

含有一个非平面杂环胺配体的新型反铂抗癌药物的水解机理

赵亚华

华南农业大学生命科学学院, 广州 510642

摘要:

用B3LYP杂化泛函和等电子聚焦极化连续模型(IEF-PCM)研究了trans-[PtCl₂(NH₃)(Am)](Am: 非平面哌啶或哌嗪)新型反铂抗癌药物的水解反应机理. 对经由一般的SN₂机理的第一步和第二步水解反应势能面上的稳定点进行了全优化和表征. 在水解中, 最显著的结构变化发生在反应过渡态和中间体的五配位三角双锥的赤道面上. 与经典顺铂(cisplatin)比较, 反式[PtCl₂(NH₃)(piperazine)]的第一步和第二步水解活化能均低于顺铂, 而反式[PtCl₂(NH₃)(piperidine)]的第一步水解活化能稍高于顺铂, 第二步水解活化能稍低于顺铂. 计算表明, 这些含有非平面杂环胺反铂的配合物减小了赤道面上的立体效应和水解势垒.

关键词: 水解 密度泛函理论 非平面杂环胺配体 过渡态 非经典反铂

收稿日期 2009-05-22 修回日期 2009-08-09 网络版发布日期 2009-09-29

通讯作者: 赵亚华 Email: zhaoyahua@126.com

本刊中的类似文章

1. 李宝宗. 2-硫代黄嘌呤互变异构体的密度泛函理论计算[J]. 物理化学学报, 2004,20(12): 1455-1458
2. 郭彩红; 贾建峰; 郭玲; 武海顺. Ga_xP_y (x+y=8) 及其阴离子团簇的结构与性质的DFT研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(10): 1253-1259
3. 王岩; 曾小兰; 汪玲. 硅杂苯与亲二烯体的Diels-Alder反应[J]. 物理化学学报, 2009,25(02): 371-376
4. 崔明侠; 董士红; 王文亮; 尹世伟; 吕剑. 4-(1,2-二苯基)乙烯基-4'-(N,N-二苯基-4-乙烯基苯胺基)联苯及其二氟取代衍生物的电子结构与光谱性质[J]. 物理化学学报, 2009,25(02): 347-352
5. 游晓莉; 徐布一; 李权; 赵可清. 噻唑类生色分子的电子光谱和非线性光学性质[J]. 物理化学学报, 2009,25(02): 314-318
6. 刘木辛; 徐桂英; 李干佐; 毛宏志; 李方. 油酸-油酸钠水溶液/原油间的瞬时界面张力[J]. 物理化学学报, 1995,11(11): 1040-1043
7. 朱王步瑶; 尹育军; 王洪鉴; 赵国玺. 强酸酯水解与氨解反应的胶团催化研究[J]. 物理化学学报, 1996,12(02): 109-113
8. 李永红; 洪三国. SCRCR'CO重排反应的量子化学研究[J]. 物理化学学报, 1996,12(02): 119-123
9. 李来才; 周红平; 田安民. NH₂ 自由基与O₃ 反应机理的从头计算[J]. 物理化学学报, 2002,18(09): 838-840
10. 冀永强; 冯文林; 郝茂荣; 李会英. CH₃NO₂ 和CH₃ 自由基吸氢反应途径和变分速率常数计算[J]. 物理化学学报, 2002,18(08): 721-726
11. 陈孝云; 刘守新; 陈曦; 孙承林. TiO₂ /wAC复合光催化剂的酸催化水解合成及表征[J]. 物理化学学报, 2006,22(05): 517-522
12. 李勇慧; 黄建滨; 王传忠; 毛敏. 易水解类表面活性剂的表面与胶团性质[J]. 物理化学学报, 2001,17(11): 972-977
13. 陈锦灿; 李俊; 吴文娟; 郑康成. 系列异构配合物Ru(azpy)₂Cl₂ 的结构与抗癌活性[J]. 物理化学学报, 2006,22(04): 391-396
14. 李权; 王红艳; 蒋刚; 朱正和. PuX+(X=H,O,N,C) 的结构与势能函数[J]. 物理化学学报, 2001,17(07): 622-625
15. 钱俊红; 郭荣. 青霉素G钾盐在CTAB胶束中的水解及其抑制 [J]. 物理化学学报, 2002,18(02): 175-179
16. 周世琦; 张晓祺. 一个新的桥泛函及其在非均一流体密度泛函理论中的应用[J]. 物理化学学报, 2002,18(08): 699-704
17. 水淼; 岳林海; 徐铸德. 几种制备方法的掺铁二氧化钛光催化特性[J]. 物理化学学报, 2001,17(03): 282-285
18. 薛卫东; 张广丰; 朱正和; 汪小琳; 罗德礼; 邹乐西; 孙颖. CO₂ 二聚体分子弱结合作用的DFT计算[J]. 物理化学学报, 2001,17(06): 501-506

扩展功能

本文信息

PDF(581KB)

