

化学

对15种黄酮类化合物清除自由基活性的理论评价

陈秀敏, 李西平

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 用AM1半经验和密度泛函计算相结合的量子化学方法, 计算了15种黄酮类化合物的解离焓(O—H BDE)和电离势(IP), 以此为理论指标评价了这些化合物清除自由基的活性, 并讨论了部分化合物抗氧化活性的构效关系. 计算得到在非极性溶剂中3, 7, 8号化合物清除自由基活性最高, 活性最低的是11, 15号化合物; 在极性溶剂中3, 4, 5号化合物清除自由基活性最高; 可以得出, 3号化合物(3,7,3',4'-四羟基黄酮)无论在极性和非极性溶剂中均具有较强的清除自由基活性, 提示其可能作为抗氧化、抗肿瘤、抗菌和抗病毒等药物的有效成分.

关键词 [黄酮类化合物; 清除自由基活性; 量子化学方法; 键解离焓; 电离势\(IP\)](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

作者个人主页: [陈秀敏; 李西平](#)

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDE\(391KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“黄酮类化合物; 清除自由基活性; 量子化学方法; 键解离焓; 电离势\(IP\)”的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [陈秀敏](#)

· [李西平](#)