

# Study on Quantitative Calculation of L-Glutamic Acid

Ye Liu, Cunhai Liu, Xiaodong Cui, Jilei Zhang

School of Basic Sciences for Aviation, Naval Aviation University, Yantai Shandong  
Email: cunhai1118@163.com

Received: Feb. 5<sup>th</sup>, 2019; accepted: Feb. 18<sup>th</sup>, 2019; published: Feb. 25<sup>th</sup>, 2019

---

## Abstract

The regularity of structural characteristics and infra-red spectrum distribution rules of L-glutamic acid molecular and ion are studied by the method of b3lyp/6-31G (d). After researched, the result shows that the infra-red spectrum of L-glutamic acid mainly lies in four different regions, according to vibration modes, which are (0 - 800)  $\text{cm}^{-1}$ , (800 - 1350)  $\text{cm}^{-1}$ , (1350 - 2500)  $\text{cm}^{-1}$  and (2500 - 4000)  $\text{cm}^{-1}$ . Compared to the spectrum of L-glutamic acid, the intensity of the spectral line, number and the type of molecular vibration of L-glutamic acid ion has obvious difference. The strongest and secondary peaks of the spectral lines appear red shift. In addition, there is no infrared activity and degeneracy in both infra-red spectrums.

## Keywords

Red Shift, Infra-Red Spectrum, Infrared Activity, Degeneracy

---

# L-谷氨酸的量化计算研究

柳 叶, 刘存海, 崔晓东, 张纪磊

海军航空大学航空基础学院, 山东 烟台  
Email: cunhai1118@163.com

收稿日期: 2019年2月5日; 录用日期: 2019年2月18日; 发布日期: 2019年2月25日

---

## 摘 要

本文利用b3lyp/6-31G(d))的方法对L-谷氨酸分子和离子的结构特点和红外光谱的分布规律进行了研究。研究发现根据分子振动类型的不同, L-谷氨酸的红外振动光谱主要分布在(0~800)  $\text{cm}^{-1}$ 、(800~1350)  $\text{cm}^{-1}$ 、(1350~2500)  $\text{cm}^{-1}$ 和(2500~4000)  $\text{cm}^{-1}$ 四个区域。与L-谷氨酸分子的红外振动光谱相比, L-谷

氨酸离子的红外振动光谱在相同区域中谱线的整体强度、数目以及振动类型存在明显差异，谱线的最强峰和次强峰均出现了红移现象。此外，在两者的红外光谱中均存在无红外活性和简并的现象。

## 关键词

红移，红外光谱，红外活性，简并

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

L-谷氨酸又名“麸酸”，是蛋白质的主要构成成分，是白色结晶性粉末、几乎无臭，有特殊滋味和酸味，200℃时升华，224℃~225℃分解，饱和水溶液的PH值约为3.2，难溶于水，实际不溶于乙醇和乙醚、极易溶于甲酸。发酵制造L-谷氨酸是以糖质为原料经微生物发酵，采用“等电点提取”加上“离子交换分离树脂”分离的方法而制得。L-谷氨酸主要用于生产味精、香料，以及用作代盐剂、营养增补剂和生化试剂等。L-谷氨酸本身可用作药物，参与脑内蛋白质和糖的代谢，促进氧化过程，该品在体内与氨结合成无毒谷酰胺，使血胺下降，减轻肝昏迷症状。目前对诸如L-谷氨酸的检测研究，多采用茚三酮比色法[1]、色谱法[2] [3] [4]、电化学法[5]等方法。

量化计算方法是在量子力学基础上发展起来的一种计算方法，可用于解释和研究材料的各类物理和化学性质[6]。本文运用量化计算的方法和 Gaussian 09 计算软件对L-谷氨酸的中性分子和离子的结构特点和红外光谱特性进行了详细研究，对各区域红外振动光谱的特点及归属进行了指认，该研究可为实验研究L-谷氨酸的红外光谱特性提供对比分析数据，并进一步的为L-谷氨酸的红外光谱痕量检测技术提供理论支撑。

## 2. 计算方法

运用 GaussView 3.09 软件猜测构建了L-谷氨酸分子的初始构型。然后在 HF/3-21G 水平上对分子初始构型进行了初步优化运算，最后利用 B3LYP/6-31G (d)方法对所获得的初步优化构型进行了进一步的结构优化和频率运算，分别获得了L-谷氨酸分子和离子的稳定构型，并经频率分析得到了二者的红外振动光谱。频率分析采用 0.9613 [7]的修正因子进行修正。

