

生物物理化学

鸟嘌呤四链体中Na⁺的移动

郭慈, 刘翠, 杨忠志

辽宁师范大学化学化工学院, 辽宁 大连 116029

摘要:

Na⁺-G-四链体复合物是一个明显的极化体系, 其形成或解离过程中, Na⁺的移动路线目前还不十分明确. $\sigma\pi$ 水平的原子-键电负性均衡方法融合进分子力学(ABEEM $\sigma\pi$ /MM)模型除原子位点外, 还明确地定义了孤对电子、 σ 键和 π 键的位置, 并且各位点电荷随分子环境改变而浮动, 因此能更好地反映该体系的极化现象. 本文应用ABEEM $\sigma\pi$ /MM方法研究了Na⁺-G-四平面复合物的性质, 包括它的几何构型、电荷分布和结合能等, 并在MP2/6-31G(d,p)水平上做了相应的从头算, 两种结果十分吻合. Na⁺的存在改变了G-tetrad的氢键方式. 通过比较Na⁺各条移动路线中体系的结合能, 预测G-四链体中三个Na⁺最有可能沿 α 方向依次移出. 以上研究为进一步应用ABEEM $\sigma\pi$ /MM模型进行G-四链体中离子交换通道的动力学模拟打下坚实的基础.

关键词: G-四链体 Na⁺-G-四平面 ABEEM $\sigma\pi$ /MM方法 从头算 移动路线

收稿日期 2009-09-11 修回日期 2009-11-20 网络版发布日期 2009-12-28

通讯作者: 杨忠志 Email: zzyang@lnnu.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 汪志祥, 刘若庄, 黄明宝. NFCI自由基的理论研究[J]. 物理化学学报, 1996, 12(02): 105-108
2. 冀永强; 冯文林; 郝茂荣; 李会英. CH₃NO₂和CH₃自由基吸氢反应途径和变分速率常数计算[J]. 物理化学学报, 2002, 18(08): 721-726
3. 吕鑫; 徐昕; 王南钦; 廖孟生; 张乾二. CO在Cu/ZnO上吸附的簇模型研究[J]. 物理化学学报, 1997, 13(11): 1005-1009
4. 郭建新; 王彦妮; 张启元. 氰基苯阴离子与CO₂间的内球电子转移[J]. 物理化学学报, 1998, 14(03): 193-197
5. 赵文娜; 邹建卫; 商志才; 郭明; 俞庆森. 结合三维静电势参数研究二取代苯的定量结构-疏水性关系 [J]. 物理化学学报, 2002, 18(07): 600-603
6. 郑康成; 饶火瑜; 何峰; 许值涛; 刘汉钦. Fe、Co、Ni双齿巯基配合物从头算研究[J]. 物理化学学报, 1998, 14(04): 299-304
7. 卢秀慧; 王沂轩; 邓从豪. 硅烯与乙烯环加成反应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1998, 14(04): 332-336
8. 陈界豪; 王艳; 冯文林. 丙酮酸和苯甲酰甲酸热分解反应的速率常数[J]. 物理化学学报, 1999, 15(05): 431-435
9. 李光平, 张华北, 田安民, 鄢国森. AlC_n及AlC_n⁺ (n=1-4)原子簇的理论研究[J]. 物理化学学报, 1995, 11(03): 211-217
10. 张绍文; 傅孝愿. HNCO热解为CO₂和HNCO的反应机理理论研究[J]. 物理化学学报, 1994, 10(11): 1004-1008
11. 陈宝吉; 陈德展; 刘奉岭; 宁世光. 合成环氧乙烷新途径的从头算研究[J]. 物理化学学报, 1994, 10(07): 591-596
12. 张敬来; 曹泽星; 顾健德; 田安民; 鄢国森. Si₂分子基态和低激发态的电子结构[J]. 物理化学学报, 1994, 10(05): 396-398
13. 许小红; 武海顺; 张聪杰; 周伟良. B₂Be₂簇的结构与成键性质的研究[J]. 物理化学学报, 1997, 13(12): 1065-1071
14. 武海顺; 许小红; 张聪杰; 周伟良. 金属硼化物结构与稳定性的理论研究[J]. 物理化学学报, 1997, 13(03): 258-263
15. 汪志祥; 刘若庄; 黄明宝. CH自由基与O₂反应得从头算研究[J]. 物理化学学报, 1997, 13(05): 385-388
16. 王罗新, 易长海, 邹汉涛, 许杰, 徐卫林. 椅式(8,8)单壁碳纳米管内偶氮苯的顺反异构化[J]. 物理化学学报, 2010, 26(01): 149-154
17. 张嵩; 朱荣淑; 王艳梅; 张冰. 对二甲苯分子和离子态振动光谱的理论计算 [J]. 物理化学学报, 2003, 19(06): 553-556

扩展功能

本文信息

PDF(1677KB)

