

## 牛视紫红质蛋白质中视黄醛的活性位点

徐四川, 邓圣荣, 马丽英, 史强, 葛茂发, 张兴康

云南大学化学科学与工程技术学院生命起源研究室, 自然资源药物化学教育部重点实验室, 昆明 650091|中国科学院化学研究所, 北京分子科学国家实验室, 分子动态与稳态结构国家重点实验室, 北京 100190

摘要:

视紫红质蛋白是一个跨膜蛋白, 视黄醛(RET)在该蛋白中的活性结合位点涉及到视觉过程机理, 与一些眼科疾病病理有关. 基于牛视紫红质蛋白1U19的蛋白质晶体结构数据, 采用密度泛函理论的B3LYP方法计算RET-Lys296残基与视黄醛分子周围半径为0.6 nm的空间范围30个氨基酸残基相互作用和结合能. 数值显示1U19蛋白中的残基Glu113、Glu181和Glu122是质子化的RET-Lys296残基的活性结合位点, 结合能分别为-333.38、-205.67和-194.56 kJ·mol<sup>-1</sup>. 这些氨基酸残基带有一个负电荷, 与质子化的RET-Lys296残基发生强烈的离子静电相互作用. 另外几个残基Ala292、Cys187、Phe293、Pro291以及Trp265等与质子化RET-Lys296残基也有相互吸引作用. 当RET-Lys296残基非质子化, 上述相互作用消失, 促使视黄醛分子与视蛋白分离. 研究发现残基Glu113和Glu181周围各自有一个结晶水分子通过双氢键形式起着稳定作用.

关键词: 视紫红质 视黄醛 1U19 活性位点 密度泛函理论

收稿日期 2009-01-12 修回日期 2009-03-18 网络版发布日期 2009-04-14

通讯作者: 徐四川, 史强 Email: sichuan@ynu.edu.cn; qshi@iccas.ac.cn

### 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<sub>x</sub>P<sub>y</sub> (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. 陈锦灿; 李俊; 吴文娟; 郑康成. 系列异构配合物Ru(azpy)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>的结构与抗癌活性[J]. 物理化学学报, 2006, 22(04): 391-396
7. 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
8. 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
9. 薛卫东; 张广丰; 朱正和; 汪小琳; 罗德礼; 邹乐西; 孙颖. CO<sub>2</sub>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
10. 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
11. 刘幼成; 蒋刚; 朱正和. NX(X=F, Cl, Br)分子结构与极化函数f轨道的作用 [J]. 物理化学学报, 2002, 18(02): 117-121
12. 艾洪奇; 步宇翔. 黄金规则用于N<sub>3</sub><sup>-</sup>+N<sub>3</sub>体系电子转移的研究[J]. 物理化学学报, 2001, 17(03): 210-215
13. 王遵尧; 肖鹤鸣; 李金山. F+Cl<sub>2</sub>->ClF+Cl和Cl'F+Cl->Cl'+ClF的反应机理[J]. 物理化学学报, 2001, 17(02): 107-110
14. 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
15. 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
16. 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
17. 林伟; 章永凡; 李奕; 陈勇; 李俊箴. SnO<sub>2</sub>(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
18. 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
19. 吕玲玲; 王永成. Au<sup>+</sup>(<sup>1</sup>S, <sup>3</sup>D)与N<sub>2</sub>O(<sup>1</sup>Σ<sup>+</sup>)反应机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006, 22(03): 265-269

扩展功能

本文信息

PDF(785KB)