## 3. 结果与讨论

### 3.1. L-谷氨酸分子的结构

L-谷氨酸的分子结构如图1所示。表1中列出了L-谷氨酸分子的部分结构参数。整个分子呈现出链状结构。在整个分子结构中存在C-H、C-C、C=O、C-O、H-O、C-N和N-H共7种化学键。与16N原子所形成的化学键中，17H-16N和18H-16N两个键的键长相等，均为1.018 Å，而16N与2C所形成的16N-2C的键长为1.457 Å。在结构中，氧原子与其它原子所形成的化学键中，20H1-9O和15H-13O两个化学键的键长相等，均为0.972 Å，13O-10C和19O-1C的键长分别为1.414 Å和1.356 Å，而结构中所存在的两个CO键的键长出现了明显差异，其中12O=1C键长为1.207 Å，14O=10C键长为1.534 Å。在分子结构中，所形成的四个C-C键键长相差不大，其中7C-4C和2C-1C键长均为1.535 Å，4C-2C和10C-7C键长

分别为 1.547 Å 和 1.557 Å。分子中 6 个 C-H 键键长相差较小, 其中 9H-7C、5H-4C 和 8H-7C 三个键的键长均为 1.095 Å, 6H-4C 和 3H-2C 键的键长分别为 1.101 Å 和 1.108 Å, 而 6 个 C-H 键中最长的为 11H-10C 键长, 为 1.121 Å。分子中各原子之间所成键角中,  $\angle 3\text{H}-2\text{C}-1\text{C}$ 、 $\angle 11\text{H}-10\text{C}-7\text{C}$  和  $\angle 15\text{H}-13\text{O}-10\text{C}$  三个键角均为  $106^\circ$ ,  $\angle 9\text{H}-7\text{C}-4\text{C}$ 、 $\angle 13\text{O}-10\text{C}-7\text{C}$  和  $\angle 17\text{H}-16\text{N}-2\text{C}$  均为  $109^\circ$ ,  $10\text{C}-7\text{C}-4\text{C}$ 、 $14\text{O}-10\text{C}-7\text{C}$ 、 $7\text{C}-4\text{C}-2\text{C}$  和  $4\text{C}-2\text{C}-1\text{C}$  四个键角均为  $114^\circ$ , 而  $\angle 19\text{O}-1\text{C}-12\text{O}$  和  $\angle 12\text{O}-1\text{C}-2\text{C}$  较其他键角略大, 分别为  $120^\circ$  和  $123^\circ$ 。此外, 在各原子所形成的二面角中,  $\angle 5\text{H}-4\text{C}-2\text{C}-1\text{C}$  和  $\angle 20\text{H}-19\text{O}-1\text{C}_1-2\text{O}$  均为  $179^\circ$ , 故参与形成二面角的四个原子近似处于同一平面内。

