

## 骨显像放射性药物锝-双膦酸盐配合物 $^{99m}\text{Tc}$ -MDP的结构

### Structural Investigation of Technetium-Diphosphonate Complex $^{99m}\text{Tc}$ -MDP

摘要点击 243 全文点击 110 投稿时间: 2011-1-11 采用时间: 2011-3-23

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)

doi: 10.1088/1674-0068/24/03/295-304

中文关键词 [放射性药物](#)  [\$^{99m}\text{Tc}\$ -MDP](#) [结构预测](#) [密度泛函理论](#) [基组效应](#)

英文关键词 [Radiopharmaceutical](#)  [\$^{99m}\text{Tc}\$ -methylenediphosphonate](#) [Structural prediction](#) [Density functional theory](#) [Basis set effect](#)

基金项目

作者	单位	E-mail
邱玲*	<a href="#">江苏省原子医学研究所, 卫生部核医学重点实验室, 江苏省分子核医学重点实验室, 无锡214063</a>	qjulingwx@gmail.com
林建国	<a href="#">江苏省原子医学研究所, 卫生部核医学重点实验室, 江苏省分子核医学重点实验室, 无锡214063</a>	
居学海	<a href="#">南京理工大学化工学院, 分子与材料计算研究所, 南京210094</a>	
贡雪东	<a href="#">南京理工大学化工学院, 分子与材料计算研究所, 南京210094</a>	
罗世能	<a href="#">江苏省原子医学研究所, 卫生部核医学重点实验室, 江苏省分子核医学重点实验室, 无锡214063</a>	

中文摘要

运用密度泛函理论方法对锝标记双膦酸盐配合物 $^{99m}\text{Tc}$ -MDP进行了结构预测和计算, 其中MDP代表亚甲基双膦酸. 根据几何异构、构象异构、电荷异构和自旋态异构等特性预测该化合物共有14种异构体. 基于B3LYP/LANL2DZ水平优化的分子结构和计算的总能量, 确定了两种稳定异构体, 并与实验结构进行了比较. 运用B3LYP/6-31G\*(LANL2DZ用于Tc, cc-pVDZ-pp用于Tc)和B3LYP/DGDZVP方法对化合物的稳定结构进行了计算. 理论计算值与实验值吻合较好, 而基

英文摘要

Density functional theory method has been employed to investigate the structures of the prototypical technetium-labeled diphosphonate complex  $^{99m}\text{Tc}$ -MDP, where MDP represents methylenediphosphonic acid. A total of 14 trial structures were generated by allowing for the geometric, conformational, charge, and spin isomerism. Based on the optimized structures and calculated energies at the B3LYP/LANL2DZ level, two stable isomers were determined for the title complex. And they were further studied systematically in comparison with the experimental structure. The basis sets 6-31G\*(LANL2DZ for Tc), 6-31G $\times$ (cc-pVDZ-pp for Tc), and DGDZVP have also been employed in combination with the B3LYP functional to study the basis set effect on the geometries of isomers. The optimized structures agree well with the available experimental data, and the bond lengths are more sensitive to the basis set than the bond angles. The charge distributions were studied by the Mulliken population analysis and natural bond orbital analysis. The results reflect a significant ligand-to-metal electron donation.

Copyright©2007 IOPP

承办: 中国科学技术大学 协办: 中国科学院大连化学物理研究所  
主管: 中国科学技术协会 主办: 中国物理学会 国际代理发行: 英国物理学会

编辑部地址: 安徽省合肥市金寨路96号 中国科学技术大学东区外语楼二楼  
联系电话: 0551-3601122 Email: [cjcp@ustc.edu.cn](mailto:cjcp@ustc.edu.cn)

本系统由北京勤云科技发展有限公司设计