

## 基于密度泛函的吡喹酮外场下的解离特性

葛浩然<sup>1,3</sup>, 王方原<sup>1,3</sup>, 李桂琴<sup>2</sup>, 叶松<sup>1,3</sup>, 汪杰君<sup>1,3</sup>, 李树<sup>1,3</sup>, 王新强<sup>1,3\*</sup>

1. 桂林电子科技大学电子工程与自动化学院, 广西 桂林 541004
2. 清华大学物理系, 北京 100084
3. 广西光电信息处理重点实验室, 广西 桂林 541004

**摘要** 废弃的药物化合物处理不当最终会进入环境成为污染物, 存在于天然水饮用水和城市废水中。医院污水中含有低浓度的药物, 当这些药物进入环境会成为污染物, 进而严重污染自然生态系统。吡喹酮一种广泛使用的非甾体抗炎药, 其不易溶于水, 使得污水中的药物降解成为一项挑战。为研究在外电场(EEF)作用下, 吡喹酮分子结构和光谱的变化, 选用密度泛函理论(DFT)以及 6-31+G(d, p)基组, 沿 Y 轴(N15-C16)方向施以 EEF(0~0.025 a. u.)并优化吡喹酮分子的基态几何构型, 探究了分子总能量、键长、红外光谱(IR)、偶极矩(DM)和 HOMO-LUMO 能隙。结果显示, 无 EEF 时, 吡喹酮分子中 C2 与 C17 间的单键优化成了苯环间的双键, 就使得 C16 与 C17 的  $\pi$  电子还有 N15 的孤立电子与苯环形成牢固的共轭体系, 使吡喹酮分子能量降到最低, 形成最稳定的构型。DM 随着 EEF 的增强缓慢增加, 当  $F \geq 0.015$  a. u. 时增速变大, 基态总能量的变化则与此相反。随着 EEF 的增强, 各个键长的伸缩变化不同。C3-C4, C3-N15, C5-C6, O10-C11 和 N15-C16 的键被拉长, 尤其是 O10-C11, C3-N15 和 N15-C16 键长变化剧烈, 最易断裂进而使吡喹酮分解。当 EEF 变大, 能隙不断降低, 表明在 EEF 下吡喹酮分子的电子易过渡到高能级, 使分子处于激发态。吡喹酮分子中不同化学键的振动产生的 IR, 相应地出现了不同的频谱移动, 这主要与能级有关, 能级差减小, 频率减小, 导致红移(RS), 反之则产生蓝移(BS); C16-C18 与 N15-C40 键长变化  $\Delta R$  与频移变化  $\Delta f$  的对应关系表明频谱移动还与分子轨道配置和偶极矩的变化等因素有关。较强的 4, 5, 6, 7 吸收峰发生 RS 且振动强度增强, 说明对应的化学键变得脆弱进而断裂。这些现象皆说明吡喹酮分子随着 EEF 的增强, 变得不稳定, 易发生解离。分析 EEF 下物质的分子结构和 IR, 可以电场解离方法研究降解吡喹酮, 以便为污水中的顽固药物降解提供理论指导。

**关键词** 吡喹酮; 药物降解; 外电场(EEF); 分子结构; 红外光谱(IR)

**中图分类号:** O433.4 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2020)08-2447-06

## 引言

吡喹酮是一种广泛使用的抗炎药, 具有解热、治疗炎症性肠病、抗肿瘤、消肿止痛、调节胰腺癌细胞中的增殖和侵袭、改善药物肠道通透性等药用功效<sup>[1-6]</sup>。虽然吡喹酮有很好的药用功效, 但其存在不易溶于水, 难降解, 生物利用度低的问题<sup>[7-8]</sup>。

传统污水处理厂中的药物降解是一项挑战, 因为城市污水和医院污水中会含有低浓度的顽固药物, 污水处理厂不能

有效去除药物。所以, 未被降解的药物化合物最终会进入环境成为污染物, 存在于天然水饮用水和城市废水中。医院污水中会含有低浓度的药物, 包括吡喹酮, 当这些药物进入环境会成为污染物, 进而严重污染自然生态系统。吡喹酮不易溶于水, 难降解使得污水中的药物降解成为一项挑战<sup>[9]</sup>。基于这些难题, 近年来, 国内外不断有人研究有效降解吡喹酮的方法, 其中有微生物解离法, 光降解法, 活性炭吸附法, 臭氧氧化法等。例如通过电氧化与生物系统共同作用去除废水中顽固药物<sup>[9]</sup>; 通过模拟在水溶液中太阳光催化降解吡喹酮<sup>[10]</sup>; 用高铁酸盐氧化吡喹酮, 分析反应产

收稿日期: 2019-07-18, 修订日期: 2019-11-22

基金项目: 国家自然科学基金项目(41561079), 中国科学院通用光学定标与表征技术重点实验室研究项目, 广西光电信息处理重点实验室基金项目(GD18104, GD18105)资助