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

▶ 视紫红质

▶ 视黄醛

▶ 1U19

▶ 活性位点

▶ 密度泛函理论

本文作者相关文章

▶ 徐四川

▶ 邓圣荣

▶ 马丽英

▶ 史强

▶ 葛茂发

▶ 张兴康

20. 张敬来; 王连宾; 吴文鹏; 曹泽星. 线性簇合物 $\text{SC}_2\text{S}_n\text{S}^{2-}$  ( $n=1\sim 12$ ) 电子吸收光谱[J]. 物理化学学报, 2004, 20(12): 1428-1433
21. 耿志远; 王永成; 汪汉卿. 锗烯 $\text{X}_2\text{Ge}$  ( $\text{X}=\text{H}, \text{CH}_3, \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}$ ) 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
22. 徐灿; 朱莉芳; 高晨阳; 曹娟. 硅氧团簇 $(\text{SiO}_2)_n\text{O}_2\text{H}_4$  的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2006, 22(02): 152-155
23. 黄飙; 张家兴; 李锐; 申自勇; 侯士敏; 赵兴钰; 薛增泉; 吴全德.  $\text{Al-C}_{60}$ -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
24. 马文瑾; 武海顺.  $\text{AlmN}_2^-$  ( $m=1\sim 8$ ) 团簇的结构与稳定性[J]. 物理化学学报, 2006, 22(02): 178-182
25. 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
26. 高立国; 王永成; 耿志远; 陈晓霞; 吕玲玲; 戴国梁; 王冬梅. 气相中 $\text{Sc}^+$ 和 $\text{Ti}^+$ 与 $\text{CS}_2$ 反应的计算研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(10): 1102-1107
27. 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
28. 方冉; 耿志远; 王永成; 张兴辉; 王冬梅; 高立国; 陈晓霞. 锗烯 $\text{X}_2\text{Ge}$ 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
29. 张材荣; 陈宏善; 陈玉红; 冯旺军; 李维学; 许广济; 寇生中.  $\text{Al}_8\text{P}_8$  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
30. 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 $\text{Zn}^{2+}$ 在水锰矿表面的吸附和沉淀[J]. 物理化学学报, 2005, 21(12): 1378-1383
31. 朱瑜; 蒋刚; 于桂凤; 朱正和; 王和义; 傅依备.  $\text{N}_2$ 在Pd金属表面的吸附行为[J]. 物理化学学报, 2005, 21(12): 1343-1346
32. 陈文凯; 曹梅娟; 刘书红; 许莹; 李奕; 李俊篔. 苯分子在 $\text{Cu}(100)$ 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
33. 李会英; 蒲敏; 陈标华. DFT法研究分子筛催化 $\text{trans-2-}$ 丁烯的双键异构[J]. 物理化学学报, 2005, 21(08): 898-902
34. 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
35. 王艳花; 邹建卫; 胡桂香; 郑柯文; 俞庆森. 吡咯啉醌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
36. 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
37. 蒲敏; 陈标华; 李会英; 刘坤辉. DFT法研究离子液中 $\text{EMIM}^+$ 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
38. 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
39. 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
40. 周俊红; 曾艳丽; 孟令鹏; 郑世钧.  $\text{ClO}$ 与 $\text{ClO}$ 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
41. 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
42. 徐艺军; 李俊篔; 章永凡; 陈文凯.  $\text{O}_2$ 在 $\text{MgO}(001)$ 完整和缺陷表面上的吸附[J]. 物理化学学报, 2003, 19(05): 414-418
43. 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
44. 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
45. 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
46. 胥倩; 倪哲明; 潘国祥; 陈丽涛; 刘婷. 水滑石限域空间中 $\text{Cl}^-$ 与 $\text{H}_2\text{O}$ 的超分子作用[J]. 物理化学学报, 2008, 24(04): 601-606
47. 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
48. 李志伟; 李香芝; 许先芳; 赵存元; 陈六平.  $\text{NaP}_4$ 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
49. 孙慧卿; 丁少锋; 王雨田; 邓贝; 范广涵.  $\text{CdO}$ 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
50. 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
51. 马文瑾; 张献明; 许小红; 王艳宾; 武海顺.  $\text{C}_n\text{Al}_2$  ( $n=1-10$ ) 团簇的结构特征与稳定性[J]. 物理化学学报, 2008, 24(08): 1477-1480
52. 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
53. 张材荣; 陈宏善; 陈玉红; 魏智强; 蒲忠胜. 二甲基富勒烯衍生物[6,6]-苯基- $\text{C}_{61}$ 丁酸甲酯的密度泛函研究[J]. 物理化学学报, 2008, 24(08): 1353-1358
54. 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

