

论文

4-二羟基硼苯丙氨酸(BPA)及其多羟基衍生物BPA(OH)<sub>n</sub>(n=1,2,4)的电子结构的理论研究

陈保国<sup>1,2</sup>; 张明瑜<sup>1</sup>; 赵媛媛<sup>1</sup>; 张坚<sup>1</sup>; 孙家锺<sup>1</sup>

1. 吉林大学理论化学研究所, 理论化学计算国家重点实验室, 长春 130023;
2. 内蒙古民族大学化学学院, 通辽 028043

摘要:

使用密度泛函方法对硼中子捕获疗法药物4-二羟基硼苯丙氨酸(BPA)及其多羟基衍生物BPA(OH)和BPA(OH)<sub>2</sub>, BPA(OH)<sub>4</sub>的电子结构进行了理论计算, 探讨了BPA药物作用的可能机制及其羟基衍生物具有良好水溶性的主要因素. 研究表明, BPA的HOMO主要分布在苯环上, 而BPA(OH), BPA(OH)<sub>2</sub>和BPA(OH)<sub>4</sub>的HOMO主要位于多羟基基团与BPA母体的结合部位的C, N和O原子附近, 羟基衍生物的这种HOMO轨道特性、结构中极性基团数量的增多及分子极性的增大等可能是它们具有良好水溶性的主要因素. 计算结果与实验结果一致.

关键词: 4-二羟基硼苯丙氨酸(BPA) 羟基衍生物 硼中子捕获疗法 电子结构 DFT方法

Theoretical Studies on Electronic Structures of Cascade Polyol-attached p-Dihydroxyborylphenylalanine Derivatives

CHEN Bao-Guo<sup>1,2</sup>; ZHANG Ming-Yu<sup>1\*</sup>; ZHAO Yuan-Yuan<sup>1</sup>; ZHANG Jian<sup>1</sup>; SUN Chia-Chung<sup>1</sup>

1. State Key Laboratory of Theoretical and Computational Chemistry, Institute of Theoretical Chemistry, Jilin University, Changchun 130023, China;
2. College of Chemistry, Inner Mongolia University for Nationalities, Tongliao 028043, China

Abstract:

Theoretical studies on the electronic structures of cascade polyol attached p-dihydroxyborylphenylalanine(BPA) and its derivatives BPA(OH), BPA(OH)<sub>2</sub>, BPA(OH)<sub>4</sub> were carried out by using the density functional theory(DFT) method. The calculations show that the HOMO and LUMO of BPA are located at the

benzene ring. The analyses of the frontier orbitals reveal that C, N and O atoms, which are located at the coalescent location between polyols and BPA matrix, are main active sites of BPA derivatives. Compared with BPA, it seems, that the HOMO feature is one of main factors affecting biological properties for the polyol-attached BPA derivatives used in boron neutron capture therapy(BNCT) tests.

Keywords: BPA Polyhydroxy derivative Boron neutron capture therapy Electronic structure DFT method

收稿日期 2005-06-15 修回日期 1900-01-01 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF(328KB)

[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

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 4-二羟基硼苯丙氨酸(BPA)

▶ 羟基衍生物

▶ 硼中子捕获疗法

▶ 电子结构

▶ DFT方法

本文作者相关文章

▶ 陈保国

▶ 张明瑜

▶ 赵媛媛

▶ 张坚

▶ 孙家锺

▶ 陈保国

▶ 张明瑜

▶ 赵媛媛

▶ 张坚

▶ 孙家锺

PubMed

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

通讯作者: 张明瑜

作者简介:

参考文献:

本刊中的类似文章

1. 欧阳生德, 易院平, 耿华, 帅志刚 . 扩展苯基衍生物分子器件的电子输运的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(5): 952-954
2. 李爱玉 ; 文玉华 ; 朱梓忠 ; 杨勇 . 超细钛金属线的电子性质[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(7): 1323-1326
3. 李会学, 萧泰 . 3-苯基-6-芳基-1,2,4-三唑并[3,4-b]-1,3,4-噻二唑的电子结构和光谱性质的含时密度泛函理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(4): 747-750
4. 李思殿, 任光明, 苗常青, 李栋东 . 含有平面六配位碳的第二及第三过渡系金属夹心配合物密度泛函理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(1): 129-131
5. 贾虎生, 王丽平, 韩培德, 刘旭光, 许并社 . 金属富勒烯Y@C<sub>36</sub>结构和性能的密度泛函研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(10): 1958-1961
6. 郝金库, 申勇立, 白冬花, 诸葛尚琦, 曹映玉, 杨恩翠 . 3,4',5-三甲氧基-1,2-二苯乙烯合成、晶体结构与量子化学研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(2): 324-327
7. 王一, 王永, 韩克利. 非血红素配合物[FeIV(O)(TMC)(NCMe)]<sup>2+</sup>与[FeIV(O)(TMCS)]<sup>+</sup>的几何结构、电子结构、成键性和反应活性比较[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(12): 2469-2473
8. 薛冰纯, 蔡文生, 邵学广. 有限长Y型碳纳米管结构和性质的第一性原理研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(12): 2407-2412
9. 彭谦, 牛英利, 帅志刚. 二苯多烯分子的光物理性质与共轭长度的关系[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(12): 2435-2439
10. 陈保国, 张明瑜, 赵媛媛, 孙家锤 . 硼中子捕获疗法中使用的1,2-C<sub>2</sub>B<sub>10</sub>H<sub>12</sub>异腈衍生物的结构和电子特性[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(4): 760-763
11. 蒋洁, 孟素慈, 马晶. 二聚(2,5-噻吩乙烯撑)基态和激发态的电子结构: 桥基和芳环取代的影响[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(2): 370-376

文章评论

序号	时间	反馈人	邮箱	标题	内容
1	2009-11-16	frsahfkjsdagjk	hsjkafh@sdk.com	ugg boots	Ugg Boots Sale Ugg Online Ugg Boots Online Discount Uggs Discount Ugg Ugg Shoes Sale Ugg Sale Cheap Ugg Boots Cheap Uggs ugg boots

Copyright 2008 by 高等学校化学学报