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

▶ G-四链体

▶ Na⁺-G-四平面

▶ ABEEM $\sigma\pi$ /MM方法

▶ 从头算

▶ 移动路线

本文作者相关文章

▶ 郭慈

▶ 刘翠

▶ 杨忠志

18. 李来才; 钱一鸣; 朱元强; 田安民. $\text{CH}_3 + \text{HCO}$ 反应机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 2004, 20(03): 228-232
19. 沈新媛 吕洋 李慎敏. 人体端粒中(3+1)混合结构G-四链体稳定性的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2009, 25(04): 783-791
20. 李来才; 田安民. $\text{CH}_3(^2A')$ 自由基与臭氧反应机理的量子化学研究[J]. 物理化学学报, 2003, 19(07): 626-629
21. 卢秀慧; 王沂轩; 邓从豪. 二氯卡宾与甲醛环加成反应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1998, 14(09): 784-788
22. 糜骏; 冯文林; 李会英; 刘坤辉; 蒲敏. $\text{H} + \text{CH}_2\text{CO}$ 反应机理的G2计算[J]. 物理化学学报, 2004, 20(05): 483-487
23. 邹建卫; 蒋勇军; 胡桂香; 曾敏; 庄树林; 俞庆森. 多氯联苯的定量结构-性质(活性)关系[J]. 物理化学学报, 2005, 21(03): 267-272
24. 邹建卫; 俞庆森; 朱龙观. 2(1H)-吡啶酮互变异构体系取代效应的理论计算[J]. 物理化学学报, 1998, 14(11): 1040-1042
25. 丁涪江; 张良辅; 苏克和. HNNH_3 的从头计算研究[J]. 物理化学学报, 1996, 12(11): 1006-1010
26. 周立新; 田安民; 鄢国森. 1,2-二硒-3, 4-二硫方酸的从头计算[J]. 物理化学学报, 1996, 12(08): 684-687
27. 庞先勇; 冯文林; 王艳; 张绍文. CH_3 与NO在单、三态势能面上的反应机理[J]. 物理化学学报, 1996, 12(05): 391-395
28. 苏克和; 文振翼; 胡小玲; 李秀仪; 王育彬. NH^{0-1+}_{2-3} 离解能等的高级 *ab initio* 计算与评价[J]. 物理化学学报, 1996, 12(05): 385-390
29. 杨忠志 刘永军. 精密从头算与ABEEM/MM模型对水团簇(H_2O)₁₁ 9种低能结构的计算[J]. 物理化学学报, 2009, 25(05): 928-934
30. 王洪涛; 韩奎; 李艳. $[\text{Li}\dots\text{X}]e^{-[1]}$ ($\text{X}=\text{FH}, \text{OH}_2, \text{NH}_3$) 的光电性质从头算[J]. 物理化学学报, 2007, 23(09): 1468-1472
31. 延辉; 苑世领; 刘成卜. 烯烃分子在氢终止Si(100)-2×1表面的自由基链反应[J]. 物理化学学报, 2008, 24(01): 8-12
32. 阚蓉蓉; 刘洪梅; 叶原丰; 李鹏; 尹星; 赵健伟. 外电场作用下寡聚苯分子导线的性质[J]. 物理化学学报, 2007, 23(05): 671-675
33. 许旋; 徐志广; 罗一帆. 紫杉醇的核磁共振谱及其分子几何构型的从头算研究 [J]. 物理化学学报, 2002, 18(05): 420-425
34. 胡海泉. 硝基氢异构化反应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1998, 14(06): 544-547
35. 谭金芝; 肖鹤鸣; 贡雪东; 李金山. 硝酸甲酯分子间相互作用的DFT和 *ab initio* 比较[J]. 物理化学学报, 2002, 18(04): 307-314
36. 杨娥; 周立新; 章永凡. β -D-核糖 (RI) 与一价、二价金属离子相互作用的理论研究 [J]. 物理化学学报, 2002, 18(03): 253-259
37. 夏树伟; 隋卫平; 陈国华; 夏少武. 羧甲基壳聚糖衍生物及其振动光谱的理论研究 [J]. 物理化学学报, 2002, 18(03): 248-252
38. 刘建军; 封继康; 付伟; 任爱民; 刘桂霞. $^1\text{CH}_2 + \text{N}_2\text{O}$ 反应的势能面[J]. 物理化学学报, 2001, 17(07): 586-593
39. 周立新; 黄尊行; 田安民; 吴立明; 胡建明; 李俊钱. $\text{C}_4\text{S}^m_{-4}$ 相对稳定性的从头算研究[J]. 物理化学学报, 1998, 14(08): 752-756
40. 张燕军; 李宗和; 曹晓燕. HCN和氯反应动力学及产物振动态分布的计算[J]. 物理化学学报, 1999, 15(01): 10-14
41. 薛英; 谢代前; 鄢国森. 氟磺酸氟振动光谱的从头算[J]. 物理化学学报, 1999, 15(02): 138-142
42. 王义贵; 孙昌俊; 蔡政亭; 邓从豪. 碱金属烯醇盐的从头算[J]. 物理化学学报, 1999, 15(02): 116-120
43. 曹晓燕; 吴伟; 王东; 葛茂发; 王殿勋. 1,2,5-噻二唑衍生物电子结构的紫外光电子能谱研究[J]. 物理化学学报, 2000, 16(06): 491-495
44. 陈波珍; 黄明宝; 苏红梅; 孔繁放. $\text{CH}_2 + \text{O}_2$ 反应的反应机理[J]. 物理化学学报, 2000, 16(10): 869-872
45. 杨明理; 孙泽民; 鄢国森. 聚脲分子的非线性光学极化率[J]. 物理化学学报, 1999, 15(08): 693-697
46. 郑康成; 陈忠宁; 黄加多; 刘汉钦. 草酰胺桥联双核铜配合物结构单元的从头算[J]. 物理化学学报, 1999, 15(03): 204-209
47. 石土金; 刘力; 杨达林; 朱起鹤. 1,4-二氧六环和氨分子氢键团簇的从头算[J]. 物理化学学报, 2000, 16(05): 416-421
48. 苏克和; 魏俊; 胡小玲; 岳红; 吕玲; 王育彬; 文振翼. 优化几何构型对高级别从头算能量的影响[J]. 物理化学学报, 2000, 16(08): 718-723
49. 武海顺; 许小红; 张聪杰. 锥形硼烷 $\text{B}_5\text{H}_{10}\text{X}$ 的结构和成键性质[J]. 物理化学学报, 2000, 16(07): 627-631
50. 张冬菊; 胡海泉; 刘永军; 步宇翔; 刘成卜. $\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_6^{2+}/3+$ 体系电子转移反应动力学的理论研究[J]. 物理化学

