

研究论文

化学位移估算研究ATP构象随溶液pH值的变化

姜凌;毛希安

中国科学院武汉物理与数学研究所, 波谱与原子分子物理国家重点实验室, 武汉 430071

摘要:

利用Johnson和Bovey的理论和计算方法计算了不同扭曲角 $\chi(O4'-C1'-N9-C4)$ 的ATP(5'-三磷酸腺苷)分子中糖环质子H1'和H2'由于环流效应引起的化学位移. H1'的化学位移与扭曲角 χ 有较强的依赖关系, 反映了ATP在溶液中细微的构象变化. 将计算结果与实验结果比较, 证明在本文讨论的pH值范围(1~10)内, Mg²⁺加入后, ATP的扭曲角 χ 在230~360°范围内变化. 随溶液的pH值减小, ATP分子的构象由trans构象通过-gauche构象转变为cis构象. 从而证明在酸性条件下, ATP倾向于以cis构象存在, 而在碱性条件下trans构象更为稳定, 从另一方面支持了在酸性条件下N1参与配位而在碱性条件下N7参与配位的结论. 在讨论中也考虑了由pH变化所引起的环流强度的变化.

关键词: 化学位移 环流 ATP(5'-三磷酸腺苷) [ATP-Mg²⁺]复合物 pH

收稿日期 2002-01-07 修回日期 2002-04-01 网络版发布日期 2002-09-15

通讯作者: 毛希安 Email: xamao@email.unc.edu

本刊中的类似文章

1. 陈月华;郭贤荣;杜希林;郭国霖.CPCWS中水质子的核磁共振自旋晶格弛豫时间和化学位移[J]. 物理化学学报, 2002,18(08): 710-715
2. 邓东顺;李浩然;刘迪霞;韩世钧.DMF-甲醇体系粘度与核磁共振化学位移的同时关联[J]. 物理化学学报, 2002,18(07): 657-660
3. 蓝蓉;李浩然;韩世钧.基于LFHB理论模型关联和预测醇+惰性溶剂的¹H NMR化学位移[J]. 物理化学学报, 2005,21(11): 1295-1298
4. 崔小英, 贾建峰, 杨斌盛, 武海顺.(BCO)₁₂与(CH)₁₂稳定性的环张力分析[J]. 物理化学学报, 2009,25(12): 2501-2506
5. 李睿华;蒋展鹏;杨宏伟;管运涛.离子对水的¹⁷O-NMR化学位移和水结构的影响[J]. 物理化学学报, 2004,20(01): 98-102
6. 张彩云;武海顺.硼氢及客体二十面体簇合物的结构和稳定性[J]. 物理化学学报, 2004,20(02): 118-122
7. 张彩云;崔丽亚;武海顺.内含式复合物X@(HAINH)₁₂ (X=Be, Mg, Ca, Zn, Al+, Ga+)的结构和稳定性[J]. 物理化学学报, 2008,24(03): 405-410
8. 张荣;谭载友;郑敦胜;罗三来;李浩然.特殊缔合体系TFE水溶液分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2008,24(03): 428-432
9. 李志伟;赵存元;陈六平.As₅⁻、[As₅M]⁻、[As₅MAAs₅]²⁻ (M=Ti, Zr, Hf)的结构和芳香性[J]. 物理化学学报, 2008,24(05): 755-759
10. 阎波 赵林 王文华 谭欣.CuCl₂和CuSO₄的核磁共振系数、粘度系数及其与水分子结构的关系[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 684-688
11. 毛诗珍;杜有如.表面活性剂在水溶液中性质的质子核磁共振研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(07): 675-680
12. 许波;李浩然;王从敏;韩世钧.基于SAFT理论关联醇与DMF体系的¹H NMR[J]. 物理化学学报, 2003,19(11): 1059-1063
13. 叶学棋;王德民;杨清传;刘桂兰;章宏凯.钒、铬、锰磷桥络合物中³¹P NMR化学位移的研究[J]. 物理化学学报, 1996,12(12): 1061-1066
14. 王维 邵世群 周慧 滕启文.环双(对-萘基-对草快)的分子识别与谱学性质[J]. 物理化学学报, 2008,24(09): 1631-1636
15. 齐世飞;王笑楠;杨忠志.应用从头计算和ABEEM方法研究一种特殊的亚胺加成物[J]. 物理化学学报, 2007,23(11): 1714-1718
16. 张晓清;贾建峰;武海顺;裴晓琴.羰基硼化合物(BCO)_n (n=1~12)的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(06): 684-690
17. 朱永法.俄歇化学位移及其在表面化学上的应用[J]. 物理化学学报, 1993,9(02): 211-217
18. 张建军;张海峰;王印堂.丙酮肟与某些芳烃相互作用的¹H核磁共振研究[J]. 物理化学学报, 1993,9(01): 125-

扩展功能

本文信息

PDF(1777KB)

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

▶ 化学位移

▶ 环流

▶ ATP(5'-三磷酸腺苷)

▶ [ATP-Mg²⁺]复合物

▶ pH

本文作者相关文章

▶ 姜凌

▶ 毛希安

