

碳酸酐酶活性部位模型化合物 $\{\eta^3\text{-HB(3-Phpz)3ZnX}\}$ ( $\text{X}=\text{Cl}^-$ ,  $\text{Br}^-$ ,  $\text{I}^-$ ,  $\text{NO}_3^-$ )的合成、表征及量子化学研究

杨科武,殷元骐,王永珍,黄仲贤

复旦大学化学系;中国科学院兰州化学物理研究所

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

摘要 制备了碳酸酐酶活性中心模型化合物 $\{\eta^3\text{-HB(3-Phpz)3ZnX}\}$ [Ph=苯基, pz=吡唑,  $\text{X}=\text{Cl}^-$ (1),  $\text{Br}^-$ (2),  $\text{I}^-$ (3),  $\text{NO}_3^-$ (4)], 通过元素分析, IR,  $^1\text{H}$  NMR对其结构进行了表征。依据模型化合物2的晶体结构数据, 采用量子化学DV-X $\alpha$ 方法计算了2以及 $\{\eta^3\text{-HB(3-Phpz)3ZnOH}\}$ 模型的分子轨道、键级和原子电荷, 讨论了模型化合物分子的活泼原子和活泼基团。

关键词 [吡唑 P](#) [红外分光光度法](#) [元素分析](#) [晶体结构](#) [量子化学](#) [质子磁共振谱法](#) [碳酸酐酶模型化合物](#)

分类号 [0641](#)

### Study on the synthesis, characterization and quantum chemistry of carbonic anhydrase active site model compounds $\{\eta^3\text{-HB(3-Phpz)3ZnX}\}$ ( $\text{X}=\text{Cl}^-$ , $\text{Br}^-$ , $\text{I}^-$ , $\text{NO}_3^-$ )

YANG KEWU, YIN YUANQI, WANG YONGZHEN, HUANG ZHONGXIAN

**Abstract** The active site model compounds  $[\eta^3\text{-HB(3-Phpz)3ZnX}]$  [ $\text{X}=\text{Cl}^-$ (1),  $\text{Br}^-$ (2),  $\text{I}^-$ (3),  $\text{NO}_3^-$ (4)] of the carbonic anhydrase have been prepared and characterized by elemental analysis, IR,  $^1\text{H}$  NMR spectrum. The molecular orbital, bond grade and the atomic charge of the model compound 2 as well as the model  $[\eta^3\text{-HB(3-Phpz)3ZnOH}]$  were calculated by DV-X $\alpha$  method. According to the calculated results the active atoms and active groups in model compounds are discussed.

**Key words** [PYRAZOLE P](#) [INFRARED SPECTROPHOTOMETRY](#) [ELEMENTAL ANALYSIS](#) [CRYSTAL STRUCTURE](#) [QUANTUM CHEMISTRY](#) [PROTON MAGNETIC RESONANCE SPECTROMETRY](#) [CARBONIC ANHYDRASE](#) [MODEL COMPOUND](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(420KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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“吡唑 P”的 相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [杨科武](#)
- [殷元骐](#)
- [王永珍](#)
- [黄仲贤](#)