

溶液中Zn²⁺与腺嘌呤异构体间相互作用的理论研究

艾洪奇; 杨爱彬; 李允刚

济南大学化学与化工学院, 济南 250022

摘要:

用B3LYP/6-311++G**方法和PCM及Onsager模型研究了Zn²⁺与腺嘌呤异构体在溶液中的11种较为稳定配合物. 结果显示, 这些配合物在溶液中的稳定性顺序与气相中明显不同, 其结合位点表现出如下的规律性, 在亚氨基类配合物中, Zn²⁺与腺嘌呤的N7、N6位结合比与N1、N6位结合形成的配合物更稳定; 氨基类配合物中, Zn²⁺以“双齿”形式与腺嘌呤异构体上的氮结合时的优先顺序为(N3和N9)>(N7和N6)>(N1和N6). 研究表明, 不论气相还是溶液相, 孤立的腺嘌呤分子内的质子转移较困难, 结合Zn²⁺后也不能明显降低关键步骤的活化能; 结合Cu²⁺却能明显地降低气相中关键步骤的活化能, 但溶剂效应却不利于Cu²⁺引发腺嘌呤分子内的质子转移.

关键词: 腺嘌呤-Zn²⁺异构体 稳定性 DFT 质子转移 PCM模型 Onsager模型

收稿日期 2007-12-03 修回日期 2008-01-28 网络版发布日期 2008-04-09

通讯作者: 艾洪奇 Email: chm_aihq@ujn.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(1240KB)

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

▶ 腺嘌呤-Zn²⁺异构体

▶ 稳定性

▶ DFT

▶ 质子转移

▶ PCM模型

▶ Onsager模型

本文作者相关文章

▶ 艾洪奇

▶ 杨爱彬

▶ 李允刚