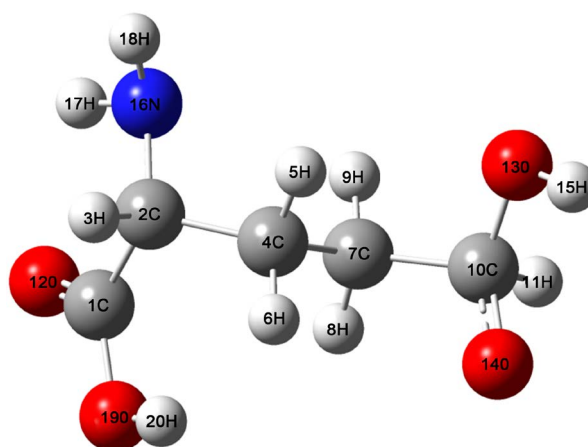


Figure 1. Stable structure of L-glutamic acid

图 1. L-谷氨酸分子的稳定构型

Table 1. Partial structural parameter of L-glutamic acid

表 1. L-谷氨酸分子的部分结构参数

键长(Å)		键角( $^\circ$ )		二面角( $^\circ$ )	
2C-1C	1.535	3H-2C-1C	106	4C2-C1-C-3H	116
3H-2C	1.108	4C-2C-1C	114	5H-4C-2C-1C	179
4C-2C	1.547	5H-4C-2C	108	6H-4C-2C-1C	-66
5H-4C	1.095	6H-4C-2C	111	7C-4C-2C-1C	59
6H-4C	1.101	7C-4C-2C	114	8H-7C-4C-2C	-66
7C-4C	1.535	8H-7C-4C	111	9H-7C-4C-2C	54
8H-7C	1.095	9H-7C-4C	109	10C-7C-4C-2C	174
9H-7C	1.095	10C-7C-4C	114	11H-10C-7C-4C	177
10C-7C	1.557	11H-10C-7C	106	12O-1C-2C-4C	-138
11H-10C	1.121	12O-1C-2C	123	13O-10C-7C-4C	-66
12O-1C	1.207	13O-10C-7C	109	14O-10C-7C-4C	63
13O-10C	1.414	14O-10C-7C	114	15H-13O-10C-7C	150
14O-10C	1.534	15H-13O-10C	106	16N-2C-1C1-2O	-15
15H-13O	0.972	16N-2C-1C	108	17H-16N-2C-1C	28
16N-2C	1.457	17H-16N-2C	109	18H-16N-2C-1C	147
17H-16N	1.018	18H-16N-2C	111	19O-1C1-2O-2C	177
18H-16N	1.018	19O-1C-12O	120	20H-19O-1C1-2O	179
19O-1C	1.356	20H-19O-1C	111		
20H1-9O	0.972				

### 3.2. L-谷氨酸分子的红外振动光谱

红外振动光谱是由于分子振动能级间的跃迁产生地。一般而言，多原子分子的复杂振动均可分解为诸多简单的基本振动，这些基本振动被称为简正振动，它包括伸缩振动和变形振动。伸缩振动分为对称伸缩振动和反对称伸缩振动。变形振动分为面内弯曲振动和面外弯曲振动，而面内弯曲振动又分为剪式弯曲振动、面内摇摆振动和环的呼吸振动，面外振动分为面外摇摆振动、扭曲振动和环的变形振动。此外，红外吸收强度决定于振动时偶极矩变化的大小。若振动过程中偶极矩变化较大，则跃迁几率就会越大，红外光谱强度就会较强；反之，强度就会较弱[8]。

在标准状况下，L-谷氨酸分子的红外振动光谱如图2所示。分析后发现按照分子振动类型的不同，可将邻L-谷氨酸分子酯的红外光谱划分为(0~800)  $\text{cm}^{-1}$ 、(800~1350)  $\text{cm}^{-1}$ 、(1350~2500)  $\text{cm}^{-1}$  和(2500~4000)  $\text{cm}^{-1}$  四个区域。光谱中每条谱峰都是由多个振动模式叠加而成地，且在光谱中出现了无红外活性和简并的现象。