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

引用本文

Email Alert

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 水解

▶ 密度泛函理论

▶ 非平面杂环胺配体

▶ 过渡态

▶ 非经典反铂

本文作者相关文章

▶ 赵亚华

19. 武海顺;许小红;张聪杰;张富强.(XN)4R4簇合物的结构与化学键 [J]. 物理化学学报, 2002,18(02): 127-130
20. 刘幼成;蒋刚;朱正和.NX(X=F,Cl,Br)分子结构与极化函数 r 轨道的作用 [J]. 物理化学学报, 2002,18(02): 117-121
21. 艾洪奇;步宇翔.黄金规则用于 $N_3^- + N_3$ 体系电子转移的研究[J]. 物理化学学报, 2001,17(03): 210-215
22. 王遵尧;肖鹤鸣;李金山. $F + Cl_2 \rightarrow ClF + Cl$ 和 $Cl + F + Cl \rightarrow Cl + ClF$ 的反应机理[J]. 物理化学学报, 2001,17(02): 107-110
23. 周幸福;褚道葆;韩爱杰;顾家山;林昌健;田中群;谭建光.电化学溶解钛金属直接水解法制备纳米 TiO_2 [J]. 物理化学学报, 2001,17(04): 367-371
24. 徐文媛;洪三国;彭以元;李永红;王生生.苯基及取代苯基四唑异构反应的量子化学研究[J]. 物理化学学报, 1997,13(12): 1115-1118
25. 王繁;黎乐民.高精度相对论密度泛函计算方法[J]. 物理化学学报, 2004,20(08S): 966-973
26. 曹梅娟;陈文凯;刘书红;许莹;李俊箴.苯在Au(100)表面化学吸附的周期性密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(01): 11-15
27. 封学军;李前树.全氟代金刚烷及其自由基的理论研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(09): 1172-1174
28. 李庆明;方德彩;傅孝愿.烷基氟化物热消除反应的理论研究-1[J]. 物理化学学报, 1994,10(05): 434-437
29. 杨捷;梁国明;田安民;鄢国森. $H_3PO \rightarrow H_2POH$ 异构化反应的LMO研究[J]. 物理化学学报, 1994,10(04): 367-370
30. 冀永强;傅孝愿.2-硝基丙烯热解反应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1994,10(01): 22-25
31. 张玉亭.醇对均匀胶体粒子形成的影响[J]. 物理化学学报, 1994,10(01): 50-53
32. 张玉亭;戴仲善.EDTA对均匀胶体粒子形成的影响[J]. 物理化学学报, 1993,9(06): 728-734
33. 袁丽霞;杨郭英;孙德升;王遵尧;池清清. $Br_2 + Cl_2 = 2BrCl$ 反应机理的理论和实验研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(10): 1191-1195
34. 韦文美;郑仁慧;田燕;何天敬;陈东明;刘凡镇.过氧硝酸乙酯分解反应的速率常数[J]. 物理化学学报, 2006,22(01): 53-58
35. 林伟;章永凡;李奕;陈勇;李俊箴. $SnO_2(110)$ 弛豫表面构型与电子结构的第一性原理研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(01): 76-81
36. 胡兴邦;李浩然;梁婉春;韩世钧.水对5-氟尿嘧啶质子转移影响规律的研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(09): 952-956
37. 吕玲玲;王永成. $Au^+(^1S, ^3D)$ 与 $N_2O(^1\Sigma^+)$ 反应机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(03): 265-269
38. 望天志;吴鼎泉;黄在银;屈松生;李东风;廖展如;万洪文.紫色酸性磷酸酯酶模型化合物水解ATP的研究[J]. 物理化学学报, 1997,13(07): 643-646
39. 张敬来;王连宾;吴文鹏;曹泽星.线性簇合物 $SC_{2n}S^{2-}$ ($n=1\sim 12$)电子吸收光谱[J]. 物理化学学报, 2004,20(12): 1428-1433
40. 耿志远;王永成;汪汉卿.锆烯 X_2Ge ($X=H, CH_3, F, Cl, Br$)与乙烯环加成反应的量子化学研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(12): 1417-1422
41. 徐灿;朱莉芳;高晨阳;曹娟.硅氧团簇 $(SiO_2)_nO_2H_4$ 的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(02): 152-155
42. 郑妍;查东;李来才. CF_3O_2 自由基和NO反应机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(02): 156-160
43. 黄飙;张家兴;李锐;申自勇;侯士敏;赵兴钰;薛增泉;吴全德. $Al-C_{60}-Al$ 分子结电子输运特性的第一性原理计算[J]. 物理化学学报, 2006,22(02): 161-166
44. 马文瑾;武海顺. $AlmN_2^-$ ($m=1\sim 8$)团簇的结构与稳定性[J]. 物理化学学报, 2006,22(02): 178-182
45. 罗小玲;唐典勇;李明.氢甲酰化反应溶剂效应的量子化学研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(12): 1404-1410
46. 高立国;王永成;耿志远;陈晓霞;吕玲玲;戴国梁;王冬梅.气相中 Sc^+ 和 Ti^+ 与 CS_2 反应的计算研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(10): 1102-1107
47. 章应辉;阮文娟;吴扬.密度泛函理论研究5-单苯基吡啶分子的几何结构和拉曼光谱[J]. 物理化学学报, 2005,21(12): 1390-1394
48. 方冉;耿志远;王永成;张兴辉;王冬梅;高立国;陈晓霞.锆烯 X_2Ge 与环硫乙烷硫转移反应的密度泛函研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(12): 1331-1336
49. 张材荣;陈宏善;陈玉红;冯旺军;李维学;许广济;寇生中. Al_8P_8 团簇环状结构与性质的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(12): 1368-1372
50. 李永红;彭以元;王牲;洪三国.AM1法研究取代乙烯与环己-1, 3-二烯热加成[J]. 物理化学学报, 1997,13(06): 532-536

