

FULL PAPERS

新型手性锌卟啉对氨基酸酯的分子识别

王树军, 阮文娟*, 赵小菁, 罗代兵, 朱志昂

南开大学化学系, 天津 30071

收稿日期 2003-10-29 修回日期 2004-9-27 网络版发布日期 接受日期

摘要 合成并表征了一种新型用Boc保护的L-酪氨酸修饰的手性锌卟啉Zn(L-BocTyr)TAPP(主体). 运用紫外可见光谱滴定法, 研究了主体化合物与四对氨基酸酯对映体的识别反应.

主体与各客体缔合常数均为 $K_D > K_L$, 且按 $K(\text{PheOMe}) > K(\text{LeuOMe}) > K(\text{ValOMe}) > K(\text{AlaOMe})$ 的顺序依次减少.

主体化合物对氨基酸酯的识别作用是由主-客体之间手性匹配产生的.

识别体系的焓熵补偿关系揭示出该识别体系是焓驱动的过程,

在识别过程中客体氨基酸酯分子构象自由度损失较大. 通过圆二色光谱的研究, 确定在进行识别反应时,

D型氨基酸酯比L型氨基酸酯更易与主体反应, 形成的化合物更趋于稳定.

我们认为圆二色产生的机理是由主体侧链中羰基的电子过渡态与卟啉平面的电子过渡态之间相互耦合所致.

通过量子化学计算, 进一步揭示识别反应的本质特征. 在理论计算中, 首先运用模拟退火的方法搜索了主体-客体体系的最低能量构象, 并在此最低能量构象的基础上进行Gaussian 98的理论计算.

通过所得理论计算结果证实, D型氨基酸酯与主体所形成的配合物更稳定. 理论计算较好地解释了实验事实.

关键词 [手性锌卟啉](#), [分子识别](#), [氨基酸酯](#), [分子动力学](#), [量子化学计算](#)

分类号

Molecular Recognition of Chiral Zinc Porphyrin with Amino Acid Esters

WANG Shu-Jun, RUAN Wen-Juan*, ZHAO Xiao-Jing, LUO Dai-Bing, ZHU Zhi-Ang

Department of Chemistry, NanKai University, Tianjin 300071, China

Abstract One kind of novel chiral porphyrin and its zinc complex were synthesized and characterized. The molecular recognition of chiral zinc porphyrin towards amino acid esters in CHCl_3 was investigated by UV-vis spectral titration method. The associative constants of the molecular recognition reactions were all $K_D > K_L$ and followed the order of $K(\text{PheOMe}) > K(\text{LeuOMe}) > K(\text{ValOMe}) > K(\text{AlaOMe})$ in host (Zn(L-BocTyr)TAPP). Circular dichroism spectra were used to explain chiral molecular recognition. The minimal energy conformation of host-guest molecular system was sought by molecular dynamics method. The molecular recognition process of this host-guest system was calculated by quantum chemistry and the results were explained by the experiments.

Key words [chiral zinc porphyrin](#) [molecular recognition](#) [amino acid ester](#) [molecular dynamics](#) [quantum chemical calculation](#)

DOI:

通讯作者 阮文娟 wjruan@nankai.edu.cn

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)▶ [PDF\(0KB\)](#)▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)▶ [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](#)▶ [复制索引](#)▶ [Email Alert](#)▶ [文章反馈](#)▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“手性锌卟啉, 分子识别, 氨基酸酯, 分子动力学, 量子化学计算”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [王树军](#)
- [阮文娟](#)
- [赵小菁](#)
- [罗代兵](#)
- [朱志昂](#)