作者简介: 葛浩然, 女, 1993年生, 桂林电子科技大学电子工程与自动化学院硕士研究生 e-mail: 762540062@qq.com

\* 通讯联系人 e-mail: xqwang2006@126.com

物和毒性变化<sup>[11]</sup>。而关于吲哚美辛在 EEF 下的解离特性和红外光谱(infrared spectroscopy, IR)还未见报道。

由于 IR 较强的特征性, IR 被广泛应用于量子场论的 IR 射线与物质相互作用领域, 即提供了一种准确的方法识别各种化学物质。人们发现在 EEF 下, 物质会发生许多新的物理和化学变化, 例如改变分子的 IR、化学键和电离能<sup>[12-13]</sup>等。针对目前吲哚美辛难降解的问题, 探究 EEF 下物质的分子结构和 IR 的变化情况, 可以为 EEF 解离方法研究降解吲哚美辛, 以便为降解污水中药物化合物提供理论指导。本工作选用密度泛函理论(density function theory, DFT), 分析了 EEF 作用下吲哚美辛分子的基态总能量、键长、偶极矩(dipole moment, DM)、能隙和 IR 的蓝移(blue shift, BS)和红移(red shift, RS), 其变化情况能分析出吲哚美辛在 EEF 下解离的难易程度。

## 1 理论和计算方法

考虑 EEF 的作用, 分子体系哈密顿量  $H$  的公式<sup>[12]</sup>

$$H = H_0 + H_{int} \quad (1)$$

式(1)中,  $H_0$  和  $H_{int}$  是分子分别在无 EEF 时和存在 EEF 的环境下同时作用的哈密顿量。在偶极近似下, EEF 与分子体系的相互作用能为<sup>[12]</sup>

$$H_{int} = -\mu F \quad (2)$$

式(2)中,  $\mu$  是分子电 DM,  $F$  为外电场。

$$\mu = \mu^0 + \alpha F + \frac{1}{2}\beta F^2 + \frac{1}{6}\gamma F^3 + \dots \quad (3)$$

式(3)中,  $\mu^0$  为分子永久电 DM,  $\alpha$  是偶极极化率,  $\beta$  是一阶超极化率,  $\gamma$  是二阶超极化率等。

$$E(F_i) = E(0) - \mu_i^0 F_i - \frac{1}{2}\alpha_i F_i^2 - \frac{1}{6}\beta_{iii} F_i^3 - \frac{1}{24}\gamma_{iiii} F_i^4 - \dots \quad (4)$$

式(4)中, 能量在 EEF 沿着  $i=x, y$  或  $z$  方向的表达式。

$$E_G = (E_L - E_H) \times 27.2 \text{ eV} \quad (5)$$

式(5)中, 能隙  $E_G$  的求法,  $E_L$  为 LUMO 能量和  $E_H$  为 HOMO 能量。式(1)一式(5)为在 EEF 下分子结构及其运动变化提供理论依据。

吲哚美辛的理论计算是在 Gaussian16<sup>[14]</sup> 软件中进行: 首先设置 DFT/B3LYP/6-31+G(d, p) 的方法, 同时沿 Y 轴(N15-C16)方向施以 EEF(0~0.025 a. u.), 得到不同 EEF 下吲哚美辛分子的各个基态物理参数和 IR。探讨了随着 EEF 的改变, 吲哚美辛的各个参数和 IR 的改变情况。吲哚美辛在 EEF 作用下解离的难易程度可以从这些改变情况看出。

无 EEF 作用时对吲哚美辛分子优化后得到的基态结构如图 1(a)所示, 此优化结构与文献<sup>[15]</sup>里的结果一致。C2 与 C17 间的单键优化成了苯环间的双键, 键长也明显缩短(由 1.816 Å 缩短为 1.445 Å), 分析认为 C2 与 C17 间的成键键型由  $\sigma$  键变成  $\pi$  键, 电子云密度变大, 所以优化后键长缩短。使得 N15 的孤立电子对结合 C16 与 C17 的电子, 它们和苯环构成一个牢固的共轭体系, 使吲哚美辛分子能量降到

最低, 形成最稳定的构型。二面角 D(29, 34, 40, 15) 为 38.58°。图 1(b)和(c)分别显示了最低未占分子轨道(LUMO)和最高占据分子轨道(HOMO)的前线轨道。从图 1 可以观察到, LUMO 主要分布在苯环  $\beta$ , 而 HOMO 主要聚在五元环和苯环  $\alpha$ 。从 HOMO-LUMO 的电子云中, 可以得出五元环轨道杂交的结论。