51. 朱孟强;潘纲;刘涛;李贤良;杨玉环;李薇;李晋;胡天斗;吴白玉;谢亚宁.用密度泛函和XANES计算研究 Zn^{2+} 在水锰矿表面的吸附和沉淀[J]. 物理化学学报, 2005,21(12): 1378-1383
52. 朱瑜;蒋刚;于桂凤;朱正和;王和义;傅依备. N_2 在Pd金属表面的吸附行为[J]. 物理化学学报, 2005,21(12): 1343-1346
53. 陈文凯;曹梅娟;刘书红;许莹;李奕;李俊箴.苯分子在Cu(100)面平板模型上吸附的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(08): 903-908
54. 李会英;蒲敏;陈标华.DFT法研究分子筛催化 $trans$ -2-丁烯的双键异构[J]. 物理化学学报, 2005,21(08): 898-902
55. 和芹;周立新.铂配合物与DNA碱基对间相互作用的理论研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(08): 846-851
56. 王艳花;邹建卫;胡桂香;郑柯文;俞庆森.吡咯喹啉酮模型化合物与氨亲核加成的理论探讨[J]. 物理化学学报, 2004,20(09): 1129-1133
57. 王永成;戴国梁;耿志远;吕玲玲;王冬梅.乙烯自由基与臭氧反应的DFT计算研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(09): 1071-1077
58. 张东东,周立新.含平面胺配体的反式二价钡配合物与DNA碱基的作用[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
59. 王清高,杨宗献,危书义.水分子和二氧化铈(111)表面相互作用的DFT+ U 研究[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
60. 张进;唐英;谢家庆;李建章;曾宪诚;胡常伟.冠醚化Schiff 碱配合物金属胶束催化BNPP水解动力学[J]. 物理化学学报, 2005,21(04): 408-413
61. 蒲敏;陈标华;李会英;刘坤辉.DFT法研究离子液中EMIM⁺催化丁烯双键异构反应机理(II)[J]. 物理化学学报, 2005,21(04): 383-387
62. 任彦亮;万坚;刘俊军;万洪文.吡吩垂直激发态的理论研究方法的比较[J]. 物理化学学报, 2004,20(09): 1089-1092
63. 陈人杰;吴锋.高氯酸锂-乙酰胺新型二元熔盐电解质的谱学研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(02): 177-181
64. 周俊红;曾艳丽;孟令鹏;郑世钧.CIO与CIO自由基反应机理及电子密度拓扑分析[J]. 物理化学学报, 2005,21(02): 166-172
65. 李永红;陈丽萍;徐文媛;洪三国.2-溴丙酸气相热消除反应的机理[J]. 物理化学学报, 2003,19(05): 389-392
66. 徐艺军;李俊箴;章永凡;陈文凯. O_2 在MgO(001)完整和缺陷表面上的吸附[J]. 物理化学学报, 2003,19(05): 414-418
67. 邵晓红;张现仁;汪文川.密度泛函与分子模拟计算介孔孔径分布比较[J]. 物理化学学报, 2003,19(06): 538-542
68. 李宝宗.6-硫代黄嘌呤互变异构体的密度泛函理论计算[J]. 物理化学学报, 2004,20(05): 503-506
69. 林梅钦;孙爱军;董朝霞;唐亚林;李明远;吴肇亮.低浓度HPAM/AICit交联聚合物溶液性质研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(03): 285-289
70. 张彩云;崔丽亚;武海顺.内含式复合物 $X@(\text{HAINH})_{12}$ ($X=\text{Be, Mg, Ca, Zn, Al}^+, \text{Ga}^+$)的结构和稳定性[J]. 物理化学学报, 2008,24(03): 405-410
71. 苗月;袁宏宽;陈洪.双钙钛矿 $\text{Sr}_{2-x}\text{La}_x\text{CrReO}_6$ 的电子结构和磁性[J]. 物理化学学报, 2008,24(03): 448-452
72. 胥倩;倪哲明;潘国祥;陈丽涛;刘婷.水滑石限域空间中 Cl^- 与 H_2O 的超分子作用[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 601-606
73. 吴阳;冯璐;张向东. $\text{C}_6\text{H}_5-\text{H}\cdots\text{X}$ 分子间氢键的理论计算[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 653-658
74. 李志伟;李香芝;许先芳;赵存元;陈六平. NaP_4 及其正负离子的结构和光谱性质[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 670-674
75. 李金环;康万利;闫文华;郭伊荇;高洪峰;刘忠和. Eu^{3+} 掺杂 TiO_2 纳米晶的制备及光催化降解部分水解聚丙烯酰胺[J]. 物理化学学报, 2008,24(06): 1030-1034
76. 孙慧卿;丁少锋;王雨田;邓贝;范广涵. CdO 及 $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ 化合物的结构、能量和电子性能分析[J]. 物理化学学报, 2008,24(07): 1233-1238
77. 许保恩;李晓艳;曾艳丽;孟令鹏;张萍;刘占荣. CH_3SH 与 CN^- 自由基的反应机理及电子密度拓扑分析[J]. 物理化学学报, 2008,24(07): 1245-1251
78. 罗世霞;张笑一;张思亭;朱淮武;胡继伟;卫钢.巯基偶氮苯单分子电子传输的取代基效应[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1471-1476
79. 马文瑾;张献明;许小红;王艳宾;武海顺. C_nAl_2 ($n=1-10$)团簇的结构特征与稳定性[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1477-1480
80. 王云海;刘永东;罗云敬;钟儒刚.过氧亚硝酸与酪氨酸的反应机理[J]. 物理化学学报, 2008,24(07): 1207-1213
81. 张材荣 陈宏善 陈玉红 魏智强 蒲忠胜.亚甲基富勒烯衍生物[6,6]-苯基- C_{61} 丁酸甲酯的密度泛函研究[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1353-1358

