

研究论文

3,5-二甲基-亚硝基哌嗪代谢物对DNA烷化作用的理论研究

刘婷婷 赵丽娇* 钟儒刚

(北京工业大学生命科学与生物工程学院 北京 100022)

收稿日期 2008-3-13 修回日期 2008-9-26 网络版发布日期 2009-6-18 接受日期 2008-12-29

摘要

用从头计算法在MP2/6-311+G(d,p)水平上对3,5-二甲基-亚硝基哌嗪(DMNP)及其类似物经代谢生成DNA烷化剂的机理进行了研究. 探讨了N'原子上取代基的变化对DMNP代谢物生成 α -位和 γ -位两个烷化中心的影响, 解释了两个烷化中心的生成活性与化合物的致癌性之间的关系. 结果表明, α -位和 γ -位代谢物越容易生成活泼亲电中间体, 其母体化合物的致癌活性越高. 但如果有一个烷化中心丧失活性, 就会明显减弱化合物的致癌活性. 因此, DMNP类化合物的致癌性取决于其 α -位和 γ -位的协同烷化作用, 在评价DMNP的致癌强度时需同时考虑两个烷化中心的烷化能力以及二者之间的关系.

关键词

[N-亚硝基哌嗪](#) [致癌机理](#) [烷化活性](#) [从头计算](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

赵丽娇 zhaolijiao@bjut.edu.cn

作者个人主页:

刘婷婷 赵丽娇* 钟儒刚

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF](#) (359KB)

▶ [\[HTML全文\]](#) (0KB)

▶ [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](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含 “](#)

[N-亚硝基哌嗪” 的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [钟儒刚,刘婷婷,赵丽娇](#)