

三聚氰胺金属(II)配合物的结构、紫外-可见光谱和反应活性

钟爱国, 吴俊勇, 闫华, 金燕仙, 戴国梁, 蒋华江, 潘富友, 刘述斌

台州学院医药化工系, 浙江 临海 317000|Research Computing Center, University of North Carolina, Chapel Hill, North Carolina 27599-3420, USA

摘要:

三聚氰胺是婴幼儿“肾结石事件”的重要前体. 本文选取几个典型的二价金属离子与三聚氰胺(L)形成的三聚氰胺金属配合物 $ML_2(OH)_2$ ($M=Ca, Mg, Zn, Cu, Ni, Fe$), 使用密度泛函理论(DFT)、含时DFT和概念DFT等工具, 系统地计算和比较了 $ML_2(OH)_2$ 的结构、紫外-可见光谱和反应性质的异同. 模拟结果揭示了 $ML_2(OH)_2$ 的结构、光谱及其反应性质是一类不同于其前体L, 形成 $ML_2(OH)_2$ 配合物后, 将有较高的亲电指数和较低的化学硬度以及呈现红外吸收峰红移; 在这些典型的二价金属配合物中, 金属M离子电荷与配体O和N原子之间的电荷、以及与金属M离子和配体原子之间的二级微扰相互作用能, 配合物最低空轨道能级与其亲电反应指数、最低空轨道能级与化学硬度指数等方面, 存在着一系列定量的相关关系, 相关系数(R_2)达0.889-0.997; 前线分子轨道模拟结果表明, $ML_2(OH)_2$ 体系反应活性的差异源于金属离子对前线轨道贡献有所不同, $FeL_2(OH)_2$ 、 $CuL_2(OH)_2$ 、 $NiL_2(OH)_2$ 等过渡金属离子的配合物中, 金属离子贡献较多, 共价性成分较多. 这些结果将为进一步理解人体内三聚氰胺致结石的成因提供有益的启示.

关键词: DFT 三聚氰胺 三聚氰胺金属配合物 概念DFT 含时DFT

收稿日期 2009-02-11 修回日期 2009-04-03 网络版发布日期 2009-04-30

通讯作者: 钟爱国, 刘述斌 Email: zhongaiquo@tzc.edu.cn; shubin@email.unc.edu

本刊中的类似文章

1. 李权; 王红艳; 蒋刚; 朱正和. $PuX+(X=H, O, N, C)$ 的结构与势能函数[J]. 物理化学学报, 2001, 17(07): 622-625
2. 武海顺; 许小红; 张聪杰; 金志浩. $(Cl_2AlNH_2)_n$ 和 $(H_2AlNH_2)_n$ ($n=1\sim 5$)簇结构及其热力学性质[J]. 物理化学学报, 2001, 17(04): 324-328
3. 张敬来; 王连宾; 吴文鹏; 曹泽星. 线性簇合物 $SC_{2n}S^{2-}$ ($n=1\sim 12$)电子吸收光谱[J]. 物理化学学报, 2004, 20(12): 1428-1433
4. 耿志远; 王永成; 汪汉卿. 锆烯 X_2Ge ($X=H, CH_3, F, Cl, Br$)与乙烯环加成反应的量子化学研究[J]. 物理化学学报, 2004, 20(12): 1417-1422
5. 刘梅堂; 牟伯中. 狭缝滞留吸附性质的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006, 22(03): 355-358
6. 和芹; 周立新. 铂配合物与DNA碱基对间相互作用的理论研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(08): 846-851
7. 刘军娜; 陈志荣; 袁慎峰. 吡啶酮系偶氮类化合物可见吸收光谱的预测[J]. 物理化学学报, 2005, 21(04): 402-407
8. 任彦亮; 万坚; 刘俊军; 万洪文. 吡吩垂直激发态的理论研究方法的比较[J]. 物理化学学报, 2004, 20(09): 1089-1092
9. 李永红; 陈丽萍; 徐文媛; 洪三国. 2-溴丙酸气相热消除反应的机理[J]. 物理化学学报, 2003, 19(05): 389-392
10. 翟志才; 柏云杉; 王遵尧; 王连生. $Br_2+2HI=2HBr+I_2$ 应机理的密度泛函理论[J]. 物理化学学报, 2004, 20(04): 400-404
11. 李文佐; 肖翠平; 宫宝安; 程建波. 类锆烯 $H_2C=GeLiCl$ 与 RH ($R=F, OH, NH_2$)的插入反应[J]. 物理化学学报, 2008, 24(04): 720-724
12. 吕存琴; 凌开成; 尚贞锋; 王贵昌. 甲基、氨基和甲胺在清洁及C(N, O)改性的Mo(100)表面的吸附[J]. 物理化学学报, 2008, 24(08): 1366-1370
13. 李巍; 荣华; 吴新民; 陈中元. 苏氨酸对甲苯磺酸盐及其酯化物的微波合成、表征及量化计算[J]. 物理化学学报, 2008, 24(05): 868-872
14. 艾洪奇; 杨爱彬; 李允刚. 溶液中 Zn^{2+} 与腺嘌呤异构体间相互作用的理论研究[J]. 物理化学学报, 2008, 24(06): 1047-1052
15. 原现瑞; 刘英华; 李润岩; 陈晓霞. (s)-多沙唑嗪的核磁共振理论和实验研究[J]. 物理化学学报, 2008, 24(06): 1058-1062
16. 田真宁; 许旋. 配合物 $[M(CO)_3(PPh_2py)_2]$ ($M=Fe, Ru$)异构体的理论研究[J]. 物理化学学报, 2008, 24(08): 1482-1486
17. 唐克; 宋丽娟; 段林海; 李秀奇; 桂建舟; 孙兆林. 杂原子Y分子筛的二次合成及其吸附脱硫性能[J]. 物理化学学报, 2006, 22(09): 1116-1120

