

2'-脱氧胞苷-5'-磷酸羟基加合物的分子结构与电子结构

侯若冰; 李伟伟; 义祥辉

广西师范大学化学化工学院, 广西 桂林 541004; 桂林师范高等专科学校, 广西 桂林 541004

摘要:

使用密度泛函理论(DFT)的B3LYP/DZP++研究了羟基自由基与2'-脱氧胞苷-5'-磷酸(dCMP)的胞嘧啶环加成产物的分子结构与电子结构. 结果表明, dCMP胞嘧啶环中各C原子上的单羟基加合物的相对稳定性顺序为 $C5 > C6 > C4 \geq C2$. 加合物的稳定性、自旋密度、静电势以及dCMP的电子密度、静电势、电荷分布分析表明, dCMP遭遇多个羟基自由基攻击时, 第一个羟基自由基加在dCMP的C5上, 而C6则成为第二个羟基自由基的进攻目标. 反应中一旦形成了C2-位单羟基加合物, 则极有可能在DNA复制过程中引起致命的基因突变, 也可能诱发DNA-DNA以及DNA-蛋白质的链间交联, 引起更复杂的损伤. 相反, C5、C6-位上单羟基加合物的形成对DNA的稳定性不构成直接威胁.

关键词: 2'-脱氧胞苷-5'-磷酸 羟基自由基加合物 加成反应 基因突变

收稿日期 2008-07-26 修回日期 2008-11-04 网络版发布日期 2008-12-16

通讯作者: 侯若冰 Email: rbhou@163.com

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(2222KB)

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

▶ 2'-脱氧胞苷-5'-磷酸

▶ 羟基自由基加合物

▶ 加成反应

▶ 基因突变

本文作者相关文章

▶ 侯若冰

▶ 李伟伟

▶ 义祥辉