

## 铂配合物与DNA碱基对间相互作用的理论研究

和芹; 周立新

暨南大学化学系, 广州 510632; 福州大学化学系, 福州 350002

### 摘要:

用量子化学方法研究一系列Pt(II)配合物作用于嘌呤碱基N7位点后对Watson-Crick碱基对AT、GC的影响. 计算结果显示铂配体与碱基对AT、GC的作用以静电作用为主, 同时极化作用也是影响GC碱基对的重要因素. 静电作用极大地增强了铂化嘌呤碱基与嘧啶碱基间的相互作用, 而嘌呤碱基与嘧啶碱基间作用与未铂化碱基对作用相近. Pd(II)和Ni(II)的相关研究得到类似的结果. 碱基对间氢键作用“二阶微扰能”分析结果与氢键强弱变化一致.

关键词: Pt(II)配合物 Pd(II)配合物 Ni(II)配合物 碱基对 氢键 HF方法 密度泛函理论(DFT)

收稿日期 2004-12-01 修回日期 2005-01-24 网络版发布日期 2005-08-15

通讯作者: 周立新 Email: tlzhou@jnu.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(770KB)

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

▶ Pt(II)配合物

▶ Pd(II)配合物

▶ Ni(II)配合物

▶ 碱基对

▶ 氢键

▶ HF方法

▶ 密度泛函理论(DFT)

本文作者相关文章

▶ 和芹

▶ 周立新