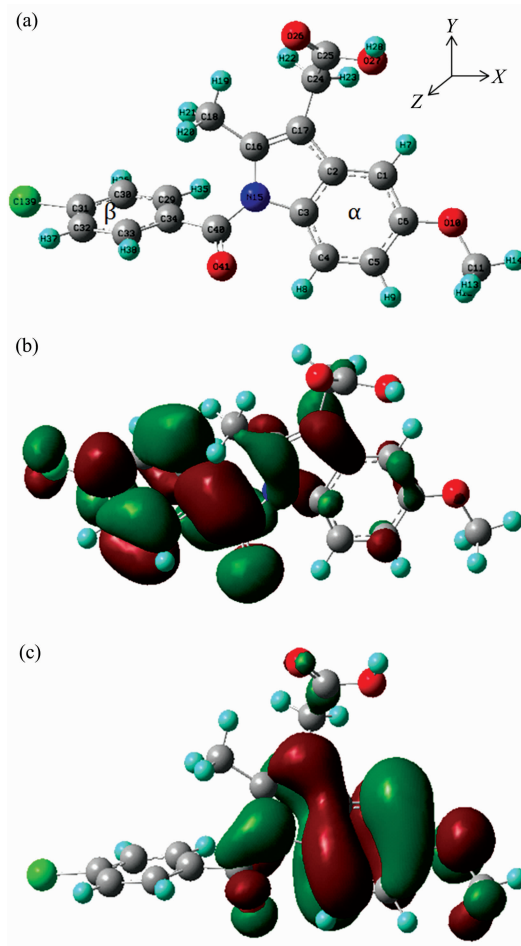


图 1 未施加 EEF 的图

(a): 吲哚美辛分子优化结构; (b): 前线轨道 LUMO; (c): 前线轨道 HOMO

Fig. 1 Figures without EEF

(a): Optimized molecular structure of indometacin without EEF; (b): Frontier orbital LUMO without EEF; (c): Frontier orbital HOMO

## 2 结果与讨论

### 2.1 不同 EEF 下吲哚美辛分子的几何结构

采用 DFT/B3LYP/6-31+G(d, p) 方法, 在 EEF(0~0.025 a. u.) 作用下进行基态优化。从图 2 可以看出, 当沿 N15-C16 方向的 EEF 强度逐渐增大时, 基态总能量在 EEF(0~0.015 a. u.) 下缓慢下降, 随后快速下降, DM 的改变则与此相反。DM 与能量的变化情况可以用式(3)和式(4)来解释。

当  $F = 0$  a. u. 时,  $E = -1\,549.827\,55$  Hartree,  $\mu = 1.615\,9$  Debye. 随着 EEF 的增强, 当  $F = 0.025$  a. u.,  $E = -1\,549.959\,71$  Hartree,  $\mu = 24.550\,5$  Debye, 且  $E$  和  $\mu$  在  $F = 0.015$  a. u. 有明显的拐点. 在  $F = 0.015$  a. u. 时突然出现的拐点, 在其他物理参数的变化也有明显的体现.

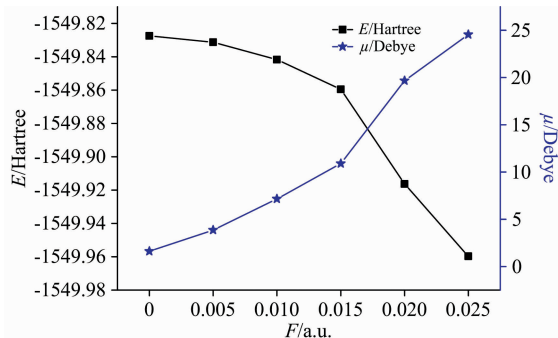


图 2 分子在 EEF 作用下的基态能量与偶极矩变化  
Fig. 2 Ground state energy and dipole moment of indometacin under different EEF

$\Delta R$  是有 EEF 与无 EEF 情况下的键长之差, 即键长的改变值, 如图 3 和图 6(a) 所示,  $\Delta R < 0$ , 表明键长缩短, 反之则被拉长. 文献[10-11]中表明吲哚美辛分子的 C3-C4, C3-N15, C5-C6, O10-C11 和 N15-C16 键易被氧化断裂进而分解. 在图 3 中, 随着 EEF 的增强, 这些键的  $\Delta R > 0$ , 特别是当  $F \geq 0.015$  a. u.,  $\Delta R$  明显变大. 当  $F = 0.025$  a. u., O10-C11 与 C3-N15 的  $\Delta R$  分别是  $0.061\,7$  和  $0.032\,8$  Å, 表明在 EEF 作用下, O10-C11, C3-N15 和 N15-C16 易断裂而使吲哚美辛分解, 与参考文献[10-11]的结果相吻合.

C6-O10, C16-C17, C16-C18, N15-C40 和 C25=O26 的  $\Delta R$  与 IR 吸收有关, 如图 6(a) 所示,  $\Delta R$  与 IR 吸收峰的 BS 和 RS 相对应. 2.3 节将给出详细的键的振动和 IR 峰位移. 从图 6(a) 可以看出, 随着 EEF 增加,  $\Delta R$ (C6-O10) 不断减小, 当  $F = 0.015$  a. u., 减小速度加快, 当  $F = 0.025$  a. u.,  $\Delta R$  为  $-0.061\,4$ ; 与之相反, C25=O26 一直被拉长; C16-C17 和 C16-C18 的  $\Delta R$  先变大后变小, 且  $F = 0.015$  a. u. 时是明显的转折点; N15-C40 的  $\Delta R$  基本没有变化.