55. 刘述斌. 概念密度泛函理论及近来的某些进展[J]. 物理化学学报, 2009,25(03): 590-600
56. 罗小艳; 贾文红; 张聪杰.  $\text{In}_n\text{Na}$ 和 $\text{In}_n\text{Na}^+$  ( $n=2-8$ )的团簇结构和电子性质[J]. 物理化学学报, 2009,25(02): 261-266
57. 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
58. 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
59. 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
60. 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
61. 吴文娟; 赖榕; 郑康成; 云逢存. 抗癌性咪唑啉啉生物体的定量构效关系[J]. 物理化学学报, 2005,21(01): 28-32
62. 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
63. 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
64. 蒲敏; 刘坤辉; 李会英; 陈标华. DFT法研究离子液中EMIM<sup>+</sup>催化丁烯双键异构反应机理[J]. 物理化学学报, 2004,20(08): 826-830
65. 吕海港; 黎乐民. 表观价态异常分子 $\text{EuS}_2$ 和 $\text{Eu}_2\text{S}$ 的泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(05): 413-418
66. 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
67. 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
68. 李中华; 王锐; 陈振宁; 韦永德; 周百斌. 用密度泛函方法研究 $\alpha\text{-}[\text{XMo}_{12}\text{O}_{40}]^{n-}$ 杂多阴离子的振动光谱[J]. 物理化学学报, 2004,20(11): 1329-1334
69. 徐艺军; 李俊钱; 章永凡.  $\text{O}_2$ 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
70. 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
71. 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
72. 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
73. 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
74. 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
75. 孙科举; 李微雪; 冯兆池; 李灿. Fe- $\text{AlPO}_4$ -5分子筛的共振拉曼光谱[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 606-610
76. 唐智勇; 胡云楚; 赵莹; 刘述斌. 氰乙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
77. 刘海洋; 冷科; 胡军; 应晓; 徐志广; 张启光.  $\text{A}_3$ 型Corrole中位取代基对其 $\beta$ 位 $^1\text{H-NMR}$ 的影响[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 694-700
78. 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 $\text{UO}_2\text{L}^{2-n^*a}$  ( $\text{L}=\text{F}^-, \text{CO}_3^{2-}, \text{NO}_3^-; n=0-6, a=1, 2$ )的结构和振动光谱[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 655-660
79. 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
80. 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 $\text{TiO}_2$ (101)表面的敏化机理[J]. 物理化学学报, 2009,25(05): 947-952
81. 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
82. 葛桂贤; 唐光辉; 井群; 罗有华. CO与 $\text{Pd}_n$  ( $n=1-8$ )团簇的相互作用[J]. 物理化学学报, 2009,25(06): 1195-1200
83. 孙秀良; 黄崇品; 张傑; 陈标华. Beta分子筛中Al的分布和Brønsted酸的酸性强度[J]. 物理化学学报, 2009,25(06): 1136-1142
84. 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
85. 刘洁翔; 魏贤; 张晓光; 王桂香; 韩恩山; 王建国.  $\text{NO}_x$ 分子在[Ag]-AIMOR分子筛中的吸附[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 91-96
86. 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
87. 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
88. 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
89. 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

