

研究简报

$[^{99}\text{Tcm}(\text{NO})\text{Cl}(\text{PL})_2]^+$ 类配合物的定量构效关系

张华北; 李波; 戴梅

北京师范大学化学系, 北京 100875

摘要:

用半经验量子化学方法中的ZINDO/1对15种 $[^{99}\text{Tcm}(\text{NO})\text{Cl}(\text{PL})_2]^+$ 类配合物的结构进行了优化, 得到各种物理化学参数和电性参数, 并将这些参数对心肌初始摄取值进行多元线性回归分析, 得到了4个方程. 利用所得方程, 提出了该类配合物的心肌摄取机理主要为氧化还原反应机理.

关键词: ZINDO/1 心肌摄取 作用机理 氧化还原 定量构效关系 (QSAR)

收稿日期 2002-09-02 修回日期 2002-11-05 网络版发布日期 2003-05-15

通讯作者: 张华北 Email: hbzh@public3.bta.net.cn

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

[PDF\(1431KB\)](#)

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

▶ [ZINDO/1](#)

▶ [心肌摄取](#)

▶ [作用机理](#)

▶ [氧化还原](#)

▶ [定量构效关系 \(QSAR\)](#)

本文作者相关文章

▶ [张华北](#)

▶ [李波](#)

▶ [戴梅](#)