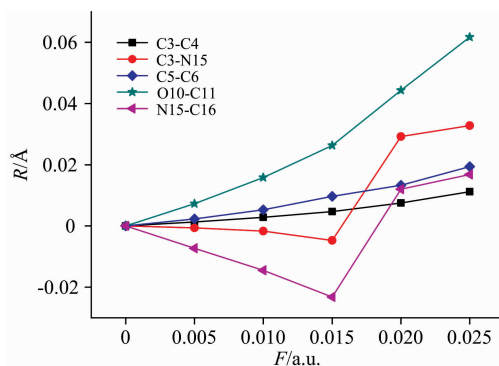


图 3 分子部分键长变化值随 EEF 变化的关系  
Fig. 3 Partial results of several bond lengths change value under different EEF

分子内部电子随着外部施以的 EEF 发生局部转移, 其内电场随之发生变化, 在内外电场的相互作用下, 键长出现不同的伸缩现象<sup>[10]</sup>. 由于 C3-C4, C3-N15, C5-C6, O10-C11 与 N15-C16 内部电子的转移, 使内电场衰弱, 导致其  $\Delta R > 0$ , 表明该化学键随 EEF 的增加逐渐变得脆弱而易发生断裂; 相似的, N15-C16, N15-C40 在内外场强作用下, 内电场先变强后减弱,  $R(15, 16)$ ,  $R(25, 26)$  的  $\Delta R$  先变小后变大; N15-C40 内没有电子云的移动, EEF 对其键长没有影响, 因此其  $\Delta R$  基本没有变化. 当  $F = 0.015$  a. u., C3-N15, N15-C16, C16-C17, C16-C18 和 C6-O10 的  $\Delta R$  有一个突然的改变, 这与电子状态的变化有关, 在参考文献[16]中的双原子也有类似变化的情况. 总之, 在 EEF, O10-C11, C3-N15 和 N15-C16 的  $\Delta R$  变化剧烈, 最易断裂, 表明吲哚美辛分子在 EEF 下会变得不稳定进而被分解.

## 2.2 EEF 对前线轨道的影响

在 2.1 节方法的基础上, 计算分子能量. 图 4 为能隙  $E_G$  的变化曲线, 具体求解见式(5). 在 EEF 下  $E_G$  大幅下降, 表明在 EEF 下吲哚美辛分子的电子易过渡到高能级, 使分子更易处于不稳定的激发态而发生化学反应, 如化学键的断裂等. 当  $F = 0.015$  a. u. 时,  $E_G$  曲线呈现出明显的连续下坡, 这种明显的变化在图 2 和图 3 中也有所体现.

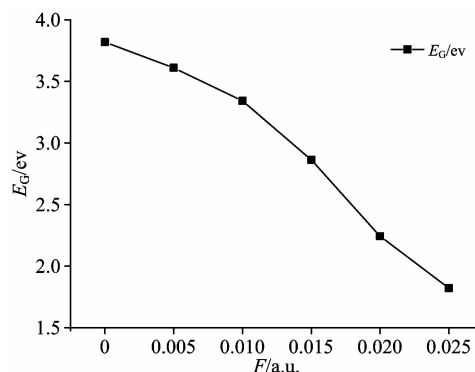


图 4 不同 EEF 下能隙  $E_G$  变化  
Fig. 4 Energy gaps  $E_G$  under different EEF

## 2.3 EEF 对红外光谱的影响

无 EEF 作用吲哚美辛的 IR 如图 5 所示, IR 的谱峰是由吲哚美辛分子中各个化学键的不同振动所致. 未施以 EEF 时化学键的振动产生的 IR, 与文献[17]的实验结果能很好地吻合. 图 5 仅列出部分较强 IR 吸收峰, 用(1)–(8)进行标识.  $607\text{ cm}^{-1}$  表征羧基  $\omega(\text{COOH})$ ;  $1\,102\text{ cm}^{-1}$  表征 C16-C18 的  $\nu(\text{C}-\text{C})$ , 以及 C24 所连乙基间的  $\omega(\text{C}_2\text{H}_5)$ ; 频率为  $1\,264\text{ cm}^{-1}$  表征 C6-O10 的  $\nu(\text{C}-\text{O})$  以及 O21-H28 的  $\omega(\text{O}-\text{H})$ ;  $1\,354\text{ cm}^{-1}$  表征 N15-C40 的  $\nu(\text{N}-\text{C})$ ; C16=C17 的  $\nu(\text{C}=\text{C})$  出现在  $1\,633\text{ cm}^{-1}$  处;  $1\,822\text{ cm}^{-1}$  属于 C25=O26 的  $\nu(\text{C}=\text{O})$ ; C11 所连甲基的  $\nu_{\text{as}}(\text{CH}_3)$  出现在  $3\,055\text{ cm}^{-1}$  处;  $3\,748\text{ cm}^{-1}$  对应的是羧基的 O27-H28 的  $\nu(\text{O}-\text{H})$ .

