

化学与化工

β -环糊精与白藜芦醇包合作用的理论研究

周美娟¹, 田春华¹, 王素娜¹, 陈效华², 刘继锋¹, 张翀^{1*}

1. 聊城大学化学化工学院, 山东 聊城 252059; 2. 重庆大学化学化工学院, 重庆 400030

摘要:

利用ONIOM (B3LYP / 6-31G*:PM3)理论方法模拟了 β -环糊精包含反式白藜芦醇 (trans-Resveratrol)的过程,首先分别以 β -环糊精和反式白藜芦醇为单体,然后通过穿越和旋转两个包含过程探讨了反式白藜芦醇从 β -环糊精大小口径穿越的稳定程度,反式白藜芦醇和 β -环糊精形成包合物的驱动力,促进包合物稳定性的影响因素,以及在气态环境中 β -环糊精与反式白藜芦醇形成包合物的驱动过程的类型。研究表明: β -环糊精可以包含反式白藜芦醇且反式白藜芦醇容易从 β -环糊精的小口径进入形成稳定的包合物,电荷转移和偶极-偶极之间的相互作用是形成包合物的主要驱动力,氢键促进了包合物的稳定性,而且在298-15K和1atm的气态环境条件下,形成包合物的过程是焓驱动过程。

关键词: β -环糊精 反式白藜芦醇 包合物

Theoretical study of the inclusion interaction of β -cyclodextrin with trans-Resveratrol

ZHOU Mei-juan¹, TIAN Chun-hua¹, WANG Su-na¹, CHEN Xiao-hua², LIU Ji-feng¹, ZHANG Chong^{1*}

1. College of Chemistry and Chemical Engineering, Liaocheng University, Liaocheng 252059, China;
2. School of Chemistry and Chemical Engineering, Chongqing University, Chongqing 400030, China

Abstract:

The inclusion process of β -cyclodextrin (β -CD) with trans-Resveratrol was studied by the ONIOM (B3LYP / 6-31G*:PM3) method. The passing process and cycling process were simulated using β -cyclodextrin (β -CD) with trans-Resveratrol as monomers respectively. The two processes probed the stability of trans-Resveratrol entering into the cavity of β -cyclodextrin from the narrow side (the primary hydroxyl group side) compared with its wide side (the secondary hydroxyl group side), the possible driving forces for the inclusion compounds, the factors influencing stability of the inclusion compounds and the driven type of forming inclusion compounds in the gas phase. The calculated data indicated that the trans Resveratrol could easily tend to enter into the cavity of β -cyclodextrin from the narrow side, the possible driving forces for the inclusion compounds were the charge transfer and dipole-dipole interactions, hydrogen bonds played an important role in the stability of the inclusion compounds, and the formation of natural β -CD inclusion compounds was an enthalpy-driven process with temperature of 298-15 K and pressure of 1 atm in the gas phase.

Keywords: β -cyclodextrin trans Resveratrol inclusion compound

收稿日期 2011-05-30 修回日期 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

国家自然科学基金资助项目(21003162; 20108025); 教育厅科研发展计划资助项目(J09LB15); 山东省“泰山学者”建设工程专项经费资助项目

通讯作者: 张翀(1970-), 男, 山东济宁人, 副教授, 硕士生导师, 博士, 主要研究方向为环糊精的化学修饰. E-mail: zhangchong@lcu.edu.cn

作者简介: 周美娟(1985-), 女, 山东高唐人, 硕士研究生, 主要研究方向为环糊精的化学修饰. E-mail: zmj1985110@163.com

作者Email:

PDF Preview

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF(1933KB)

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

β -环糊精

反式白藜芦醇

包合物

本文作者相关文章

PubMed

本刊中的类似文章

1. 黄伟¹,王书文^{2*},杨筱平³,贾建芳³.基于图像分解的敦煌壁画图像修复方法[J]. 山东大学学报(工学版), 2010,40(2): 24-27
 2. 赵静,刘晓磊.羧甲基- β -环糊精插层水滑石膜的制备及其对外消旋色氨酸选择性吸附的研究[J]. 山东大学学报(工学版), 2012,42(4): 120-125
-

Copyright by 山东大学学报(工学版)