

新闻中心

教学动态

学部新闻

部务通知

学术科研通知

学生事务通知

学部文件

科研进展

附属单位 Attached unit

化工学院(石油化工学院)

化学学院

环境学院

生命科学与技术学院

化工机械学院

制药科学与技术学院

精细化工国家重点实验室

化学分析测试中心

内容搜索 Search

在这里搜索...

站内搜索

当前位置: 学部首页 > 新闻中心 > 科研进展 >

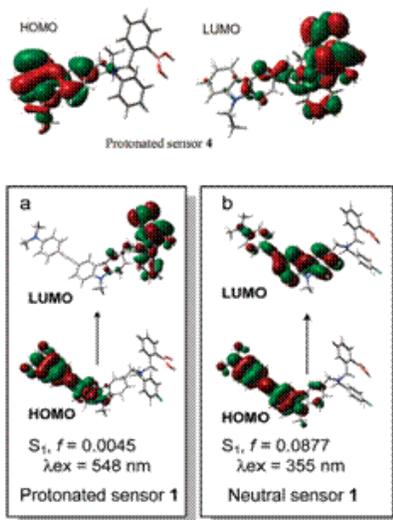
量子化学计算指导下的荧光探针分子设计

时间: 2009-11-06 14:28 来源: 精细化工国家重点实验室 作者: 管理员 点击: 次

量子化学计算指导下的荧光探针分子设计

(*J. Am. Chem. Soc.* 2009, 131, 17452)

最近, 赵建章教授研究组发现了一类新的荧光传感机理(即d-PeT机理, 荧光基团作为电子接受体的光诱导电子转移, PeT), 并用理论化学计算(DFT/TDDFT)对该类硼酸荧光探针的机理进行了解释(*J. Org. Chem.* 2009, 74, 1333-1336)。在此基础上, 设计了一系列的新型硼酸荧光分子探针, 首先用DFT/TDDFT计算对分子的荧光性质进行了预测, 然后再对探针进行合成、性质测试, 实验结果印证了理论化学计算的结果。研究结果以全文形式发表(*J. Am. Chem. Soc.* 2009, 131, 17452-17463)。这是有关在理论计算指导下的荧光分子探针设计的首次报道。如果该项研究成果的理念能够运用到其他荧光探针分子的设计中, 可以在合成探针前, 对所设计探针的荧光性质作出初步预测, 将使探针研究的盲目性减少, 从而推动荧光分子探针的研究。



(新型硼酸荧光分子探针的电子结构)



上一篇: 二氧化碳参与配位聚合反应机理

下一篇: 无机荧光染料分子体系的设计