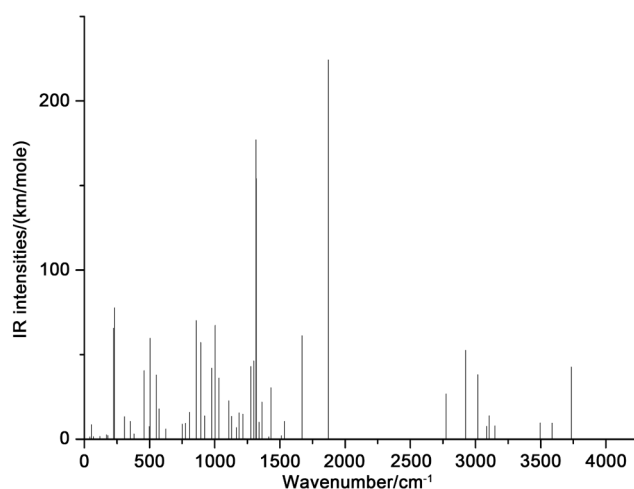


Figure 2. Infra-red spectrum of L-glutamic acid

图2. L-谷氨酸分子的红外光谱

在(0~800)  $\text{cm}^{-1}$  区域，分子振动类型主要是各基团的整体转动或摆动。本区域的红外光谱强度整体较低，这主要是由于该区域中的谱峰所对应的分子振动没有在较大程度上引起分子偶极矩的变化造成地，甚至有些分子振动没有引起偶极矩的变化，即没有对应谱线出现，也就是无红外活性。该区域中最强峰出现在 232  $\text{cm}^{-1}$  位置，它是由含 16N 的  $\text{NH}_2$  基团整体转动形成地，次强峰在 223  $\text{cm}^{-1}$  位置，它是由含 19O 的羟基和含 7C 的  $\text{CH}_2$  基团的整体转动造成地，而含 19O 的羟基和含 4C 的  $\text{CH}_2$  基团的整体转动在 504 位置引起一较强共振峰。此外，含 1C 的  $\text{COOH}$  羧基基团的整体摆动在 458  $\text{cm}^{-1}$  位置引起一共振峰，但其强度与含 10C 的  $\text{COOH}$  羧基基团的整体摆动在 551 位置形成的共振峰相比略强。而 573  $\text{cm}^{-1}$  位置的共振峰是有含 16N 的  $\text{NH}_2$  基团的整体摆动和含 10C 的  $\text{COOH}$  羧基基团的整体摆动的复合振动造成地。此外，该区域的光谱中，在 381  $\text{cm}^{-1}$  位置出现了双重简并现象，分别与含 16N 的  $\text{NH}_2$  基团的整体转动和含 1C 的  $\text{COOH}$  羧基基团的整体转动的复合振动，以及含 4C 和 7C 两个  $\text{CH}_2$  基团的整体摆动的复合振动相对应。而在 742  $\text{cm}^{-1}$  和 556  $\text{cm}^{-1}$  位置出现了无红外活性的现象。

在(800~1350)  $\text{cm}^{-1}$  区域，分子的振动类型主要是面外弯曲振动，包括扭曲振动和面外摇摆振动。其中最强峰出现在 1003  $\text{cm}^{-1}$  位置，它是由 8H 和 9H 的扭曲振动，及 4H 和 6H 的扭曲振动的复合振动造成地，区域次强峰出现在 891  $\text{cm}^{-1}$  位置，它是由 8H 和 9H 的扭曲振动，及 17H 和 18H 的扭曲振动的复合

振动引起地。6H 和 5H 的扭曲振动在  $1298\text{ cm}^{-1}$  位置引起一较强共振峰，而 6H 和 5H 的面外摇摆振动在  $1276\text{ cm}^{-1}$  位置造成一共振峰，但强度较  $1298\text{ cm}^{-1}$  位置谱峰的位置弱。此外，17H 和 18H 的面外摇摆振动在  $975\text{ cm}^{-1}$  位置形成一共振峰，11H 和 14O 的扭曲振动在  $1032\text{ cm}^{-1}$  位置造成一共振峰，而 12O 和 19O 的扭曲振动在  $1107\text{ cm}^{-1}$  位置引起一共振峰，5H 和 6H 的扭曲振动和，以及 8H 和 9H 的扭曲振动  $1215\text{ cm}^{-1}$  位置引起一共振峰，如图 3 所示，而 5H 和 6H 的扭曲振动、8H 和 7H 的扭曲振动及 11H 的面外摇摆振动的复合振动在  $1276\text{ cm}^{-1}$  位置引起一共振峰，如图 4 所示。该区域光谱与  $(0\sim 800)\text{ cm}^{-1}$  区域范围内的光谱相比，没有出现简并现象，但在  $1231\text{ cm}^{-1}$  位置出现了无红外性的现象，与 17H 和 18H 的扭曲振动及 3H 的面外摆动的复合振动相对应。

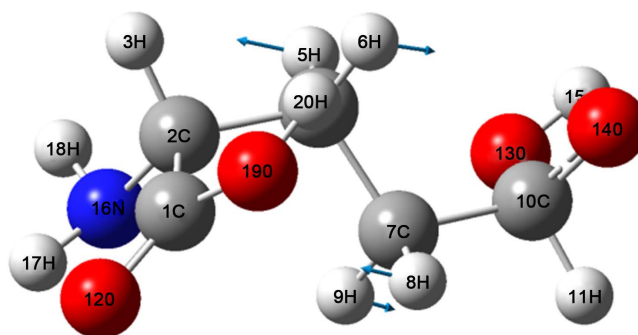


Figure 3.  $1215\text{ cm}^{-1}$  vibration mode  
图 3.  $1215\text{ cm}^{-1}$  振动模式

