

抗癌性钌配合物[HL][*trans*-Ru^{III}Cl₄L₂](L=2-NH₂-5-Me-STz)的水解机理

陈锦灿, 陈兰美, 廖思燕, 郑康成

广东医学院分析中心, 广东 湛江 524023; 中山大学化学与化学工程学院, 广州 510275; 广东医学院药学院, 广东 湛江 524023

摘要:

用量子化学密度泛函理论(DFT), 并结合导体极化连续模型(CPCM)研究了具有潜在抗肿瘤活性的“Keppler型”钌配合物*trans*-[Ru^{III}Cl₄(2-NH₂-5-Me-STz)₂](1)的水解反应过程. 首先, 在UB3LYP/(LanL2DZ+6-31G(d))理论水平上对水解反应中各平衡构型在气相条件下的有关结构进行全几何优化及振动频率分析; 然后, 在更高的基组水平LanL2DZ(f)+6-311++G(3df,2dp)上对优化的结构进行单点能计算, 并考虑溶剂效应. 计算得到水解反应过程中相应的结构特征和详细的反应势能面. 对于第一步水解, 液相中配合物1的活化能垒为92.9 kJ·mol⁻¹, 与已经报道的配合物*trans*-[Ru^{III}Cl₄(2-NH₂-Tz)₂](2)的活化能垒(96.3 kJ·mol⁻¹)相接近, 并与实验结果相符. 对于第二步水解, 反应在热力学上优先生成顺式双水解产物, 恰如顺铂的水解反应机理一样, 存在着所谓“顺式效应”, 即生成的顺式水解产物有利于其与生物分子靶标的键合, 因此, 顺式双水解产物在生物反应中有望成为重要的前体药物. 本文研究结果有助于深入理解抗癌性Ru(III)配合物与相关生物靶标的作用机理.

关键词: 密度泛函理论 Ru(III)配合物 抗癌活性 水解 导体极化连续模型

收稿日期 2009-06-12 修回日期 2009-08-06 网络版发布日期 2009-09-15

通讯作者: 郑康成 Email: ceszkc@mail.sysu.edu.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. 郭彩虹; 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; 巩育军; 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. 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
9. 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
10. 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
11. 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
12. 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
13. 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
14. 水森; 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
15. 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
16. 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-

扩展功能

本文信息

Supporting info

[PDF\(2019KB\)](#)

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

▶ [密度泛函理论](#)

▶ [Ru\(III\)配合物](#)

▶ [抗癌活性](#)

▶ [水解](#)

▶ [导体极化连续模型](#)

本文作者相关文章

▶ [陈锦灿](#)

▶ [陈兰美](#)

▶ [廖思燕](#)

▶ [郑康成](#)

17. 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
18. 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
19. 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
20. 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
21. 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
22. 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
23. 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
24. 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
25. 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
26. 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
27. 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
28. 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
29. 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
30. 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
31. 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
32. 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
33. 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
34. 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
35. 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
36. 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
37. 章应辉;阮文娟;吴扬.密度泛函理论研究5-单苯基卟啉分子的几何结构和拉曼光谱[J]. 物理化学学报, 2005,21(12): 1390-1394
38. 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
39. 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
40. 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
41. 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
42. 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
43. 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
44. 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
45. 王艳花;邹建卫;胡桂香;郑柯文;俞庆森.吡咯喹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
46. 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
47. 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, 2009,25(12): 2551-2557

48. 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, 2009,25(12): 2513-2518
49. 马淳安, 刘婷, 陈丽涛. CO和H在Pt/WC(0001)表面的吸附[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
50. 任雪峰, 任爱民, 王钦, 封继康. meso取代卟啉衍生物的结构和光学性质[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
51. 陈晓华, 樊永明, 曹春昱, 胡红智. 酞型木素模型物的光学特性[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
52. 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
53. 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
54. 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
55. 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
56. 周俊红; 曾艳丽; 孟令鹏; 郑世钧. ClO与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
57. 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
58. 徐艺军; 李俊钺; 章永凡; 陈文凯. O₂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
59. 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
60. 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
61. 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
62. 苗月; 袁宏宽; 陈洪. 双钙钛矿Sr_{2-x}La_xCrReO₆的电子结构和磁性[J]. 物理化学学报, 2008,24(03): 448-452
63. 胥倩; 倪哲明; 潘国祥; 陈丽涛; 刘婷. 水滑石限域空间中Cl⁻与H₂O的超分子作用[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 601-606
64. 吴阳; 冯璐; 张向东. C₆H₅-H...X分子间氢键的理论计算[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 653-658
65. 李志伟; 李香芝; 许先芳; 赵存元; 陈六平. NaP₄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
66. 李金环; 康万利; 闫文华; 郭伊苻; 高洪峰; 刘忠和. Eu³⁺掺杂TiO₂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
67. 孙慧卿; 丁少锋; 王雨田; 邓贝; 范广涵. CdO及Cd_xZn_{1-x}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
68. 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
69. 马文瑾; 张献明; 许小红; 王艳宾; 武海顺. C_nAl₂ (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
70. 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
71. 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-C₆₁丁酸甲酯的密度泛函研究[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1353-1358
72. 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
73. 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
74. 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
75. 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
76. 赵瑞玉, 董鹏, 梁文杰. 单分散SiO₂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
77. 张国鼎, 于秀芳. 量热法研究Cr³⁺水解聚合作用的热力学性质[J]. 物理化学学报, 1995,11(08): 766-768
78. 孙宝珍; 陈文凯; 徐香兰. NO双分子在Cu₂O(111)面吸附与解离的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(09): 1126-1131
79. 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