当施加不同 EEF 时的频谱移动情况如图 6(b) 所示. 图 6(b) 的标注中标明了化学键振动产生的 1 峰—8 峰与图 5 的吸收峰(1)–(8)一一对应, 图中  $\Delta f$  是 8 个较强吸收峰的频

率改变值,  $\Delta f > 0$ , 表示发生 BS, 反之则发生 RS,  $\Delta f$  的变化表明吲哚美辛分子随着 EEF 的增强, 有很强的振动斯塔克效应。显著的 BS 体现在 1, 3, 8 峰上, 随着 EEF 的增加, 1 峰的 BS 整体呈减小趋势, 而 8 峰的 BS 逐渐增加; 3 峰在 EEF(0~0.015 a. u.) 未出现 BS, 但在  $F \geq 0.02$  a. u., 出现强烈的 BS, 当  $F=0.025$  a. u., 频率增加  $56 \text{ cm}^{-1}$ 。5 峰和 6 峰出现 RS, 6 峰的 RS 最为剧烈, 频率降低了  $86 \text{ cm}^{-1}$ ; 5 峰在  $F=0.015$  a. u. 时, RS 最强烈, 频率降低了  $18 \text{ cm}^{-1}$ 。2 峰未发生频谱移动, 4 峰先 RS 后 BS, 7 峰先 BS 后 RS。总之, 相对较强的 4, 5, 6 和 7 吸收峰随 EEF 的增强都会发生 RS, 这是因为化学键的断裂程度发生了改变, 影响了键的振动频率。

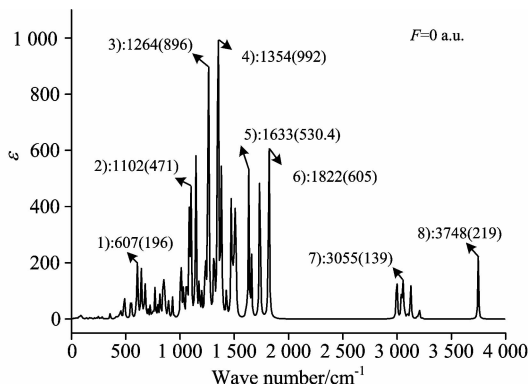


图 5 无 EEF 时吲哚美辛分子 IR  
Fig. 5 IR spectrum of indometacin  
molecules without EEF

图 6(a)是与 IR 吸收峰有关的部分化学键的  $\Delta R$ 。当  $\Delta R > 0$ , 由于能级差减小, 频率减小, 会发生 RS; 同理,  $\Delta R < 0$ , 会发生 BS。N15-C40 的  $\Delta R$  基本未发生改变, 但其 IR 吸收峰先 RS 后 BS, 且  $F=0.015$  a. u. 是拐点。 $\Delta R$ (C16-C18) 先变大后减小, 但 2 峰的  $\Delta f$  基本不变。从 N15-C40, C16-C18 的  $\Delta R$  与  $\Delta f$  的变化可以看出,  $\Delta f$  不仅与能级有关, 还与其他因素有关, 例如分子轨道配置和 DM 的变化。

在 EEF 下, 伴随着各个峰出现不同的 RS 和 BS 现象, 各个谱峰强度也发生了复杂的变化, 这是由于 EEF 下分子构型发生了变化, 如键长、键角的改变等都会重新分配红外光谱的振子强度, 其中(4), (5), (6)和(7)峰的振动强度增强, 说明对应的化学键(N5-C40, C16-C17, C25=O26 和 C11 所连甲基)变得脆弱, 而易发生断裂。

### 3 结论

通过 DFT/B3LYP/6-31+G(d, p)方法, 沿 Y 轴(N15-C16)方向加以 EEF(0~0.025 a. u.), 优化吲哚美辛分子的基态结构, 计算出各个物理参数和 IR, 同时分析了分子总能量、DM、键长、 $E_L$ ,  $E_H$ 、能隙、IR 的变化情况。结果如下:

