

NAMI-A型钌配合物(HL)[*trans*-RuCl₄L(dmso-S)] (L=1-methyl-1,2,4-triazole)水解机理的理论研究

Hydrolysis Mechanism of the NAMI-A-type Antitumor Complex (HL)[*trans*-RuCl₄L(dmso-S)] (L=1-methyl-1,2,4-triazole)

摘要点击 309 全文点击 101 投稿时间: 2011-2-25 采用时间: 2011-5-18

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)

doi: 10.1088/1674-0068/24/04/383-390

中文关键词 [NAMI-A型配合物](#) [水解](#) [密度泛函理论](#) [导体极化连续模型](#)

英文关键词 [NAMI-A-type complex](#) [Anticancer activity](#) [Hydrolysis](#) [Density functional theory](#) [Conductor-like polarizable continuum model](#)

基金项目

作者	单位	E-mail
陈兰美	广东医学院药学院, 湛江524023	
陈锦灿*	广东医学院药学院, 湛江524023	jincanchen@126.com
廖思燕	广州医学院化学教研室, 广州510182	
刘江琴	广东医学院药学院, 湛江524023	
罗辉	广东医学院药学院, 湛江524023	
郑康成	中山大学化学与化学工程学院, 广州510275	

中文摘要

用量子化学密度泛函方法结合导体极化连续模型研究了具有潜在抗肿瘤活性的NAMI-A型钌配合物(HL)[*trans*-RuCl₄L(dmso-S)](L=1-methyl-1,2,4-triazole, dmso-S=S-dimethyl sulfoxide) (1)的水解反应过程. 计算得到该配合物水解反应过程中相应的结构特征和详细的反应势能面. 对于第一步水解, 液相中配合物1的活化能垒比已经报道的抗肿瘤药物(Him)[*trans*-RuCl₄(

英文摘要

The hydrolysis process of Ru(III) complex (HL)[*trans*-RuCl₄L(dmso-S)] (L=1-methyl-1,2,4-triazole and dmso-S=S-dimethyl sulfoxide) (1), a potential antitumor complex similar to the well-known antitumor agent (Him)[*trans*-RuCl₄L(dmso-S)(im)] (NAMI-A, im=imidazole), was investigated using density functional theory combined with the conductor-like polarizable continuum model approach. The structural characteristics and the detailed energy profiles for the hydrolysis processes of this complex were obtained. For the first hydrolysis step, complex 1 has slightly higher barrier energies than the reported anticancer drug NAMI-A, and the result is in accordance with the experimental evidence indicating larger half-life for complex 1. For the second hydrolysis step, the formation of cis-diaqua species is thermodynamic preferred to that of trans isomers. In addition, on the basis of the analysis of electronic characteristics of species in the hydrolysis process, the trend in nucleophilic attack abilities of hydrolysis products by pertinent biomolecules is revealed and predicted.

相关附件: [supporting material.pdf](#)

Copyright©2007 IOPP

承办: 中国科学技术大学 协办: 中国科学院大连化学物理研究所
主管: 中国科学技术协会 主办: 中国物理学会 国际代理发行: 英国物理学会

编辑部地址: 安徽省合肥市金寨路96号 中国科学技术大学东区外语楼二楼
联系电话: 0551-3601122 Email: cjcp@ustc.edu.cn