80. 李权;黄方千.邻二氯苯-水复合物的氢键结构与性质[J].物理化学学报,2005,21(01):52-56
81. 吴文娟;赖瑛;郑康成;云逢存.抗癌性咪唑啉衍生物的定量构效关系[J].物理化学学报,2005,21(01):28-32
82. 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
83. 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
84. 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
85. 吕海港;黎乐民.表现价态异常分子EuS₂和Eu₂S的泛函理论研究[J].物理化学学报,1998,14(05):413-418
86. 曹小龙;郭丽.多通道反应O(³P)+CH₂F的理论研究[J].物理化学学报,2004,20(06):642-646
87. 王利江;张聪杰;武海顺.C_nB_n^δ(δ=0,±1;n=1~6)团簇的结构、稳定性和光谱[J].物理化学学报,2005,21(03):244-249
88. 李中华;王锐;陈振宁;韦永德;周百斌.用密度泛函方法研究α-[XMo₁₂O₄₀]ⁿ⁻杂多阴离子的振动光谱[J].物理化学学报,2004,20(11):1329-1334
89. 徐艺军;李俊箴;章永凡.O₂在具有氧和镁缺陷MgO(001)表面的吸附[J].物理化学学报,2003,19(09):815-818
90. 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
91. 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
92. 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
93. 田欣欣;张富强;冯瑞娟;武海顺.B₂₈N₂₈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
94. 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
95. 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
96. 戴松元;王瑜;邬钦崇;王孔嘉;霍裕平.阳极氧化水解法制备TiO₂纳米膜[J].物理化学学报,1996,12(08):758-760
97. 孙科举 李微雪 冯兆池 李灿.Fe-AlPO₄-5分子筛的共振拉曼光谱[J].物理化学学报,2009,25(04):606-610
98. 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
99. 刘海洋 冷科 胡军 应晓 徐志广 张启光.A₃型Corrole中位取代基对其β位¹H-NMR的影响[J].物理化学学报,2009,25(04):694-700
100. 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UO₂L^{2-n*a}_n (L=F⁻, CO₃²⁻, NO₃⁻; 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
101. 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
102. 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TiO₂(101)表面的敏化机理[J].物理化学学报,2009,25(05):947-952
103. 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
104. 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
105. 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
106. 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
107. 扈玫珑,徐盛明,白晨光,徐刚,吕学伟.水解制备球形TiO₂及其水解过程动力学[J].物理化学学报,2009,25(08):1511-1516
108. 宋建民,刘东州,王云明,刘立芳,康艳霜,王保柱,朱玲欣,刘书华.平行板间超支化聚物流体的密度分布和溶剂化力[J].物理化学学报,0,():0-0
109. 姚萍,倪哲明,胥倩,毛江洪,刘晓明,王巧巧.镁锡水滑石中的超分子作用[J].物理化学学报,0,():0-0
110. 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

111. 刘洁翔;魏贤;张曙光;王桂香;韩燕山;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
112. 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
113. 张富春;张志勇;张威虎;阎军峰;江妮.Pb_xSr_{1-x}TiO₃的电子结构[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 61-66
114. 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
115. 赵新新 陶向明 宓一鸣 谭明秋.Pt/Cu(001)-p(2×2)-O表面吸附结构的总能计算[J]. 物理化学学报, 2009,25(03): 567-574
116. 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
117. 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
118. 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
119. 蒋仕宇;滕波涛;鲁继青;刘雪松;杨培芳;杨飞勇;罗孟飞.甲醛在CeO₂(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
120. 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
121. 郑金德;陆春海;孙宝珍;陈文凯.N₂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
122. 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
123. 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
124. 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
125. 陈新;李瑛;蒋青.几种(C[∧]N)Pt^{II}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
126. 李宗宝;姚凯伦;刘祖黎.有机-无机杂化化合物[Cu(μ-cbdca)(H₂O)]_n的电子结构及铁磁性[J]. 物理化学学报, 2008,24(09): 1681-1684
127. 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
128. 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
129. 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
130. 刘俊锋;刘永春;薛莉;余运波;贺泓.Al₂O₃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
131. 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
132. 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
133. 梁云霄;水淼;李榕生.硼/氮掺杂富勒烯C₂₀的结构和稳定性[J]. 物理化学学报, 2007,23(10): 1647-1651
134. 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
135. 王罗新;刘勇;虞新林;李松年;王晓工.H⁺、NH₄⁺对HMX的N—NO₂键解离能的影响[J]. 物理化学学报, 2007,23(10): 1560-1564
136. 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
137. 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
138. 潘国祥;倪哲明;李小年.类水滑石主体层板与客体CO₃²⁻、H₂O间的超分子作用[J]. 物理化学学报, 2007,23(08): 1195-1200
139. 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
140. 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
141. 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

