

本期目录 | 下期目录 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

论文

水溶液中有机化合物 pK_a 值的量子化学计算研究

丁晓琴, 孙杨, 丁俊杰, 陈冀胜

北京药物化学研究所, 北京 102205

摘要:

采用密度泛函量子化学计算方法, 在B3LYP/6-31+G(d,p)水平上采用极化连续模型(PCM), 对醇、酚、羧酸、芳香胺和脂肪胺等多类化合物在水溶液中的 pK_a 值进行了计算. 与实验值比较, 多数化合物绝对误差小于1个 pK_a 单位, pK_a 计算值与实验值相关系数均大于0.94. 可见, 采用量子化学计算的方法可准确预测化合物的 pK_a 值, 并可以扩展应用到药物结构与性能关系、ADMET虚拟筛选、有机合成路线设计和优化等研究领域.

关键词: pK_a 值; 密度泛函; 连续极化模型

Quantum Chemical Calculations on pK_a Values of Organic Compounds in Aqueous Solution

DING Xiao-Qin*, SUN Yang, DING Jun-Jie, CHEN Ji-Sheng

Beijing Institute of Pharmaceutical Chemistry, Beijing 102205, China

Abstract:

Quantum chemical calculations of the pK_a values were performed using DFT method with 6-31+g(d,p) basis set for more than 200 compounds of alcohol, phenol, carboxylic acid, aliphatic amines, aromatic amine and nitrogen heterocyclics etc. The solution-phase calculations use polarized continuum solution (PCM) model with default set in water. The residue of most compounds is less than 1 pK_a unit. Correlation coefficient between experiment results and forecast results is better than 0.94. The results can help us to research reaction activity difference between different molecules or different groups in one molecule. Quantum Chemical calculations of the pK_a values will be instructive to computer aided molecular design and organic synthetic route design and optimization.

Keywords: pK_a value; Density functional theory, Polarized continuum solution(PCM)

收稿日期 2009-07-28 修回日期 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

通讯作者: 丁晓琴, 女, 博士, 教授, 主要从事药物分子设计、合成及量子化学计算研究. E-mail: dingxiaiqin2008@126.com

作者简介:

参考文献:

- [1]Liu Y. H., Wang Y.. J. Progress in Chemistry[J], 2008, 20(9): 1241—1250
- [2]Hong W., Johan U.. Expert Opin. Drug Metab. Toxicol.[J], 2006, 2(1): 139—155
- [3]Klicic J. J., Friesner R. A.. J. Phys. Chem.[J], 2002, 106: 1327—1335
- [4]DaSilva C. O., Dasilva E. C.. J. Phys. Chem. A.[J], 1999, 102: 11194—11199
- [5]Cossi M., Barone V., Cammi R.. Chem. Phys. Lett.[J], 1996, 255: 327—335
- [6]Cances M. T., Mennucci B.. J. Phys. Chem.[J], 1997, 107: 3032—3041
- [7]Barone V., Cossi M.. J. Phys. Chem.[J], 1997, 107: 3210—3221
- [8]Cossi M., Barone V., Mennucci B.. Chem. Phys. Lett.[J], 1998, 286: 253—260
- [9]Toth A. M., Liptak M. D., Phillips D. L.. J.Chem. Phys.[J], 2001, 114(10): 4595—4606
- [10]Liptak M. D., Shields G. C.. J. Quan. Chem.[J], 2001, 85: 727—741
- [11]Matthew D. L., George C.. J. Am. Chem. Soc.[J], 2001, 123: 7314—7319
- [12]Perrin D. D.. Dissociation Constants of Organic Bases in Aqueous Solution[M], London:

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF(443KB)

[HTML全文]

[\({article.html_WenJianDaXiao}_KB\)](#)

参考文献[PDF]

参考文献

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

[pKa值; 密度泛函; 连续极化模型](#)

本文作者相关文章

PubMed

Butterworths, 1972

[13]Serjeant E. P., Dempsey B.. Ionization Constants of Organic Acids in Aqueous Solution[M], Oxford: Pergamon, 1979

[14]Albert A. R.. Physical Methods in Heterocyclic Chemistry[M], New York, Academic Press: 1963

[15]Sober H. A.. CRC Handbook of Biochemistry[M], Cleveland, Ohio, CRC Press, 1968

[16]Perrin D. D., Dempsey B.. pKa Prediction for Organic Acids and Bases[M], London: Chapman & Hall, 1981

[17]Albert A. R., Serjeant E. P.. The Determination of Ionization Constants[M], London: Chapman & Hall, 1984

[18]Budavari S.. The Merck Index[M], New York: Merck, 1996

[19]Lu H. T., Chen X., Zhan C. G.. Journal of Central China Normal University[J], 2004, 38: 205—206

本刊中的类似文章

文章评论

反馈人	<input type="text"/>	邮箱地址	<input type="text"/>
反馈标题	<input type="text"/>	验证码	<input type="text"/> 7142

Copyright 2008 by 高等学校化学学报