扩展功能

本文信息

[PDF\(902KB\)](#)

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

▶ [DFT](#)

▶ [三聚氰胺](#)

▶ [三聚氰胺金属配合物](#)

▶ [概念DFT](#)

▶ [含时DFT](#)

本文作者相关文章

▶ [钟爱国](#)

▶ [吴俊勇](#)

▶ [闫华](#)

▶ [金燕仙](#)

▶ [戴国梁](#)

▶ [蒋华江](#)

▶ [潘富友](#)

▶ [刘述斌](#)

18. 王连宾; 吴文鹏; 张敬来; 曹泽星. 反式和顺式HOOH的电子光谱的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(09): 1079-1084
19. 吴文娟; 赖璐; 郑康成; 李逢存. 抗癌性吲哚啉生物衍生物的定量构效关系[J]. 物理化学学报, 2005,21(01): 28-32
20. 武海顺; 许小红; 马文瑾; 贾建峰. AMT异构体互变机理论的研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(05): 408-413
21. 陈宏善; 牛建中; 张兵; 李树本. Mn-Na₂WO₄/SiO₂ 催化剂表面活性中心结构的DFT研究[J]. 物理化学学报, 2001,17(02): 111-115
22. 刘跃; 刘佳雯; 杨小震. 新型镍催化剂催化乙烯聚合的阳离子机理[J]. 物理化学学报, 2002,18(12): 1068-1070
23. 刘梅堂; 牟伯中; 刘洪来; 胡英. 修正的格子空间的密度泛函理论在狭缝中的应用[J]. 物理化学学报, 2004,20(06): 668-672
24. 庞先勇; 邢斌; 王贵昌, YOSHITADA Morikawa, JUNJI Nakamura. HCOO在Cu(110)、Ag(110)和Au(110)表面的吸附[J]. 物理化学学报, 2009,25(07): 1352-1356
25. 黄小璇; 许旋. Ir(CO)Cl_a(Ph₂Ppy)₂HgCl_b(HgCl₂)_c (a, b=1, 2, c=0, 1)的Ir-Hg相互作用和氧化还原反应性质[J]. 物理化学学报, 2009,25(07): 1362-1366
26. 梁云霄; 尚贞锋; 许秀芳; 赵学庄. C₅₉XH(X=N, B)与1,3-丁二烯Diels-Alder环加成反应的区域选择性[J]. 物理化学学报, 2008,24(10): 1811-1816
27. 刘海洋; 李立; 应晓; 王湘利; 徐志广; 廖世军; 张启光. 锰(III)5,10,15-三(五氟苯基)-Corrole配合物的DFT计算[J]. 物理化学学报, 2008,24(09): 1602-1608
28. 任云鹏; 鲁玉祥; 娄琦. CO在Pt低指数面上吸附行为的理论研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(11): 1728-1732
29. 庞先勇; 任瑞鹏; 薛丽琴; 王贵昌. Cu(100)表面HCOO对CO₂吸附的稳定作用[J]. 物理化学学报, 2007,23(07): 1109-1112
30. 李文佐; 谭海娜; 肖翠平; 宫宝安; 程建波. 不饱和类锗烯H₂C=GeLiCl的DFT研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(11): 1811-1814
