

目錄

	頁次
中文摘要	i
英文摘要	ii
謝誌	iii
目錄	iv
第一章 緒論	1
1.1 研究背景	1
1.2 研究動機	7
1.3 論文架構	8
第二章 文獻回顧	9
2.1 前言	9
2.2 大環配位子之模擬研究	10
2.3 大環配位子與鑰系金屬之模擬研究	14
2.3.1 利用分子動力學方法之研究	15
2.3.2 利用量子力學方法之研究	21
2.3.2.1 Sparkle Model	21
2.3.2.2 Effective core potential (ECP)	23
第三章 計算化學理論方法簡介	28
3.1 分子力學(Molecular Mechanics, MM)	28
3.1.1 分子動力學 (Molecular Dynamics, MD)	32
3.1.2 蒙特卡羅 (Monte Carlo) 法	32
3.2 量子力學 (Quantum Chemistry)法	35
3.2.1 全初始 (Ab inito)法	36
3.2.2 半經驗 (Semi-empirical)法	36
3.2.3 電子密度泛函理論(Density Functional Theory)	37
第四章 模擬及計算方法	40
4.1 模擬計算所需資源	40
4.2 使用軟體介紹	41
4.2.1 劍橋結構資料庫 (Cambridge Structure Database, CSD)	41
4.2.2 Insight II	43
4.2.3 CHARMM	45
4.2.4 Gaussian	52
4.3 實驗方法與步驟	58
4.3.1 流程圖	58
4.3.1.1 CHARMM in Insight II	58
4.3.1.2 Gaussian 03	59
4.3.2 實驗步驟	60

4.3.2.1 CHARMM in Insight II	60
4.3.2.2 Gaussian 03	62
第五章 模擬計算結果	64
5.1 在 CHARMM 中模擬多胺基多酸基大環配位子於不同環境下 及不同質子化位置之結構最佳化	64
5.1.1 由結晶結構作為起始結構之大環配位子之模擬	66
5.1.2 多胺基多酸基大環配位子於不同環境下雙質子化位置之最 佳化結構	74
5.1.3 多胺基多酸基大環配位子於不同環境下單質子化位置之最 之最佳化結構	115
5.2 在 Gaussian 03 中模擬 DO3A 與 DO2A 於不同質子化位置 之結構最佳化	131
5.3 銅系金屬離子錯合物之最佳化結構	139
第六章 討論	156
6.1 多胺基多酸基大環配位子結構最佳化之比較	156
6.1.1 單質子化位置之結構最佳化比較	156
6.1.2 雙質子化位置之結構最佳化比較	166
6.2 銅系金屬離子錯合物之最佳化結構	171
第七章 結論	173
參考文獻	175

