

本期目录 | 下期目录 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

论文

系列双磷维生素B₁离子盐化合物的合成、结构及分子构象

白凤英^{1,3}, 李晓天¹, 朱广山², 邢永恒³, 曾小庆⁴, 葛茂发⁴

1. 吉林大学材料科学与工程学院,
2. 无机合成与制备化学国家重点实验室, 长春 130012;
3. 辽宁师范大学生命科学学院, 大连 116029;
4. 中国科学院化学研究所, 北京 100080

摘要:

将Ni(ClO₄)₂和NH₄PF₆分别与硫胺素焦磷酸在甲醇体系中反应, 得到了两个新的离子盐型化合物[TPP·ClO₄·H₂O](1)和[TPP·PF₆·CH₃OH](2)(TPP为硫胺素焦磷酸酯). 通过元素分析、红外光谱及X射线衍射等方法对它们进行了表征. 结构分析表明, 它们属于离子型化合物, 而且硫胺素焦磷酸与高氯酸根, 六氟磷酸根形成了大量的氢键网络结构. 结合计算结果进一步分析了化合物的活性及电子结构特征.

关键词: 硫胺素焦磷酸酯; 氢键; 晶体结构; 量子化学计算

Synthesis, Structure and Molecular Configuration of a Series of Ionic Salt Compounds of Pyrophosphate Ester of Thiamine

BAI Feng-Ying^{1,3}, LI Xiao-Tian^{1*}, ZHU Guang-Shan², XING Yong-Heng³, ZENG Xiao-Qing⁴, GE Mao-Fa⁴

1. College of Material Science and Engineering,
2. State Key Laboratory of Inorganic Synthesis and Preparative Chemistry, Jilin University, Changchun 130012, China;
3. College of Life Science, Liaoning Normal University, Dalian 116029, China;
4. Institute of Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China

Abstract:

Ionic salt compounds [TPP·ClO₄·H₂O](1) and [TPP·PF₆·CH₃OH](2)(TPP as the pyrophosphate ester of thiamine) were prepared in the methanol system under room temperature, and characterized by elemental analysis, IR spectra, and single X-ray diffraction. Structural analysis shown that they are ionic compounds and there are abundant hydrogen bondings in molecular structures. On the basis of the data of quantum chemical calculation, their potential reaction activity and electronic configuration were also discussed.

Keywords: Pyrophosphate ester of thiamin; Hydrogen bond; Crystal structure; Quantum chemical calculation

收稿日期 2009-02-25 修回日期 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

国家自然科学基金(批准号: 20771051)和辽宁省创新团队基金(批准号: 2007T093)资助.

通讯作者: 李晓天, 男, 博士, 教授, 博士生导师, 主要从事材料化学研究. E-mail: xiaotianli@jlu.edu.cn

作者简介:

参考文献:

[1]Louloudi M., Hadjiliadis N.. Coordination Chemistry Reviews [J], 1994, 135/136: 429—468

[2]Casas J. S., Castellano E. E., Couce M. D., et al.. J. Inorg. Biochem.

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF (389KB)

[HTML全文]

[\(article.html_WenJianDaXiao_KB\)](#)

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

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

硫胺素焦磷酸酯; 氢键; 晶体结构; 量子化学计算

本文作者相关文章

PubMed

[J], 2006, 100: 124—132

[3]Aoki K., Salam M. A., Munakata C., et al.. Inorg. Chim. Acta
[J], 2007, 360: 3658—3670

[4]Richardson M. F., Franklin K., Thompson D. M.. J. Am. Chem. Soc.
[J], 1975, 97: 3204—3209

[5]Casas J., Castineiras A., Couce M. D.. Polyhedron
[J], 1995, 14: 1825—1829

[6]Hadjiliadis N., Yannopoulos A., Bau R.. Inorg. Chim. Acta
[J], 1983, 69: 109—115

[7]Cramer R. E., Kirkup R. E., Carrie M. J.. J. Inorg. Chem.
[J], 1988, 27: 123—130

[8]Aoki K., Tokuno T., Takagi K.. Inorg. Chim. Acta
[J], 1993, 210: 17—25

[9]Aoki K., Hu N. H., Tokuno T., et al.. Inorg. Chim. Acta
[J], 1999, 290: 145—152

[10]Casas J. S., Castineiras A., Couce M. D., et al.. J. Organomet. Chem.
[J], 1996, 517: 165—172

[11]Casas J. S., Castellano E. E., Couce M. D., et al.. Inorg. Chem.
[J], 1995, 34: 2430—2437

[12]Archibong E., Adeyemo A., Aoki K., et al.. Inorg. Chim. Acta
[J], 1989, 156: 77—83

[13]Aoki K., Hu N. H., Yamazaki H., et al.. Inorg. Chim. Acta
[J], 1990, 175: 247—254

[14]Hu N. H.. Inorg. Chim. Acta
[J], 1991, 186: 209—215

[15]Aoki K., Yamazaki H.. J. Am. Chem. Soc.
[J], 1980, 102: 6878—6880

[16]Sheidrick G. M.. Program for Crystal Structure Refinement
[CP], Göttinger: University of Göttinger, 1997

本刊中的类似文章

文章评论

序号	时间	反馈人	邮箱	标题	内容
					men's lacoste
					women's lacoste
					lacoste shirt