(1) 基态总能量在 EEF(0~0.015 a. u.)下缓慢下降, 随后快速下降, 在  $F=0.015$  a. u 时呈现显著变化; DM 的变化

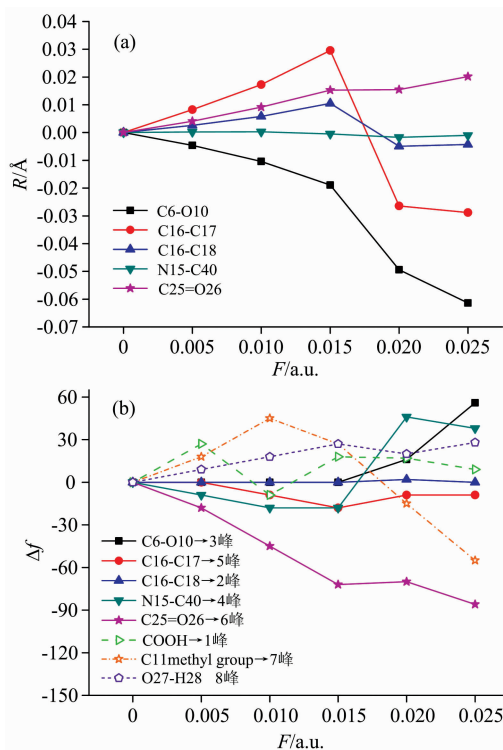


图 6 (a)不同 EEF 下与吸收峰相关的化学键的变化值  $\Delta R$ ;  
(b)不同 EEF 下 8 个较强吸收峰频率的变化值  
Fig. 6 (a) The change value of the chemical bond related to  
the absorption peak under different EEF; (b) The  
change value of eight strong absorption peak frequencies  
under different EEF

情况则与此相反。当 EEF 变大时, 能隙不断降低, 使分子处于不稳定的激发态而发生化学反应。

(2) 不同的键长变化不同。随着 EEF 的增强 C3-C4, C3-N15, C5-C6, O10-C11 与 N15-C16 的  $\Delta R > 0$ , 其中 O10-C11, C3-N15 和 N15-C16 的  $\Delta R$  变化剧烈, 最易断裂进而使吲哚美辛分解。

(3) 在 EEF 下, 不同的化学键振动引起的 IR 频谱移动也发生了显著的变化。当  $\Delta R > 0$ , 由于能级差减小, 频率减小, 导致 RS, 但是 N15-C40, C16-C18 的  $\Delta R$  与  $\Delta f$  的对应关系表明  $\Delta f$  不仅与能级有关, 还与其他因素有关, 例如分子轨道配置和 DM 的变化。4, 5, 6, 7 峰的振动强度增强, 说明对应的化学键变得脆弱, 而易发生断裂, 使吲哚美辛分子处于不稳定的状态。

综上所述, 吲哚美辛在 EEF 下的分子结构和 IR 都发生了明显的变化, 在不同 EEF 下, 键长、键角的改变会导致分子构型发生变化, 进而影响键振动频率和振动强度, 即 IR 会出现有不同的频移。随着 EEF 的增强, 能隙不断减小、部分化学键被拉伸逐渐变得脆弱, 这会使 IR 发生红移, 这些现象说明吲哚美辛分子随着 EEF 的增强, 变得不稳定, 易发生解离。可以为电场解离方法研究降解吲哚美辛, 以便为污水中的顽固药物降解提供理论指导。

## References

- [ 1 ] Mason L, Edwards J, Moore R A, et al. The Cochrane Database of Systematic Reviews, 2004, 4(4): 4308.
- [ 2 ] Mikusek J, Nugent J, Lan P, et al. Journal of Natural Products, 2019, 82(1): 96.
- [ 3 ] Fan N, Liu R Z, Ma P P, et al. Colloids and Surf. B, Biointerfaces, 2018, 176: 122.
- [ 4 ] Sun L K, Chen K, Jiang Z D, et al. Oncol. Rep. , 2018, 39: 2243.
- [ 5 ] Marcolongo R, Boggiano C A. Minerva Medica, 1966, 57(71): 2857.
- [ 6 ] Marcolongo R, Bianco G, Di P N. Minerva Medica, 1970, 61(82): 4532.
- [ 7 ] Lin J Y, Pan Z, Song L, et al. Appl. Surf. Sci. , 2017, 425: 674.
- [ 8 ] Rainsford K D, Stetsko P I, Sirko S P, et al. J. Pharm. Pharmacol. , 2003, 55(5): 661.
- [ 9 ] Rodriguez-Nava O, Ramirez-Saad H, Loera O, et al. Environ. Technol. , 2016, 37(23): 2964.
- [10] Zhang Q X, Chen P, Zhuo M H, et al. Appl. Catal. B-Environ. , 2018, 221: 129.
- [11] Huang J L, Wang Y H, Liu G G, et al. Environ. Sci. Pollut. Res. , 2017, 24(11): 10786.
- [12] Wu D L, Tan B, Wan H J, et al. Chin. Phys. B, 2013, 22(12): 5.
- [13] Gao F W, Xu H L, Su Z M, Phys. Chem. Chem. Phys. , 2017, 19(47): 31958.
- [14] Frisch M J, Trucks G W, Schlegel H B, et al. Gaussian 16, Revision B. 01. Gaussian, Inc. , Wallingford CT, 2016.
- [15] Jubert A, Massa N E, Tevez L L, et al. Vib. Spectrosc. , 2005, 37(2): 161.
- [16] Pansini F N N, de Souza F A L, Campos C T. J. Comput. Chem. , 2018, 39(20): 1561.
- [17] Strachan C J, Rades T, Gordon K C, J. Pharm. Pharmacol. , 2007, 59(2): 261.

