

研究论文

脯氨酸的构象及性质

王朝杰; 李永; 杨新宇; 林丽

(温州医学院药学院, 浙江 温州 325035)

摘要:

用X3LYP法在6-311++G(d, p)和6-311++G(3df, 3pd)基组水平上对脯氨酸15种构象的几何结构、相对能量、电子结构、红外光谱、偶极矩、极化率等性质进行了研究, 并与PBE1PBE/6-311++G(d, p)的结果和文献相比较, 从而得到: (1) 的脯氨酸的15种构象中能量最低的有4种, 不同构象中存在着强弱不同的5种氢键, 其中以N...H—O氢键最强, 并存在特殊的C—H...O=C氢键. 两种方法计算的几何结构数据相近, 均与实验值吻合; (2) 在构象相对能差计算方面, X3LYP具有明显的优势, 用中等基组就可以得到与高水平从头算法和大基组相同的结果, 而PBE1PBE法计算的相对能值则相差较大; (3) 脯氨酸不同构象中偶极矩最大和极化率最小的是最稳定的构象1和2, 两种方法计算的结果一致.

关键词: 脯氨酸 X3LYP 构象 偶极矩 转动系数

收稿日期 2006-07-12 修回日期 2006-09-07 网络版发布日期 2007-03-07

通讯作者: 王朝杰 Email: chjwang@xmu.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 吴新明; 刘义; 屈松生; 张大顺; 刘平; 王春艳. 稀土脯氨酸配合物 $[\text{RE}_2(\text{L-Pro})_6(\text{H}_2\text{O})_4](\text{ClO}_4)_6$ 的标准生成焓测定 [J]. 物理化学学报, 2001, 17(10): 956-960

扩展功能

本文信息

PDF(1042KB)

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

▶ 脯氨酸
▶ X3LYP
▶ 构象
▶ 偶极矩
▶ 转动系数

本文作者相关文章

▶ 王朝杰
▶ 李永
▶ 杨新宇
▶ 林丽