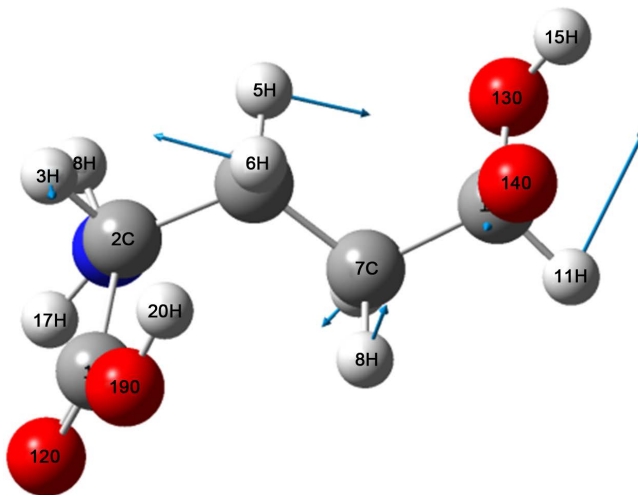


Figure 4.  $1276\text{ cm}^{-1}$  vibration mode  
图 4.  $1276\text{ cm}^{-1}$  振动模式

在  $(1350\sim 2500)\text{ cm}^{-1}$  区域，分子的振动类型主要为面内弯曲振动，包含剪式振动和面内摇摆振动。该区域最强峰出现在  $1870\text{ cm}^{-1}$  位置，它也是整个红外振动光谱中的最强峰，主要是由 17H 和 18H 的剪式振动和 1C 和 20H 的剪式振动的复合振动引起地。次强峰出现在  $1670\text{ cm}^{-1}$  位置，也是整个光谱中的次强峰，它是由 17H 和 18H 的剪式振动引起的，分子振动模式如图 5 所示。5H 和 6H 的剪式振动在  $1534\text{ cm}^{-1}$  位置形成一共振峰，振动模式如图 6 所示。 $1431\text{ cm}^{-1}$  位置的较强峰是由 17H 和 18H 的剪式振动、5H 和 6H 的面内摇摆振动及 3H 的面内摇摆振动的复合振动引起地，而在  $1414\text{ cm}^{-1}$  位置出现了无红外活性的现象，主要是由于 3H 和 5H 的面内摇摆振动没有引起分子偶极矩的变化。

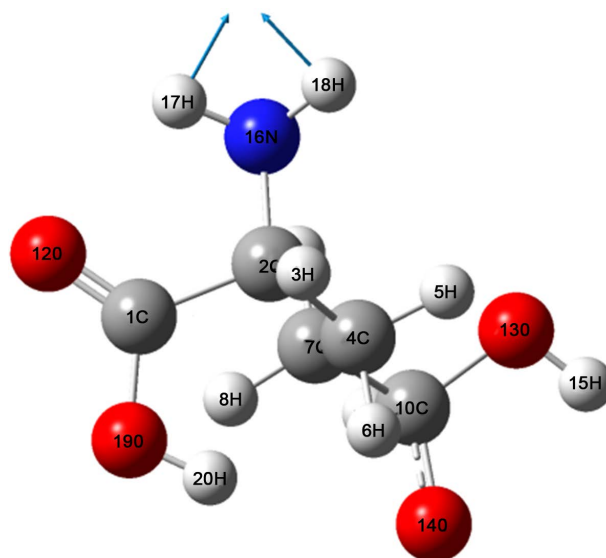


Figure 5.  $1670\text{ cm}^{-1}$  vibration mode  
图 5.  $1670\text{ cm}^{-1}$  振动模式

