns.cnki.net/kns/brief/result.aspx?dbPrefix=WWJD>  
下拉列表框选择: [ISSN], 输入期刊 ISSN: 2160-7567, 即可查询
2. 打开知网首页 <http://cnki.net/>  
左侧“国际文献总库”进入, 输入文章标题, 即可查询

投稿请点击: <http://www.hanspub.org/Submission.aspx>

期刊邮箱: [app@hanspub.org](mailto:app@hanspub.org)