

## 研究简报

芳甲酰基脲生物活性的量子化学研究

赵新筠<sup>1,2</sup>, 王子云<sup>3</sup>, 汪焱钢<sup>\*1</sup>, 陈传兵<sup>1</sup>, 宋新建<sup>1</sup>

(<sup>1</sup> 华中师范大学化学学院 武汉 430079)

(<sup>2</sup> 南阳师范学院化学系 南阳473000)

(<sup>3</sup> 周口师范学院化学系 周口 466000)

收稿日期 2004-6-10 修回日期 2004-11-2 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 采用密度泛函(DFT)的方法对12个芳甲酰基脲类化合物进行了量子化学计算, 随后讨论了影响化合物生物活性的可能因素. 结果表明, 芳环3, 4, 5号碳原子对HOMO轨道的贡献和芳环上3, 4, 5号碳原子的所带的电荷之和芳环与杂环间的二面角对化合物的活性影响最为重要.

**关键词** [芳甲酰基脲](#) [密度泛函理论](#) [分子轨道](#) [原子净电荷](#) [二面角](#)

分类号

## Quantum Chemical Research on Biological Activities of Aroyl Ureas

ZHAO Xin-Yun<sup>1,2</sup>, WANG Zi-Yun<sup>3</sup>, WANG Yan-Gang<sup>\*1</sup>

CHEN Chuan-Bing<sup>1</sup>, SONG Xin-Jian<sup>1</sup>

(<sup>1</sup> College of Chemistry, Central China Normal University, Wuhan 430079)

(<sup>2</sup> Department of Chemistry, Nanyang Normal University, Nanyang 473000)

(<sup>3</sup> Department of Chemistry, Zhoukou Normal University, Zhoukou 466000)

**Abstract** Twelve aroyl urea compounds have been studied using density functional theory method. Possible factors that may account for the biological activities of these compounds were investigated. Calculation results reveal that the dihedrals formed by the aromatic ring and heterocyclic plane, contributions of carbon atoms labeled as 3, 4 and 5 in the aromatic ring to HOMO orbital, and the sum of net atomic charges born by these atoms may be significant to the biological activities of these compounds.

**Key words** [aroyl urea](#) [density functional theory](#) [molecular orbital](#) [net atomic charge](#) [dihedral](#)

DOI:

通讯作者 汪焱钢 [yawang@mail.ccnu.edu.cn](mailto:yawang@mail.ccnu.edu.cn)

### 扩展功能

#### 本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(0KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

#### 相关信息

▶ [本刊中 包含“芳甲酰基脲” 的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [赵新筠](#)

·

· [王子云](#)

· [汪焱钢](#)

·

· [陈传兵](#)

· [宋新建](#)