142. 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
143. 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
144. 李磊; 桑革; 张鹏程; 蒋刚. α -Al₂O₃阻氢微观机制研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(12): 1912-1916
145. 徐伯华; 李来才; 王欣; 田安民. N₅H₅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
146. 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
147. 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
148. 贝逸翎; 主沉浮; 刘庆阳; 戚桂斌. 卤代硅烷(R₃SiX)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
149. 纪永军; 武海顺; 张富强; 贾建峰. (MN)_nH_m (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
150. 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
151. 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
152. 张静; 王艳宾; 武海顺. (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
153. 李思殿; 郭巧凌; 苗常青; 任光明. 含平面配位碳的过渡金属羰基配合物M_nH_nC密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(05): 743-745
154. 宋相志; 刘广; 章士伟. 分化诱导剂PMDH的合成及晶体结构[J]. 物理化学学报, 2002,18(06): 545-549
155. 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
156. 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
157. 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
158. 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
159. 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
160. 王利江; 张聪杰. B₂C_n⁺ (n=1~9)团簇的结构及其稳定性[J]. 物理化学学报, 2006,22(06): 726-731
161. 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
162. 李权; 刘晓亚; 高涛; 朱正和; 傅依备; 汪小琳; 孙颖. PuOⁿ⁺的势能函数的稳定性[J]. 物理化学学报, 2000,16(11): 987-991
163. 张晓清; 贾建峰; 武海顺; 裴晓琴. 羰基硼化合物(BCO)_n (n=1~12)的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(06): 684-690
164. 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
165. 陈波珍; 黄明宝; 颜达予. (CH₂)₂N和(CH₃)₂NH⁺的密度泛函理论计算[J]. 物理化学学报, 1999,15(06): 495-499
166. 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
167. 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
168. 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
169. 钱俊红; 张晓红; 郭荣. CTAB/n-C₅H₁₁OH/H₂O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
170. 李权; 徐成刚; 王红艳; 朱正和. PuH₂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
171. 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研究[J]. 物理化学学报, 2002,18(09): 802-807
172. 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
173. 张远; 曹爱年; 孙岳明; 刘举正; 顾璠. NO双分子和二聚体与Cu₂作用的理论计算[J]. 物理化学学报, 2003,19(03): 193-197

174. 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
175. 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
176. 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
177. 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
178. 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
179. 钱力;沈勇;陈锦灿;郑康成. 抗癌性咪唑啉生物3D-QSAR研究及其分子设计[J]. 物理化学学报, 2006,22(11): 1372-1376
180. 张玉亭;于洛. 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
181. 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
182. 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
183. 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
184. 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
185. 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
186. 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
187. 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
188. 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
189. 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
190. 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
191. 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
192. 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
193. 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
194. 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
195. 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
196. 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
197. 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
198. 张福兰;李来才;田安民. 乙烷在Ni(111)表面的吸附和分解[J]. 物理化学学报, 2009,25(09): 1883-1889
199. 詹卫伸;潘石;李源作;陈茂笃. 二氢咪唑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
200. 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
201. 赵新新;陶向明;宓一鸣;陈戎;谭明秋. Ni(110)- $p(2\times 1)$ -CO表面的几何结构和电子态[J]. 物理化学学报, 2009,25(11): 2305-2311
202. 杨宗献;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
203. 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

204. 吕存琴, 凌开成, 王贵昌. 甲胺在清洁及磷改性Mo(100)表面的解离[J]. 物理化学学报, 2009,25(11): 2336-2342
205. 刘洁翔, 魏贤, 张晓光, 韩恩山. Cu-[M']MOR和Ag-[M']MOR (M'=B, Al, Ga, Fe)的酸性[J]. 物理化学学报, 2009,25(10): 2123-2129
206. 左志军, 黄伟, 韩培德, 李志红. CO和H₂分子在Cu(111)面的吸附和溶剂化效应[J]. 物理化学学报, 2009,25(12): 2507-2512
207. 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, 2009,25(12): 2438-2444
208. 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, 2009,25(12): 2519-2523
209. 徐晓芳, 高放, 李红茹, 张胜涛. 生色团连接的苯骈三氮唑衍生物的激发态分子内质子转移[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
210. 何书珩, 蒲敏, 李军男, 何静, EVANS David G.. 酸性橙插层锌铝水滑石的组装及其结构与性能[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
211. 赵亚华. 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[J]. 物理化学学报, 2009,25(11): 2350-2356
-