

研究论文

AT1受体拮抗剂 V8、V12 和 BZ18 结构的量子化学研究

张会婷<sup>1, 2</sup>; 王琳<sup>1, 2</sup>; 危佳<sup>1, 2</sup>; 何宏庆<sup>1</sup>, 杨明晖<sup>1</sup>

1. 波谱与原子分子物理国家重点实验室(中国科学院武汉物理与数学研究所), 湖北武汉 430071;  
2. 中国科学院研究生院, 北京 100049

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 基于 Mavromoustakos 等人的分子动力学和蒙特卡罗方法结果, 本文利用量子化学计算的方法研究了 SARTANS (沙坦) 类的 3 种 AT1 受体拮抗剂 (V8、V12 和 BZ18)。在 B3LYP/6-31G(d) 方法下计算得到了 3 种药物分子的平衡几何结构, 并且采用 B3LYP-GIAO/6-311G(d,p) 方法计算了这些药物分子中的质子化学位移。通过研究结果可以看出, 本文采用量子化学方法计算得到的 3 种分子的结构与 Mavromoustakos 等人通过分子动力学和蒙特卡罗方法得到的结果比较接近, 计算结果与核磁共振实验的 ROE 数据和 <sup>1</sup>H 谱相比吻合得较好, 说明所获得的结构较为合理。另外通过对所获得分子结构进行叠合分析发现, 同属 SARTANS 类的 3 种分子在联苯咪唑环区域具有很大的相似性。

**关键词** [量子化学](#); [化学位移](#); [密度泛函](#); [AT1受体拮抗剂](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

张会婷 [zhanght@wipm.ac.cn](mailto:zhanght@wipm.ac.cn)

作者个人主页: [张会婷<sup>1, 2</sup>](#); [王琳<sup>1, 2</sup>](#); [危佳<sup>1, 2</sup>](#); [何宏庆<sup>1</sup>](#); [杨明晖<sup>1</sup>](#)

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(492KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“量子化学; 化学位移; 密度泛函; AT1受体拮抗剂”的相关文章](#)

▶ [本文作者相关文章](#)

· [张会婷<sup>1, 2</sup>](#); [王琳<sup>1, 2</sup>](#); [危佳<sup>1, 2</sup>](#); [何宏庆<sup>1</sup>](#), [杨明晖<sup>1</sup>](#)