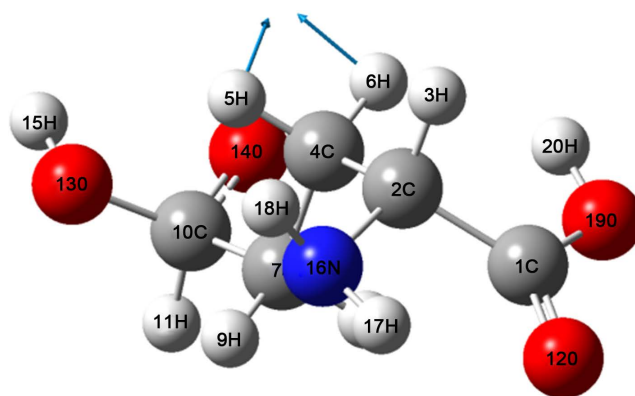
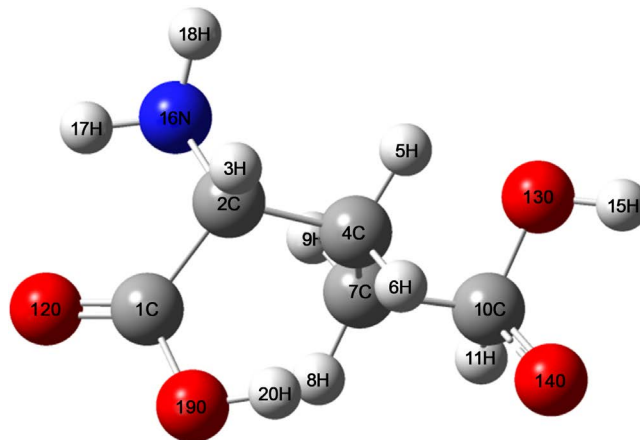


Figure 6.  $1534\text{ cm}^{-1}$  vibration mode  
图 6.  $1534\text{ cm}^{-1}$  振动模式

在 $(2500\sim 4000)\text{ cm}^{-1}$ 区域, 分子的振动类型主要为各原子的伸缩振动。该区域光谱强度整体较弱, 最强峰出现在 $2923\text{ cm}^{-1}$ 位置, 它是由 $3\text{H}$ 的伸缩振动引起地,  $3734\text{ cm}^{-1}$ 位置振动峰是该区域的次强峰, 与 $20\text{H}$ 的伸缩振动引起地, 而 $3017\text{ cm}^{-1}$ 位置的振动峰是由 $5\text{H}$ 和 $6\text{H}$ 的对称伸缩振动造成地。 $15\text{H}$ 的伸缩振动在 $3735\text{ cm}^{-1}$ 位置一较强共振峰, 其强度与 $11\text{H}$ 伸缩振动在 $2773\text{ cm}^{-1}$ 位置引起地共振峰强度近似相同。该区域的 $3105\text{ cm}^{-1}$ 位置出现了双重简并现象, 分子振动模式分别为 $8\text{H}$ 和 $9\text{H}$ 的反对称伸缩振动和 $5\text{H}$ 的对称伸缩振动相对应。此外,  $3587\text{ cm}^{-1}$ 位置振动峰是由 $17\text{H}$ 和 $18\text{H}$ 的反对称伸缩振动引起地,  $3149\text{ cm}^{-1}$ 位置是由 $8\text{H}$ 和 $9\text{H}$ 的反对称伸缩振动造成地, 同时 $8\text{H}$ 和 $9\text{H}$ 的对称伸缩振动在 $3084\text{ cm}^{-1}$ 位置引起一较强共振峰。

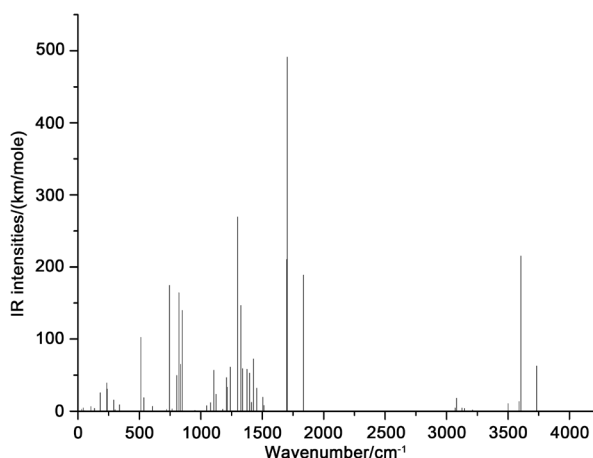
### 3.3. L-谷氨酸离子的结构和红外振动光谱

为了更进一步分析邻-L-谷氨酸的特性, 还对其失去一个电子后所形成的离子的结构和红外光谱进行了研究。图7为计算获得L-谷氨酸离子的稳定构型。通过对比发现在失去一个电子后, 结构中C-H键、C-C、N-H和C-O键的键长有所增加, C=O略有减小, O-H键基本无变化。