## Theoretical Study on the Molecular Structure and Infrared Spectroscopy of Indometacin in External Electric Field

GE Hao-ran<sup>1,3</sup>, WANG Fang-yuan<sup>1,3</sup>, LI Gui-qin<sup>2</sup>, YE Song<sup>1,3</sup>, WANG Jie-jun<sup>1,3</sup>, LI Shu<sup>1,3</sup>, WANG Xin-qiang<sup>1,3\*</sup>

1. School of Electronic Engineering and Automation, Guilin University of Electronic Technology, Guilin 541004, China

2. Department of Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China

3. Guangxi Key Laboratory of Optoelectronic Information Processing, Guilin 541004, China

**Abstract** Waste drug compounds can end up in the environment as pollutants in natural drinking water and municipal wastewater if not properly treated. Hospital sewage will contain low concentrations of drugs, and when these drugs enter the environment, they will become pollutants, which will seriously pollute the natural ecosystem. Indomethacin is a widely used non-steroidal anti-inflammatory drug, but it is not easily soluble in water, and refractory degradation makes drug degradation in sewage a challenge. In order to study the changes of the molecular structure and spectrum of indomethacin under the action of the external electric field (EEF), the density functional theory (DFT) and the 6-31+G(d, p) basis set are used along the Y-axis (N15-C16). The EEF (0~0.025 a. u.) was applied and the ground state geometry of the indomethacin molecule was optimized. The total energy, bond length, infrared spectrum (IR), dipole moment and HOMO-LUMO energy gap were investigated. The results show that in the absence of EEF, the single bond between C2 and C17 in the indomethacin molecule is optimized to become a double bond between the benzene rings, which makes the electrons of C16 and C17 and the isolated electrons of N15 form a strong bond with the benzene ring. The conjugated system minimizes the energy of indomethacin and forms the most stable configuration. The total energy of the ground state decreases slowly with the increase of EEF. When  $F \geq 0.015$  a. u., it decreases significantly, and the change of dipole moment is opposite. As the EEF is enhanced, the expansion and contraction of each key length vary. The bond lengths of C3-C4, C3-N15, C5-C6, O10-C11 and N15-C16 are elongated, especially the bond lengths of O10-C11, C3-N15 and N15-C16 are drastically changed, and the easiest to break and then Indomethacin decomposition. When the EEF becomes larger, the energy gap is continuously reduced, indicating that the electrons of the indomethacin in the EEF are easily transitioned to a high energy level, and the molecules are excited to an excited state. The IR generated by the vibration of different chemical bonds in the indomethacin molecule, corresponding to different spectral shifts, is mainly related to the energy level, the energy level difference is reduced, the frequency is reduced, resulting in red shift (RS), and vice versa. Shift (BS); but the correspondence between N15-C40, C16-C18 bond length change  $\Delta R$  and frequency shift change  $\Delta f$  indicates that the spectrum shift is also related to factors such as molecular orbital configuration and dipole moment change. Stronger 4, 5, 6, and

7 absorption peaks occur RS and the vibration intensity increases, indicating that the corresponding chemical bonds become weak and cause a fracture. All these phenomena indicate that indomethacin molecules become unstable and prone to dissociation with the enhancement of EEF. Analysis of the molecular structure and IR under EEF can be used to study the degradation of indomethacin by electric field dissociation method, in order to provide theoretical guidance for the degradation of stubborn drugs in sewage.

**Keywords** Indomethacin; Drug degradation; External electric field (EEF); Molecular structure; Infrared spectrum

\* Corresponding author

(Received Jul. 18, 2019; accepted Nov. 22, 2019)

## 第 21 届全国分子光谱学学术会议暨 2020 年光谱年会 (第二轮通知)

由中国光学学会和中国化学会主办的“第 21 届全国分子光谱学学术会议”暨由中国光学会光谱专业委员会主办的“2020 年光谱年会”将于 2020 年 10 月 30—11 月 2 日在成都召开,会议由四川大学分析测试中心承办。本次大会将秉承前 20 届分子光谱学学术会议之宗旨,以期形成自由研讨的学术氛围,让光谱相关或相近的思想撞击出火花,期待颠覆性创新创造力泉涌。

### 一、会议简要日程安排

2020 年 10 月 30 日

全天注册报到

16:00—18:00 组织委员会和学术委员会会议;《光谱学与光谱分析》编委会会议

2020 年 10 月 31 日

08:30—12:00 开幕式、大会报告

14:00—18:00 大会报告

2020 年 11 月 1 日

08:30—12:00 分组邀请报告和口头报告

14:00—18:00 分组邀请报告和口头报告

2020 年 11 月 2 日

08:00—12:00 大会报告及闭幕式

### 二、学术报告

本次会议将采用邀请报告和申请口头报告相结合的形式,同时也将开设青年论坛和墙报展示。组委会对青年学者、博士和硕士研究生等设立优秀论文奖(包括优秀口头报告和墙报),届时将组织专家进行评选。