82. 张旭 储伟 陈建钧 戴晓雁. 甲醇钠引发的环氧乙烷开环聚合反应过程[J]. 物理化学学报, 2009,25(03): 451-456
83. 刘述斌. 概念密度泛函理论及近来的一些进展[J]. 物理化学学报, 2009,25(03): 590-600
84. 罗小艳; 贾文红; 张聪杰. In_nNa 和 In_nNa^+ ($n=2-8$)的团簇结构和电子性质[J]. 物理化学学报, 2009,25(02): 261-266
85. 洪三国. 苯并二氢吡喃热分解反应的量子化学研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(04): 297-301
86. 李银玲; 洪三国; 王姓. 碳酸及碳酸酯热消除反应的量子化学研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(05): 414-418
87. 洪功义; 黎乐民; 徐光宪; 林宪杰. 单羰基钨的键合异构现象[J]. 物理化学学报, 1995,11(06): 481-483
88. 赵瑞玉; 董鹏; 梁文杰. 单分散 SiO_2 体系制备中TEOS水解动力学研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(07): 612-616
89. 张国鼎; 于秀芳. 量热法研究 Cr^{3+} 水解聚合作用的热力学性质[J]. 物理化学学报, 1995,11(08): 766-768
90. 孙宝珍; 陈文凯; 徐香兰. NO双分子在 $\text{Cu}_2\text{O}(111)$ 面吸附与解离的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(09): 1126-1131
91. 张华; 陈小华; 张振华; 邱明. 接枝羟基对有限长碳纳米管电子结构的影响[J]. 物理化学学报, 2006,22(09): 1101-1105
92. 王连宾; 吴文鹏; 张敬来; 曹泽星. 反式和顺式 HOOH 的电子光谱的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(09): 1079-1084
93. 李权; 黄方千. 邻二氮杂苯-水复合物的氢键结构与性质[J]. 物理化学学报, 2005,21(01): 52-56
94. 吴文娟; 赖瑛; 郑康成; 云逢存. 抗癌性咪唑啉啉衍生物的定量构效关系[J]. 物理化学学报, 2005,21(01): 28-32
95. 赵彦英; 刘亚军; 郑世钧; 黄明宝; 孟令鹏. 戊烯自由基阳离子的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2002,18(12): 1081-1086
96. 武海顺; 许小红; 马文瑾; 贾建峰. AMT异构体互变机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(05): 408-413
97. 李来才; 田安民. $\text{CH}_3(^2A')$ 自由基与臭氧反应机理的量子化学研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(07): 626-629
98. 蒲敏; 刘坤辉; 李会英; 陈标华. DFT法研究离子液中 EMIM^+ 催化丁烯双键异构反应机理[J]. 物理化学学报, 2004,20(08): 826-830
99. 吕海港; 黎乐民. 表观价态异常分子 EuS_2 和 Eu_2S 的泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(05): 413-418
100. 曹小龙; 郭丽. 多通道反应 $\text{O}(^3P) + \text{CH}_2\text{F}$ 的理论研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(06): 642-646
101. 王利江; 张聪杰; 武海顺. $\text{C}_n\text{B}^\delta$ ($\delta=0, \pm 1; n=1\sim 6$)团簇的结构、稳定性和光谱[J]. 物理化学学报, 2005,21(03): 244-249
102. 李中华; 王锐; 陈振宁; 韦永德; 周百斌. 用密度泛函方法研究 $\alpha\text{-[XMo}_{12}\text{O}_{40}]^n$ 杂多阴离子的振动光谱[J]. 物理化学学报, 2004,20(11): 1329-1334
103. 李银玲; 王凤奇; 甄珍; 张建成; 刘新厚. 水杨叉缩苯胺及其衍生物的变色机理[J]. 物理化学学报, 1998,14(11): 981-987
104. 李来才; 朱元强; 查东; 田安民. $\text{CH}_3\text{CF}_2\text{O}_2$ 与 HO_2 自由基反应机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(05): 490-493
105. 徐艺军; 李俊箴; 章永凡. O_2 在具有氧和镁缺陷 $\text{MgO}(001)$ 表面的吸附[J]. 物理化学学报, 2003,19(09): 815-818
106. 史福强; 姜小明; 徐志成; 安静仪; 俞稼镛. 吡咯-HCN体系在气相及溶液中相互作用的理论研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(11): 1324-1328
107. 王勇; 李浩然; 吴韬; 王从敏; 韩世钧. 烷基咪唑型卤盐类离子液体的合成机理研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(05): 517-522
108. 王勇; 李浩然; 王从敏; 许映杰; 韩世钧. 单重态二溴卡宾和甲醛环加成反应的量化研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(11): 1339-1344
109. 田欣欣; 张富强; 冯瑞娟; 武海顺. $\text{B}_{28}\text{N}_{28}$ 笼的稳定性及笼中四元环间键联类型对笼稳定性的影响[J]. 物理化学学报, 2006,22(08): 937-941
110. 晋春; 贾银娟; 王宝俊; 范彬彬; 马静红; 李瑞丰. Y型分子筛中对称与不对称 Co(II)Salen 型席夫碱配合物的结构和催化性能[J]. 物理化学学报, 2006,22(08): 947-952
111. 寇福平; 林华宽; 朱守荣; 陈荣梯. 三吡啶胺 Zn(II) 配合物作为碳酸酐酶模拟物的研究[J]. 物理化学学报, 1996,12(09): 804-808
112. 戴松元; 王瑜; 邬钦崇; 王孔嘉; 霍裕平. 阳极氧化水解法制备 TiO_2 纳米膜[J]. 物理化学学报, 1996,12(08): 758-760
113. 孙科举 李微雪 冯兆池 李灿. Fe-AlPO_4 -5分子筛的共振拉曼光谱[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 606-610