31. ARSLAN Hakan; DEMIRCAN Aydin. *Tert*-butyl *N*-(2-bromocyclohex-2-enyl)-*N*-(2-furylmethyl) carbamate的结构和振动光谱[J]. 物理化学学报, 2007,23(11): 1683-1690
32. 丁冰晶; 黄世萍; 汪文川. 酸性分子筛催化乙烯二聚反应[J]. 物理化学学报, 2007,23(12): 1864-1868
33. 李勤瑜; 许旋. 配合物[Fe(CO)₃(PPh₂R)₂(HgCl₂)] (R=pym, fur, py, thi)的Fe—Hg相互作用及³¹P化学位移[J]. 物理化学学报, 2007,23(12): 1875-1880
34. 苏克和; 魏俊; 胡小玲; 岳红; 吕玲; 王育彬; 文振翼. 分子几何构型优化方法的系统性比较[J]. 物理化学学报, 2000,16(07): 643-651
35. ZGOU Hsaine; HAMIDI Mohamed; LERE-PORTE Jean-Pierre; SEREIN-SPIRAU Francoise; BOUACHRINE Mohammed.

基于噻吩和亚苯基合成的新物质的结构和电子性质

- [J]. 物理化学学报, 2008,24(01): 37-40
36. 徐国亮; 肖小红; 刘玉芳; 孙金锋; 朱正和. 外电场作用下甲基乙烯基硅酮分子结构和电子光谱[J]. 物理化学学报, 2007,23(05): 746-750
 37. 谭金芝; 肖鹤鸣; 贡雪东; 李金山. 硝酸甲酯分子间相互作用的DFT和*ab initio*比较[J]. 物理化学学报, 2002,18(04): 307-314
 38. 王永成; 耿志远; 陈宏善. 羰基氧化物环化反应动力学的计算研究[J]. 物理化学学报, 2002,18(01): 45-49
 39. 仇永清; 刘春光; 陈徽; 苏忠民; 杨国春; 王荣顺. 具有三维结构的Co(II)配合物二阶非线性光学性质的DFT研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(07): 836-839
 40. 李权; 刘晓亚; 高涛; 朱正和; 傅依备; 汪小琳; 孙颖. PuOⁿ⁺的势能函数的稳定性[J]. 物理化学学报, 2000,16(11): 987-991
 41. 刘海波; 侯占佳; 刘丽英; 徐志凌; 徐雷; 王文澄; 李富铭; 叶明新. 三聚氰胺甲醛树脂的光学性质[J]. 物理化学学报, 2000,16(06): 563-567
 42. 李文佐; 宫宝安; 程建波. 不饱和类硅烯H₂C=SiNaF的DFT研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(06): 653-656
 43. 周丹红; 王玉清; 贺宁; 杨刚. Cu(I), Ag(I)/分子筛化学吸附脱硫的n-络合机理[J]. 物理化学学报, 2006,22(05): 542-547
 44. 张远; 曹爱年; 孙岳明; 刘举正; 顾璠. NO双分子和二聚体与Cu₂作用的理论计算[J]. 物理化学学报, 2003,19(03): 193-197
 45. 宋争林; 张复实; 陈锡侨; 赵福群. 酞菁基态和激发态的计算[J]. 物理化学学报, 2003,19(02): 130-133