51. 雷鸣;冯文林;徐振峰.羟基钴催化氢甲酰化反应的理论研究[J]. 物理化学学报, 2000,16(06): 522-526
52. 侯华;王宝山;顾月姝.F+NCO反应的机理和动力学[J]. 物理化学学报, 2000,16(06): 517-521
53. 刘丹;陈光巨;刘若庄;傅孝愿.2-溴乙酸气相热消除反应的机理探讨[J]. 物理化学学报, 1999,15(10): 872-876
54. 邝平先;陈波珍;黄明宝.C(³P)与H₂S反应的反应机理[J]. 物理化学学报, 2000,16(05): 389-392
55. 李淑瑾;曹阳;冯建文;施卫平;周伟群.聚吡咯、聚甲基吡咯电子能带结构的计算[J]. 物理化学学报, 1999,15(10): 890-894
56. 孟令鹏;郑世钧;蔡新华.氧原子与二硫化碳反应的机理[J]. 物理化学学报, 1999,15(11): 990-996
57. 周立新;莽朝永;章永凡.1,2-二硫方酸的气相酸性和芳香性[J]. 物理化学学报, 2000,16(01): 15-21
58. 石土金;李宗和;刘若庄.HNCO+OH→H₂O+NCO的反应机理[J]. 物理化学学报, 1999,15(03): 247-252
59. 何丽针;陈光巨;刘若庄.丙烯热反应生成甲基环戊烷的理论探讨[J]. 物理化学学报, 1999,15(04): 308-312
60. 谷希斌;王光俊;黄建华;陈茂笃;韩克利;何国钟;楼南泉.266nm激光光解间氟溴苯和对氟溴苯[J]. 物理化学学报, 2000,16(12): 1062-1066
61. 李会英;冯文林;冀永强;徐振峰;雷鸣.CH₂O+O[³P]→CHO+OH反应途径和变分速率常数 [J]. 物理化学学报, 2002,18(05): 446-450
62. 郭明;邹建卫;赵文娜;高志才;俞庆森.基于三维静电势参数研究C₆₀溶解性的构效关系[J]. 物理化学学报, 2003,19(05): 432-435
63. 卢秀慧;刘成卜;邓从豪.二氟硅烯与甲醛环加成反应机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 1999,15(01): 78-81
64. 胡海泉;刘成卜.双自由基CF₂与O₃的反应机理[J]. 物理化学学报, 1998,14(12): 1104-1107
65. 张树东;朱湘君;王艳;孔祥和.甲醇团簇的多光子电离质谱及其从头算[J]. 物理化学学报, 2007,23(03): 379-383
66. 刘若庄;马思渝;李宗和.CH与H₂分子反应动力学及选态反应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1993,9(02): 155-160
67. 王洪涛;李艳;韩奎;郑植仁;王炳强;李志儒 .X...H₂O (X=Li, Na, K)非线性光学性质的从头算理论[J]. 物理化学学报, 2006,22(11): 1423-1426
68. 丁涪江;张良辅;李广年.半正交化基近似计算的改进[J]. 物理化学学报, 1992,8(03): 307-312
69. 徐晓芳, 高放, 李红茹, 张胜涛.生色团连接的苯骈三氮唑衍生物的激发态分子内质子转移[J]. 物理化学学报, 2010,26(01): 131-140
70. 王罗新, 许杰, 邹汉涛, 易长海.硝基甲烷受限单壁碳纳米管内的热解反应:手性和尺寸的影响[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
71. 王永霞, 段雪梅, 王钦, 刘靖尧.甲硫醇和氢原子反应的从头算直接动力学[J]. 物理化学学报, 2010,26(01): 183-187