114. 唐智勇 胡云楚 赵莹 刘述斌. 乙酰基对几种芳胺结构和光谱的影响[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 701-706
115. 刘海洋 冷科 胡军 应晓 徐志广 张启光. A_3 型Corrole中位取代基对其 β 位 $^1\text{H-NMR}$ 的影响[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 694-700
116. 辜家芳 陆春海 陈文凯 许莹 郑金德. 气相和水溶液中铈酰配合物 $\text{UO}_2\text{L}^{2-n^*}_n$ ($\text{L}=\text{F}^-, \text{CO}_3^{2-}, \text{NO}_3^-$; $n=0-6, a=1, 2$)的结构和振动光谱[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 655-660
117. 倪哲明 毛江洪 潘国祥 胥倩 李小年. Pd催化甲醇裂解制氢的反应机理[J]. 物理化学学报, 2009,25(05): 876-882
118. 苏荣 薛卫东 冯勇 王建华 易丹. 8-羟基喹啉铁配合物对锐钛矿型 TiO_2 (101)表面的敏化机理[J]. 物理化学学报, 2009,25(05): 947-952
119. 齐齐 孙岳明 哈涌泉. 1,8-萘酰亚胺类衍生物的结构及紫外-可见吸收光谱[J]. 物理化学学报, 2009,25(06): 1143-1148
120. 葛桂贤 唐光辉 井群 罗有华. CO与 Pd_n ($n=1-8$)团簇的相互作用[J]. 物理化学学报, 2009,25(06): 1195-1200
121. 孙秀良 黄崇品 张傑 陈标华. Beta分子筛中Al的分布和Bronsted酸的酸性强度[J]. 物理化学学报, 2009,25(06): 1136-1142
122. 徐四川 邓圣荣 马丽英 史强 葛茂发 张兴康. 牛视紫红质蛋白质中视黄醛的活性位点[J]. 物理化学学报, 2009,25(07): 1290-1296
123. 扈玫珑 徐盛明 白晨光 徐刚 吕学伟. 水解制备球形 TiO_2 及其水解过程动力学[J]. 物理化学学报, 2009,25(08): 1511-1516
124. 倪碧莲 蔡亚萍 李奕 丁开宁 章永凡. 不同覆盖度下Li原子在Si(001)表面上的吸附构型和电子结构[J]. 物理化学学报, 2009,25(08): 1535-1544
125. 郑铮 刘振明 张亮仁. 一种确定反应中间态几何特征和能量的综合性方法[J]. 物理化学学报, 2009,25(07): 1439-1442
126. 刘洁翔 魏贤 张晓光 王桂香 韩恩山 王建国. NO_x 分子在[Ag]-AIMOR分子筛中的吸附[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 91-96
127. 张材荣 吴有智 陈玉红 陈宏善. 有机染料敏化剂JK16和JK17的几何结构、电子结构及相关性质[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 53-60
128. 张富春 张志勇 张威虎 阎军峰 江妮. $\text{Pb}_x\text{Sr}_{1-x}\text{TiO}_3$ 的电子结构[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 61-66
129. 于艳春 肖鹤鸣. 琥珀酸二油脂磺酸钠的合成、结构及水合作用[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 30-34
130. 赵新新 陶向明 宓一鸣 谭明秋. Pt/Cu(001)- $p(2\times 2)$ -O表面吸附结构的总能计算[J]. 物理化学学报, 2009,25(03): 567-574
131. 李为臻 刘海超. 溶剂热法合成纯单斜和四方晶相氧化锆中的溶剂效应[J]. 物理化学学报, 2008,24(12): 2172-2178
132. 王小露 万辉 管国锋. [EPy]Cl和[EPy]Br离子对的气相和液相结构及阴阳离子间的相互作用[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 2077-2082
133. 李晓艳 曾艳丽 孟令鹏 郑钧钧. $\text{HCHO}+\text{X}$ ($\text{X}=\text{F}, \text{Cl}, \text{Br}$)的反应机理[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 2053-2058
134. 毛江洪 倪哲明 潘国祥 胥倩. Cu催化水煤气的变换反应机理[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 2059-2064
135. 蒋仕宇 滕波涛 鲁继青 刘雪松 杨培芳 杨飞勇 罗孟飞. 甲醛在 $\text{CeO}_2(111)$ 表面吸附的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 2025-2031
136. 李来才 王译伟 田安民. 甲醇在Pt-Mo(111)/C表面上的吸附[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 2013-2018
137. 郑金德 陆春海 孙宝珍 陈文凯. N_2 分子在 $\text{UO}(100)$ 表面的吸附与解离[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 1995-1999
138. 魏洪源 罗顺忠 刘国平 熊晓玲 宋宏涛. H原子在完美 δ -Pu金属体相中的扩散行为[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 1964-1968
139. 胡燕飞 孔凡杰 周春. 3C-SiC的结构和热力学性质[J]. 物理化学学报, 2008,24(10): 1845-1849
140. 干琴芳 倪碧莲 李奕 丁开宁 章永凡. CO分子在 $\text{TiC}(001)$ 表面上的吸附构型与电子结构[J]. 物理化学学报, 2008,24(10): 1850-1858
141. 陈新 李瑛 蒋青. 几种 $(\text{C}^{\wedge}\text{N})\text{Pt}^{\text{II}}\text{O}$ 型配合物的电子结构和紫外-可见吸收光谱[J]. 物理化学学报, 2008,24(10): 1797-1802
142. 李宗宝 姚凯伦 刘祖黎. 有机-无机杂化化合物 $[\text{Cu}(\mu\text{-cbdca})(\text{H}_2\text{O})]_n$ 的电子结构及铁磁性[J]. 物理化学学报, 2008,24(09): 1681-1684
143. 黄永丽 刘志平. 氢和硫原子在Pd、Au和Cu及PdAu、PdCu合金(111)表面吸附的密度泛函研究[J]. 物理化学学报, 2008,24(09): 1662-1668

