

Understanding Radicals; Recent Results from Theoretical Studies of Radical-Matrix Interactions and Biophysical Systems

Eriksson, Leif A.

University of Stockholm. Department of Physics
Box 67 30. 113 85 Stockholm. Sweden

BIBLID [1137-4411 (1997), 4; 45-71]

Zenbait adibide aurkezten dira. Bertan duela gutxi garatu eta erradikalak eta erradikalen egitura hiperfina aztertze erabili den gradientearen zuzenketa kontutan hartzen da. Interesgarria da oso erradikalak inguratutako matrizearen efektua erradikalaren beraren geometrian eta propietate hiperfinetan. Era berean, hidrogeno loturaren eragina spin dentsitatearen distribuzioan eta erradikal amino azidoen hfcc-an modelatuko da. Ahal denean, elektroieresonantzia paramagnetikoak eskaintako datuekin konparatuko da, eta dagoenean, aurretik egindako lan teorikoekin.

Se presentan un número de ejemplos en los que la reciente corrección de gradiente de la aproximación de la teoría del funcional de la densidad se ha utilizado para el estudio de radicales y de la estructura hiperfina de radicales. Los ejemplos incluidos abarcan tanto radicales neutros como cargados. Un interés particular presentan los efectos de la matriz en las geometrías y en las propiedades hiperfinas de los radicales, así como efectos explícitos de modelización de enlaces de hidrogeno en la distribución de la densidad de spin y hfcc de radicales de aminoácidos. Por todo esto, comparamos con los datos disponibles de los experimentos de resonancia paramagnética electrónica, y, cuando sea posible, con anteriores trabajos teóricos.

On présente un nombre d'exemples dans lesquels on a utilisé l'approximation de la méthode de densités fonctionnelles avec une récente correction du gradient pour l'étude des radicaux et de la structure hyperfine des radicaux. Les exemples ci-inclus comprennent tant des radicaux neutres que chargés. Les effets de la matrice sur les géométries et sur les propriétés hyperfines des radicaux présentent un intérêt particulier, ainsi que des effets explicites de modelage des liaisons de hydrogène dans la distribution de la densité de spin et de hfcc des radicaux des aminoacides. C'est pour cela qu'on fait une comparaison avec les données dégagées des expériences de résonance paramagnétique électronique, et, dans la mesure du possible, avec des travaux théoriques antérieures.

Giltz-Hitzak: Erradikalak. Egitura hiperfina.
Palabras Clave: Radicales. Estructura hiperfina.
Mots Clés: Radicaux. Structure hyperfine.