**Figure 7.** Stable structure of L-glutamic acid ion  
**图 7.** L-谷氨酸离子的稳定构型

**图 8** L-谷氨酸离子的红外光谱。与分子的红外振动光谱相比，光谱中谱线的整体强度有所增加，无红外活性和简并现象有所减少，致使光谱中谱线的数量也有所增多。离子光谱的最强峰和次强峰分别出现在  $1704\text{ cm}^{-1}$  和  $1299\text{ cm}^{-1}$  位置，较分子光谱中的最强峰和次强峰出现的位置出现相比，均出现了明显红移现象，分析认为这主要是由于失去一个电子后的分子结构中电子密度分布发生了较大变化，致使各基团之间的彼此作用力电离前后进行了较大变化，从而使基团的振动频率升高，对应的振动峰向长波方向偏移，即出现红移现象。从振动类型看，离子的红外振动光谱在  $(0\sim 500)\text{ cm}^{-1}$  主要是各基团的整体转动，在  $(500\sim 1500)\text{ cm}^{-1}$  区域主要是面内弯曲振动，在  $(1500\sim 1800)\text{ cm}^{-1}$  区域主要是面外弯曲振动，而在  $(1800\sim 4000)\text{ cm}^{-1}$  区域主要是伸缩振动。此外，在离子红外光谱中仍存在简并和无红外活性的现象。



**Figure 8.** Infra-red spectrum of L-glutamic acid ion  
**图 8.** L-谷氨酸离子的红外光谱

#### 4. 结论

本文通过理化计算获得了 L-谷氨酸分子和离子的稳定构型和红外振动光谱，对比分析了分子和离子的结构特点和红外光谱的分布规律。L-谷氨酸分子的红外光谱主要分布在四个区域，在  $(0\sim 800)\text{ cm}^{-1}$  区域，谱线强度整体较低，振动类型以各基团的整体转动或摆动为主。在  $(800\sim 1350)\text{ cm}^{-1}$  区域，分子的振动类型主要是面外弯曲振动，在  $(1350\sim 2500)\text{ cm}^{-1}$  区域，分子的振动类型主要为面内弯曲振动，在  $(2500\sim 4000)$

$\text{cm}^{-1}$  区域, 分子的振动类型主要为各原子的伸缩振动。与 L-谷氨酸分子的红外振动光谱相比, 谱线的整体强度、数目以及振动类型都有所不同, 且谱线的最强峰和次强峰均出现了红移现象。在两者的红外光谱中均存在无红外活性和简并的现象。

## 参考文献

- [1] 王昂, 王丽丽, 仪宏, 等. 茚三酮比色法测定谷氨酸含量的研究[J]. 中国调味品, 2005(8): 50-52.
- [2] 谭力, 刘放南, 张旭松. 人胃粘液中  $\gamma$  氨基丁酸和谷氨酸含量的高效液相色谱法测定[J]. 色谱, 2004, 2(22): 131-133.
- [3] 吴永康, 张新申. 低压离子色谱法测定酱油中的谷氨酸含量[J]. 四川大学学报(工程版), 2001, 33(3): 82-84.
- [4] Campanella, L., Crescentini, G. and Avino, P. (1999) Simultaneous Determination of Cysteine, Cystine and 18 Other Amino Acids in Various Matrices by High-Performance Liquid Chromatography. *Journal of Chromatography A*, **833**, 137-145. [https://doi.org/10.1016/S0021-9673\(98\)01023-1](https://doi.org/10.1016/S0021-9673(98)01023-1)
- [5] Soga, T. and Ross, G.A. (1999) Simultaneous Determination of Inorganic Anions, Organic Acids, Amino Acid and Carbohydrates by Capillary Electrophoresis. *Journal of Chromatography A*, **837**, 231-239. [https://doi.org/10.1016/S0021-9673\(99\)00092-8](https://doi.org/10.1016/S0021-9673(99)00092-8)
- [6] 黄丽娟, 郭迎春. CO 基态的偶极矩的量化计算研究[J]. 原子与分子物理学报, 2013, 30(6): 346-349.
- [7] 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>
- [8] 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: 327-328.

### 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)