



云南大学学报(自然科学版) » 2008, Vol. 30 » Issue (1): 68-74 DOI:

化学

最新目录 | 下期目录 | 过刊浏览 | 高级检索

◀ Previous Articles | Next Articles ▶

对15种黄酮类化合物清除自由基活性的理论评价

陈秀敏, 李西平

昆明理工大学 理学院 应用化学系 云南 昆明 650093

Theoretical evaluation of the eliminating radicals activity of fifteen flavonoids

CHEN Xiu-min, LI Xi-ping

Department of Chemistry, Kunming University of Science and Technology, Kunming 650093, China

- 摘要
- 参考文献
- 相关文章

全文: PDF (392 KB) HTML (0 KB) 输出: BibTeX | EndNote (RIS) 背景资料

摘要 用AM1半经验和密度泛函计算相结合的量子化学方法,计算了15种黄酮类化合物的解离焓(O—HBDE)和电离势(IP),以此为理论指标评价了这些化合物清除自由基的活性,并讨论了部分化合物抗氧化活性的构效关系.计算得到在非极性溶剂中3,7,8号化合物清除自由基活性最高,活性最低的是11,15号化合物;在极性溶剂中3,4,5号化合物清除自由基活性最高;可以得出,3号化合物(3,7,3',4'-四羟基黄酮)无论在极性和非极性溶剂中均具有较强的清除自由基活性,提示其可能作为抗氧化、抗肿瘤、抗菌和抗病毒等药物的有效成分.

关键词: 黄酮类化合物 清除自由基活性 量子化学方法 键解离焓 电离势(IP)

Abstract: A kind of combined quantum chemistry method(DFT/AM 1) is employed to calculate O—H bond dissociation enthalpies(BDEs) and ionization potentials(IPs) of fifteen flavonoids,by which their antioxidative activities are evaluated,and the structure-antioxidative activity relationship of some of these compounds is discussed.It was found that in non-polar solvents compounds 3,7 and 8 have the highest activity,and compounds 11,15 have the lowest activity to scavenge free radicals.And in polar solvents compounds 3,4 and 5 have the highest activity to scavenge free radicals.It can be concluded that in polar and non-polar solvents compound 3(3,7,3',4'-Tetrahydroxyflavone)has the highest activity to scavenge free radicals,suggesting that it is a potential efficient drug for anti-tumor,anti-bacteria and anti-virus.

Key words: flavonoids antioxidant quantum chemistry methods bond dissociation enthalpies ionization potentials

收稿日期: 2007-09-21;

基金资助:云南省自然科学基金项目资助(2006E0021M);昆明理工大学校青年基金资助项目(2006-17)

作者简介: 陈秀敏(1973-)女,副教授,云南人,主要从事量子化学方面的研究.

引用本文:

陈秀敏,李西平. 对15种黄酮类化合物清除自由基活性的理论评价[J]. 云南大学学报(自然科学版), 2008, 30(1): 68-74.

CHEN Xiu-min,LI Xi-ping. Theoretical evaluation of the eliminating radicals activity of fifteen flavonoids[J]. , 2008, 30(1): 68-74.

没有本文参考文献

没有找到本文相关文章

服务

- ▶ 把本文推荐给朋友
- ▶ 加入我的书架
- ▶ 加入引用管理器
- ▶ E-mail Alert
- ▶ RSS

作者相关文章

- ▶ 陈秀敏
- ▶ 李西平

版权所有 © 《云南大学学报(自然科学版)》编辑部

编辑出版: 云南大学学报编辑部 (昆明市翠湖北路2号, 650091)

电话: 0871-5033829(传真) 5031498 5031662 E-mail: yndxxb@ynu.edu.cn yndxxb@163.com