

研究简报

量子化学研究水对Adenine-Thymine碱基对构型的影响

谈勇^{1,2}, 王一波^{*2}

(¹东南大学生物科学与医学工程系 生物电子学国家重点实验室 南京 210096)

(²贵州大学化学系 贵州省高性能计算化学重点实验室 贵阳 550025)

收稿日期 2005-11-19 修回日期 2006-3-20 网络版发布日期 接受日期

摘要 利用Hartree-Fock方法, 选取6-31G*基组对Adenine-Thymine-Water氢键复合物可能存在的构型进行了优化, 然后用DFT PBE方法, 选取6-311++G(3d, 3p)基组对复合物的结合能进行计算, 结果表明水与DNA中配对碱基的相互作用, 不会显著影响碱基对的稳定性, 水的存在使得碱基对的扭转构型更接近真实DNA中碱基对的螺旋状结构.

关键词 [DNA碱基对](#) [水](#) [氢键](#) [密质泛函理论](#) [Hartree-Fock](#)

分类号

Quantum Chemical Study on the Effects of Water on the Configurations of Adenine-Thymine Base Pair

TAN Yong^{1,2}, WANG Yi-Bo^{*2}

(¹ State Key Laboratory of Bioelectronics, Department of Biological Science and Medical Engineering, Southeast University, Nanjing 210096)

(² Department of Chemistry, Guizhou University, Guiyang 550025)

Abstract Various possible structures of Adenine-Thymine-Water hydrogen-bond complexes were optimized at Hartree-Fock/6-31G* level, and the binding energies of these complexes were also calculated at DFT PBE/6-311++G(3d, 3p) level. The results show that the interactions between water and Adenine-Thymine (A-T) base pair do not affect the stabilities of the base pairs, and water is useful for forming the helix structures of base pairs in DNA.

Key words [DNA base pair](#) [water](#) [hydrogen bond](#) [density-functional theory](#) [Hartree-Fock](#)

DOI:

通讯作者 王一波 ybw@gzu.edu.cn

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(259KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“DNA碱基对” 的相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

· [谈勇](#)

· [王一波](#)