#### 2.1 邀请报告

已经确认参加会议并作大会报告的院士及国内外著名学者:

李 灿 院士 中国科学院大连化学物理研究所

陈洪渊 院士 南京大学

田中群 院士 厦门大学

孙世刚 院士 厦门大学

谭蔚泓 院士 湖南大学

张 锦 院士 北京大学

邀请报告信息将陆续更新,请大家关注会议主页浏览相关信息:

<http://www.sinospectroscopy.org.cn/meeting/index.php?mid=24>

#### 2.2 口头报告

会议将开放一定数量的口头报告,大家可以自由申请,申请方式为在会议注册系统中提交口头报告题目(在口头报告栏目),并在会议截稿日期前通过会议稿件提交系统按要求提交论文摘要,申请截止日期为 2020 年 6 月 30 日。

#### 2.3 青年论坛

对于青年学者,博士和硕士研究生可以申请青年论坛报告,申请办法和截止日期与口头报告相同,组委会将组织专家进行优秀报告评选,并颁发优秀论文证书和奖金。

(下转 2461 页)

which is insensitive to the observed zenith and can be affected by ice's uniformity at shortwave band rather than at longwave band. Results on BRDF indicate that the spectral shape of volume scattering is similar to albedo, but the attenuation rate in the longwave band of BRDF is faster than that of albedo. That is, the energy of volume scatter is more concentrated in the shortwave band. However, in the direction near the reflectivity peak, the energy is more concentrated in the longwave band than in the shortwave band. ARF results reveal that the contribution of volume scattering to surface albedo decrease with wavelength, but the role of surface reflection is on the contrary. More importantly, the order of the ARF was not the same as that of the BRDF, which suggests that the retrieval parameters for the surface albedo of different ice types are not identical even under the same observational angle.

**Keywords** Lake ice; Field observation; Bidirectional reflectance distribution function; Anisotropy reflectance factor

\* Corresponding author

(Received Jul. 8, 2019; accepted Nov. 16, 2019)

(上接 2452 页)

## 2.4 墙报展示

墙报展示作为本次会议的一种主要形式。墙报要求制作规范,内容体现研究工作的创新点。在准备墙报时注意以下几个方面:

1. 墙报尺寸:高 110 公分×宽 80 公分;
2. 墙报内容不包括中英文摘要和参考文献;
3. 墙报内容以图文为主,层次分明,主要体现研究工作的创新性,主要结果和结论;
4. 墙报右上侧写上论文编号;

拟作墙报展示的代表,在会议注册系统中提交墙报题目和编号。组委会将组织专家对青年学者、博硕士研究生墙报进行评审,并对优秀墙报颁发优秀论文证书和奖金。

### 三、会议稿件

会议截稿日期为 2020 年 6 月 30 日,请大家按照会议第一轮通知的要求继续投稿。

<http://www.sinospectroscopy.org.cn/readnews.php?nid=94098>

## 四、会议注册

### 4.1 会议注册费

2020 年 9 月 20 日以前缴纳注册费:正式代表:1600 元/人;学生代表:1000 元/人;2020 年 9 月 20 日后及现场缴纳注册费:正式代表:1800 元/人;学生代表:1200 元/人,现场缴费将邮寄发票。由于酒店房间是预留,2020 年 9 月 20 日后及现场缴纳注册费的代表将不能保证房间;陪同家属 1000 元/人(没有发票)。

会议注册费收缴方式:

银行汇款,如网银、手机银行、支付宝、微信转账、银行柜台等。

收款单位:四川大学(请注明:2020 光谱+姓名);

帐 号:5100 1870 4690 5988 8666;

开 户 行:建行成都川大支行;

汇款成功后请务必将姓名、参会编号、单位发票抬头、单位税号、汇款金额通过邮箱(atcpubs@scu.edu.cn)告知会务组,以便核实会议注册费发票信息。(如果需要开具增值税发票,请注明并提供单位名称、纳税人识别号、地址、电话、开户行及账号)

发票联系人:张亮 联系邮箱:zhang.liang@scu.edu.cn 联系方式:15902844473

### 4.2 会议注册系统

请登陆光谱网会议主页:<http://www.sinospectroscopy.org.cn/meeting/index.php?mid=24>

注册并提交您的参会信息,包括个人信息、报告题目、墙报题目、住房预定等信息。

### 4.3 会议住宿

会议酒店:

1. 世外桃源酒店

地址:四川省成都市武侯区科华北路 69 号

酒店房间价格:标间 620 元/间天;大床房 560 元/间天

(下转 2473 页)