144. 张土国;张立超;杨频.胞嘧啶与一氧化氮复合物的结构与性质[J].物理化学学报,2008,24(09):1637-1642
145. 李会学;王晓峰;董小宁;袁焜;朱元成;萧泰.烟酸二聚体的结构与性质[J].物理化学学报,2009,25(01):161-168
146. 刘俊锋;刘永春;薛莉;余运波;贺泓. Al_2O_3 上羰基硫常温催化水解的氧中毒机理[J].物理化学学报,2007,23(07):997-1002
147. 刘海峰;闫华;刘志勇;王少龙.三氟化氯和水反应的密度泛函理论研究[J].物理化学学报,2007,23(07):1099-1104
148. 林英武;王中华;聂长明;倪峰云.取代基对吡吩结构和性质的影响[J].物理化学学报,2007,23(10):1594-1598
149. 梁云霄;水淼;李榕生.硼/氮掺杂富勒烯 C_{20} 的结构和稳定性[J].物理化学学报,2007,23(10):1647-1651
150. 徐灿;张小芳;陈亮;朱莉芳;张荣君.二氧化硅纳米线中振动模式奇偶振荡的理论研究[J].物理化学学报,2007,23(11):1733-1737
151. 王罗新;刘勇;庾新林;李松年;王晓工. H^+ 、 NH_4^+ 对HMX的N— NO_2 键解离能的影响[J].物理化学学报,2007,23(10):1560-1564
152. 李会学;唐惠安;杨声;萧泰.3-(3'-吡啶基)-6-芳基-1,2,4-三唑并[3,4-b]-1,3,4-噻二唑衍生物基态和激发态性质[J].物理化学学报,2007,23(11):1781-1786
153. 姜勇;储伟;江成发;王耀红. Pd_n ($n=1-7$)团簇及其与甲烷相互作用的密度泛函理论研究[J].物理化学学报,2007,23(11):1723-1727
154. 潘国祥;倪哲明;李小年.类水滑石主体层板与客体 CO_3^{2-} 、 H_2O 间的超分子作用[J].物理化学学报,2007,23(08):1195-1200
155. 周俊红;曾艳丽;张雪英;孟令鹏;郑世钧. IClO_2 异构化反应机理及电子密度拓扑研究[J].物理化学学报,2007,23(08):1229-1234
156. 张丽敏;范广涵;丁少锋.Mg、Zn掺杂AlN电子结构的第一性原理计算[J].物理化学学报,2007,23(10):1498-1502
157. 王春;杜新贞;丁宁;杨燕;卢小泉;陈慧.水杨酸-2'-乙基己基酯在胶束中的增溶位点[J].物理化学学报,2007,23(09):1337-1341
158. 王艳宾;马文瑾;张静 武海顺. C_nAl ($n=2-11$)团簇的结构特征与稳定性[J].物理化学学报,2007,23(06):873-876
159. 杨作银;周宏伟;张敬畅;曹维良.Mg-Al类水滑石层板结构中Al/Mg比与稳定性的关系[J].物理化学学报,2007,23(06):795-800
160. 胡启山;刘俊伶;李来才;田安民.钴原子催化活化乙烷的反应机理[J].物理化学学报,2007,23(06):916-920
161. 王溢磊;吴国是.香豆素衍生物的荧光发射能计算及XC泛函的合理选择[J].物理化学学报,2007,23(12):1831-1838
162. 李磊;桑革;张鹏程;蒋刚. $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 阻氢微观机制研究[J].物理化学学报,2007,23(12):1912-1916
163. 徐伯华;李来才;王欣;田安民. N_5H_5 异构体的结构与稳定性的理论研究[J].物理化学学报,2008,24(01):67-73
164. 陈琨;范广涵;章勇;丁少锋.N掺杂p-型ZnO的第一性原理计算[J].物理化学学报,2008,24(01):61-66
165. 王溢磊;吴国是.ESIPT和TICT荧光发射的电子结构特征及发射能计算[J].物理化学学报,2008,24(04):552-560
166. 贝逸翎;主沉浮;刘庆阳;戚桂斌.卤代硅烷(R_3SiX)与 NR'_3 形成五配位硅化合物的加成反应[J].物理化学学报,2008,24(02):217-222
167. 纪永军;武海顺;张富强;贾建峰. $(\text{MN})_n\text{H}_m$ ($\text{M}=\text{Ga}, \text{In}; n=1-4; m=1, 2$)团簇的结构与稳定性[J].物理化学学报,2008,24(02):257-262
168. 王朝杰;蔡跃飘.铁原子与氮分子间的相互作用——单侧双配位构型[J].物理化学学报,2008,24(02):289-295
169. 胡海泉;李恒帅;崔守鑫;王文军.Fe/Cr超晶格的电子结构和磁性质[J].物理化学学报,2007,23(06):846-850
170. 张静;王艳宾;武海顺. $(\text{BCO})_n^+$ ($n=1-12$)团簇的结构与稳定性[J].物理化学学报,2007,23(05):733-737
171. 李思殿;郭巧凌;苗常青;任光明.含平面配位碳的过渡金属羧配合物 $\text{M}_n\text{H}_n\text{C}$ 密度泛函理论研究[J].物理化学学报,2007,23(05):743-745
172. 蒲敏;王海霞;冯霄;吴东;孙予罕.DFT法研究3-羟基丙烯醛的双键旋转异构反应机理[J].物理化学学报,2002,18(06):522-526
173. 于海涛;池玉娟;傅宏刚;黄旭日;孙家锤. HBO_2 异构体的结构和相对稳定性[J].物理化学学报,2002,18(01):87-90
174. 李来才;周红平;田安民.F原子与臭氧反应机理的量子化学研究 [J].物理化学学报,2002,18(01):59-61

