

吡咯喹啉醌模型化合物与氨亲核加成的理论探讨

王艳花; 邹建卫; 胡桂香; 郑柯文; 俞庆森

浙江大学化学系, 杭州 310027; 浙江大学宁波理工学院分子设计与营养工程市重点实验室, 宁波 315104; 浙江树人大学生物与环保学院, 杭州 310015

摘要:

为了揭示辅酶PQQ结构与反应性的关系,在B3LYP/D95(d, p)水平上对一系列PQQ模型化合物及其类似物与氨的亲核加成进行了理论计算.结果表明:对单羰基体系,羰基碳的亲电性对反应能垒有重要的影响;对双羰基体系,过渡态中邻位羰基氧与亲核试剂氨上的H形成的氢键对反应的活化能起着关键的作用;稠合芳香环本身对反应的能垒影响不大,但当稠合杂环的1-位为可提供氢键受体的N原子时,由于N1与氨上H原子间可形成氢键而进一步降低反应的活化能.发现过渡态中被进攻羰基与氨上N原子之间形成的夹角(OCN)与活化能有良好的线性关系.

关键词: 辅酶PQQ(吡咯喹啉醌) 密度泛函理论 亲核加成 氢键

收稿日期 2004-02-27 修回日期 2004-05-10 网络版发布日期 2004-09-15

通讯作者: 邹建卫 Email: jwzou@css.zju.edu.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(1521KB)

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

▶ 辅酶PQQ(吡咯喹啉醌)
▶ 密度泛函理论
▶ 亲核加成
▶ 氢键

本文作者相关文章

▶ 王艳花
▶ 邹建卫
▶ 胡桂香
▶ 郑柯文
▶ 俞庆森