90. 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
91. 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
92. 蒋仕宇; 滕波涛; 鲁继青; 刘雪松; 杨培芳; 杨飞勇; 罗孟飞. 甲醛在CeO<sub>2</sub>(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
93. 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
94. 郑金德; 陆春海; 孙宝珍; 陈文凯. N<sub>2</sub>分子在UO(100)表面的吸附与解离[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 1995-1999
95. 魏洪源; 罗顺忠; 刘国平; 熊晓玲; 宋宏涛. H原子在完美 $\delta$ -Pu金属体相中的扩散行为[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 1964-1968
96. 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
97. 干琴芳; 倪碧莲; 李奕; 丁开宁; 章永凡. CO分子在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
98. 陈新; 李瑛; 蒋青. 几种(C<sup>N</sup>)Pt<sup>II</sup>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
99. 李宗宝; 姚凯伦; 刘祖黎. 有机-无机杂化化合物[Cu( $\mu$ -cbdca)(H<sub>2</sub>O)]<sub>n</sub>的电子结构及铁磁性[J]. 物理化学学报, 2008,24(09): 1681-1684
100. 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
101. 张士国; 张立超; 杨频. 胞嘧啶与一氧化碳复合物的结构与性质[J]. 物理化学学报, 2008,24(09): 1637-1642
102. 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
103. 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
104. 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
105. 梁云霄; 水淼; 李榕生. 硼/氮掺杂富勒烯C<sub>20</sub>的结构和稳定性[J]. 物理化学学报, 2007,23(10): 1647-1651
106. 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
107. 王罗新; 刘勇; 虞新林; 李松年; 王晓工. H<sup>+</sup>、NH<sub>4</sub><sup>+</sup>对HMX的N—NO<sub>2</sub>键解离能的影响[J]. 物理化学学报, 2007,23(10): 1560-1564
108. 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
109. 姜勇; 储伟; 江成发; 王耀红. Pd<sub>n</sub>(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
110. 潘国祥; 倪哲明; 李小年. 类水滑石主体层板与客体CO<sub>3</sub><sup>2-</sup>、H<sub>2</sub>O间的超分子作用[J]. 物理化学学报, 2007,23(08): 1195-1200
111. 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
112. 王艳宾; 马文瑾; 张静 武海顺. C<sub>n</sub>Al (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
113. 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
114. 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
115. 李磊; 桑革; 张鹏程; 蒋刚.  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>阻氢微观机制研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(12): 1912-1916
116. 徐伯华; 李来才; 王欣; 田安民. N<sub>5</sub>H<sub>5</sub>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
117. 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
118. 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
119. 贝逸翎; 主沉浮; 刘庆阳; 戚桂斌. 卤代硅烷(R<sub>3</sub>SiX)与NR'<sub>3</sub>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
120. 纪永军; 武海顺; 张富强; 贾建峰. (MN)<sub>n</sub>H<sub>m</sub> (M=Ga, 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
121. 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
122. 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[J]. 物理化学学报, 2007,23(06): 846-850
123. 张静; 王艳宾; 武海顺. (BCO)<sup>+</sup><sub>n</sub> (n=1-12)团簇的结构与稳定性[J]. 物理化学学报, 2007,23(05): 733-737
124. 李思殿; 郭巧凌; 苗常青; 任光明. 含平面配位碳的过渡金属烃配合物M<sub>n</sub>H<sub>n</sub>C密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(05): 743-745



125. 蒲敏;王海霞;冯霄;吴东;孙子罕.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
126. 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
127. 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
128. 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
129. 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
130. 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
131. 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
132. 李权;刘晓亚;高涛;朱正和;傅依备;汪小琳;孙颖. $PuO_n^{n+}$ 的势能函数的稳定性[J]. 物理化学学报, 2000,16(11): 987-991
133. 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
134. 计明娟;杨鹏程.甲硫氨酸-脑啡肽的活性位点[J]. 物理化学学报, 2000,16(07): 596-600
135. 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
136. 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
137. 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
138. 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
139. 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
140. 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
141. 陈文凯;许娇;章永凡;周立新;李俊钺.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
142. 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
143. 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
144. 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
145. 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
146. 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
147. 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
148. 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
149. 李权;李德华;盛勇;朱正和. $PdY^{n+}(n=0, 1, 2, 3)$ 分子离子的结构与稳定性[J]. 物理化学学报, 2006,22(12): 1516-1519
150. 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
151. 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
152. 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 $K_4Ce_2Ta_{10}O_{30}$ 、 $K_4Ce_2Nb_{10}O_{30}$ 及其固溶体的电子结构[J]. 物理化学学报, 2007,23(04): 466-472
153. 蒋仕宇;滕波涛;袁金焕;郭晓伟;罗孟飞.CO在 $CeO_2(111)$ 表面的吸附与氧化[J]. 物理化学学报, 2009,25(08): 1629-1634
154. 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
155. 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, 0,(): 0-0
156. 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
157. 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, 0,(): 0-0
158. 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Cu(111)表面的吸附位[J]. 物理化学学报, 2009,25(08): 1485-1489
159. 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, 0,(): 0-0
160. 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

161. 张美一, 何广智, 丁程程, 陈灏, 潘纲. As(V)在TiO<sub>2</sub>表面的吸附机理[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0

162. 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, 0,(): 0-0

---