175. 谭金芝;肖鹤鸣;贡雪东;李金山.硝酸甲酯分子间相互作用的DFT和*ab initio*比较[J]. 物理化学学报, 2002,18(04): 307-314
176. 徐文媛;刘够生;彭以元;洪三国.AM1研究甲酰和苯甲酰叠氮的热分解反应[J]. 物理化学学报, 1998,14(07): 669-672
177. 洪三国;彭以元;朱时来;王牲.邻乙酰基环酮热分解反应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1999,15(02): 186-189
178. 傅爱萍;杜冬梅;周正宇;俞庆森.金属原子(离子)-苯配合物的电子转移反应[J]. 物理化学学报, 2000,16(04): 317-324
179. 仇永清;刘春光;陈徽;苏忠民;杨国春;王荣顺.具有三维结构的Co(II)配合物二阶非线性光学性质的DFT研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(07): 836-839
180. 张志强;屈一新;任慧.纳米二氧化硅物理吸附乙醇的密度泛函研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(07): 820-825
181. 王利江;张聪杰. $B_2C_n^+(n=1\sim 9)$ 团簇的结构及其稳定性[J]. 物理化学学报, 2006,22(06): 726-731
182. 李永红;洪三国;冯文林;雷鸣.3-羟基-2-吡啶亚胺异构反应的机理[J]. 物理化学学报, 2000,16(11): 992-996
183. 陈波珍;黄明宝.HCS自由基超精细结构的密度泛函理论计算[J]. 物理化学学报, 1999,15(08): 673-675
184. 李权;刘晓亚;高涛;朱正和;傅依备;汪小琳;孙颖. PuO^{n+} 的势能函数的稳定性[J]. 物理化学学报, 2000,16(11): 987-991
185. 默丽欣;曾艳丽;郑世钧;孟令鹏. BH_2^+ 与 H_2O 反应机理的量子拓扑研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(06): 706-711
186. 张晓清;贾建峰;武海顺;裴晓琴.羰基硼化合物 $(BCO)_n(n=1\sim 12)$ 的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(06): 684-690
187. 贡雪东;肖鹤鸣.丁二酰亚胺的结构、振动频率和热力学性质计算[J]. 物理化学学报, 1999,15(08): 688-692
188. 陈波珍;黄明宝;颜达予. $(CH_2)_2N$ 和 $(CH_3)_2NH^+$ 的密度泛函理论计算[J]. 物理化学学报, 1999,15(06): 495-499
189. 周立新;莽朝永;章永凡.1,2-二硫方酸的气相酸性和芳香性[J]. 物理化学学报, 2000,16(01): 15-21
190. 喻典;陈志达;王繁;李述周.元素电负性和硬度的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2001,17(01): 15-22
191. 郭森立;侯廷军;徐筱杰;张斌;朱道本.一个新BEDT-TTF电荷转移盐的晶体结构预测[J]. 物理化学学报, 2002,18(04): 289-91
192. 李会英;冯文林;冀永强;徐振峰;雷鸣. $CH_2O+O(^3P)\rightarrow CHO+OH$ 反应途径和变分速率常数 [J]. 物理化学学报, 2002,18(05): 446-450
193. 钱俊红;张晓红;郭荣.CTAB/ $n-C_5H_{11}OH/H_2O$ 体系对青霉素G钾盐水解的抑制作用[J]. 物理化学学报, 2000,16(01): 80-86
194. 李权;徐成刚;王红艳;朱正和. PuH_2 气态分子热力学稳定性的理论研究[J]. 物理化学学报, 2002,18(10): 952-955
195. 陈文凯;许娇;章永凡;周立新;李俊箴.2-羟基吡啶质子转移过程的理论研究[J]. 物理化学学报, 2002,18(09): 802-807
196. 李凤仪;徐文媛;余军文.二氯甲基硅烷醇解的量化计算[J]. 物理化学学报, 2003,19(04): 338-341
197. 张远;曹爱年;孙岳明;刘举正;顾璠.NO双分子和二聚体与 Cu_2 作用的理论计算[J]. 物理化学学报, 2003,19(03): 193-197
198. 卢秀慧;刘成卜;邓从豪.二氟硅烯与甲醛环加成反应机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 1999,15(01): 78-81
199. 曹阳;吕春绪;吕早生;蔡春;魏运洋;李斌栋.硝酰阳离子和二氧化氮分子的弯曲变形研究[J]. 物理化学学报, 2002,18(06): 527-531
200. 杨丽娟;孟令鹏;曾艳丽;郑世钧. CH_2NH 与 $O(^3P)$ 反应的量子化学及电子密度拓扑研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(03): 311-316
201. 蔡建秋;陶向明;谭明秋.氢原子吸附的Cu(100)表面原子结构和电子态[J]. 物理化学学报, 2007,23(03): 355-360
202. 王云海;刘永东;罗云敬;张伟;钟儒刚.过氧亚硝酸与苯酚的反应机理理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(10): 1266-1271
203. 洪三国.取代基对 α -氨基乙腈热解反应影响的研究[J]. 物理化学学报, 1993,9(03): 305-310
204. 刘若庄;马思渝;李宗和. CH 与 H_2 分子反应动力学及选态反应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1993,9(02): 155-160
205. 韩恩山;武昭华;陈宗淇;张玉苓;朱令芝.均分散氯化氧铋胶体粒子制备[J]. 物理化学学报, 1993,9(01): 94-98

206. 张秋禹; 严宝珍; 郭洪猷; 王作新; 徐广智. 用 ^{31}P NMR研究硫代磷酸酯水解反应历程[J]. 物理化学学报, 1992,8(02): 232-235
207. 李瑞芳; 尚贞峰; 许秀芳; 王贵昌. 扶手椅型单壁碳纳米管生长机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(11): 1388-1392
208. 李庆明; 傅孝愿; 张敬畅; 曹维良. HCN \rightarrow HNC异构化反应过渡态附近的拓扑特性[J]. 物理化学学报, 1992,8(06): 724-727
209. 张玉亭; 于谏. 均匀球形 $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ 胶体粒子的形成机理[J]. 物理化学学报, 1992,8(06): 814-818
210. 章本礼; 谭嫦娥; 高振衡. 特殊盐效应对水解反应催化常数测定的影响[J]. 物理化学学报, 1991,7(01): 92-96
211. 杨振; 徐志军; 杨晓宁. 基于密度泛函理论研究二元排斥Yukawa流体的表面结构性质[J]. 物理化学学报, 2006,22(12): 1460-1465
212. 张树强; 王雅琼; 郑旭明. 硝基烃光异构化反应的密度泛函理论计算[J]. 物理化学学报, 2006,22(12): 1489-1494
213. 李权; 李德华; 盛勇; 朱正和. $\text{PdY}^{n\pm}$ ($n=0, 1, 2, 3$) 分子离子的结构与稳定性[J]. 物理化学学报, 2006,22(12): 1516-1519
214. 马文瑾; 王艳宾; 张静; 武海顺. BmN ($m=2\sim 9$) 团簇结构的特征与稳定性[J]. 物理化学学报, 2007,23(02): 169-172
215. 刘乐燕; 耿志远; 赵存元; 王永成; 李朝晖. 气相中烯丙基负离子与 N_2O 反应机理[J]. 物理化学学报, 2007,23(02): 217-222
216. 孟现美; 黄晓明; 王传奎. 有机杂环分子的双光子吸收特性[J]. 物理化学学报, 2007,23(02): 228-231
217. 田蒙奎; 蒋丽; 上官文峰; 王世杰; 欧阳自远. 可见光响应光催化剂 $\text{K}_4\text{Ce}_2\text{Ta}_{10}\text{O}_{30}$ 、 $\text{K}_4\text{Ce}_2\text{Nb}_{10}\text{O}_{30}$ 及其固溶体的电子结构[J]. 物理化学学报, 2007,23(04): 466-472
218. 蒋仕宇; 滕波涛; 袁金焕; 郭晓伟; 罗孟飞. CO在 $\text{CeO}_2(111)$ 表面的吸附与氧化[J]. 物理化学学报, 2009,25(08): 1629-1634
219. 梁晓静; 崔丽; 吴德印; 田中群. 腺嘌呤和质子化腺嘌呤的结构和振动光谱[J]. 物理化学学报, 2009,25(08): 1605-1610
220. 张子英; 杨德林; 刘云虎; 曹海滨; 邵建新; 井群. BaTiO_3 的电子结构和光学性质[J]. 物理化学学报, 2009,25(09): 1731-1736
221. 吴阳; 张甜甜; 于宁. 1-乙基-3-甲基咪唑阳离子与天冬酰胺阴离子的相互作用[J]. 物理化学学报, 2009,25(08): 1689-1696
222. 杨相艳; 张宜恒; 丁兰; 汪汉卿. 一种天然产物Wangzaozin A的细胞毒活性[J]. 物理化学学报, 2009,25(09): 1749-1755
223. 陈毓敏; 邓珂; 裘晓辉; 王琛. 一氧化碳共吸附法确定叔丁胺分子在 $\text{Cu}(111)$ 表面的吸附位[J]. 物理化学学报, 2009,25(08): 1485-1489
224. 原现瑞; 尚振华; 李润岩; 刘英华; 陈晓霞; 张慧丽; 修勇. N' -苄基酰胺分子的氮-氮键旋转位阻及分子构象[J]. 物理化学学报, 2009,25(09): 1785-1790
225. 罗姗姗; 仇永清; 刘晓东; 刘春光; 苏忠民. 含有噻唑生色团的Y-型有机分子的二阶非线性光学性质[J]. 物理化学学报, 2009,25(09): 1867-1873
226. 张美一; 何广智; 丁程程; 陈灏; 潘纲. As(V)在 TiO_2 表面的吸附机理[J]. 物理化学学报, 2009,25(10): 2034-2038
227. 梁锦霞; 贾文红; 张聪杰; 曹泽星. 包含平面四配位和五配位碳原子的特殊硼碳化合物[J]. 物理化学学报, 2009,25(09): 1847-1852
228. 张福兰; 李来才; 田安民. 乙烷在 $\text{Ni}(111)$ 表面的吸附和分解[J]. 物理化学学报, 2009,25(09): 1883-1889
229. 詹卫仲; 潘石; 李源作; 陈茂笃. 二氢吡啶类染料用于染料敏化太阳能电池光敏剂的比较[J]. 物理化学学报, 2009,25(10): 2087-2092
230. 朱玥; 蒲敏; 何静; EVANS David G.. 偶氮苯磺酸衍生物的光致顺反异构化机理[J]. 物理化学学报, 2009,25(11): 2296-2304
231. 赵新新; 陶向明; 宓一鸣; 陈戎; 谭明秋. $\text{Ni}(110)\text{-}p2mg(2\times 1)\text{-CO}$ 表面的几何结构和电子态[J]. 物理化学学报, 2009,25(11): 2305-2311
232. 杨宗猷; 于小虎; 马东伟. 氧原子在具有Pt皮肤的 $\text{Pt}_3\text{Ni}(111)$ 表面的吸附和扩散[J]. 物理化学学报, 2009,25(11): 2329-2335
233. 倪哲明; 胥倩; 姚萍; 毛江洪; 刘晓明. 层间水含量对 $\text{Mg}_3\text{Al-LDHs-Cl}$ 力学特性的影响[J]. 物理化学学报, 2009,25(11): 2325-2328
234. 吕存琴; 凌开成; 王贵昌. 甲胺在清洁及磷改性 $\text{Mo}(100)$ 表面的解离[J]. 物理化学学报, 2009,25(11): 2336-2342
235. 刘洁翔; 魏贤; 张晓光; 韩恩山. Cu-[M']MOR 和 Ag-[M']MOR ($\text{M}'=\text{B, Al, Ga, Fe}$)的酸性[J]. 物理化学学报, 2009,25(10): 2123-2129

236. 陈锦灿, 陈兰美, 廖思燕, 郑康成. 抗癌性钌配合物[HL][*trans*-Ru^{III}Cl₄L₂](L=2-NH₂-5-Me-STz)的水解机理[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
237. 左志军, 黄伟, 韩培德, 李志红.CO和H₂在Cu(111)面的吸附和溶剂化效应[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
238. 陈日耀, 陈震, 郑曦, 陈晓, 黄彩霞.CoPc(COOH)₈-SA/mCS双极膜的制备及表征[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
239. 刘建才, 张新明, 陈明安, 唐建国, 刘胜胆. 密度泛函理论预测微量元素在Al(100)表面的偏聚[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
-