

ISSN 1000-9035

中文核心期刊

中国科技核心期刊

中国科学引文数据库来源期刊

全国高校优秀编辑质量科技期刊

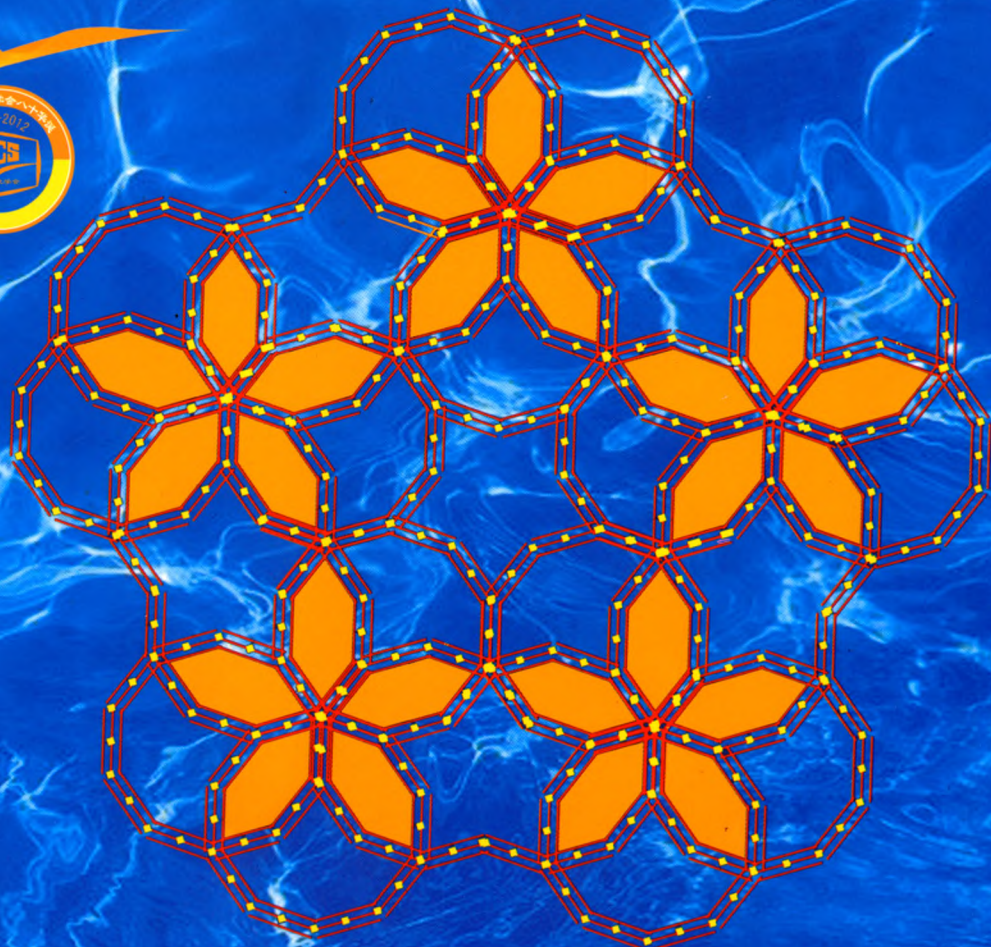
2012

3

第28卷

分子科学学报

JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCE



中国化学会主办

万方数据

目次

研究论文

Diels-Alder 反应中的次级轨道效应	徐珍珍	赵东霞	杨忠志(177)					
水热法制备核壳结构的纳米 Ag-Fe ₂ O ₃ 复合氧化物	曲文福	张爽	孙闻东(182)					
基于二价铅离子以 PAR 为指示剂检测水溶液中磷酸根	刘艳玲	宋美琴	阴彩霞(187)					
位阻效应对 N-(4-脱氢苯基)吡啶离子与氮氧自由基反应的理论计算研究	李慧	刘翔宇	汪伟	晋晓勇	冀永强(192)			
洛汾碱衍生物的电子结构及光谱性质的理论研究.....	秦玉珠	郭祥峰	贾丽华	卢冰冰	梁霆(197)			
茜素与 AcO ⁻ 阴离子的超分子作用及紫外-可见吸收光谱的理论研究	倪良	肖艳	朱翀	赵琛煜(202)				
N-(2-(取代苯并噻唑-2-氨基甲酰基)-取代苯基)-4-氟苯甲酰胺衍生物的合成及生物活性	薛伟	郑玉国	熊壮	祁慧雪	范会涛	何勇	卢平	李海畅(207)
环丙沙星与环糊精超分子体系的研究.....	张红芬	侯晚峰	梁蕾(214)					
熔盐电精炼硅制备多晶硅的 NaF-KCl 熔盐净化及净化作用	邹祥宇	谢宏伟	翟玉春	郎晓川(221)				
1,2-邻苯二氧基二乙酸铈及掺杂 L(L=La, Y, Yb, Nd)配合物的合成及荧光性质研究	苏明月	刘连利	孙彤(227)					
AgNbO ₃ 的水热合成和光催化性质表征.....	董淑春	孙凤春	常海波(232)					
[Co(bim) _x]配合物修饰的 {P ₂ Mo ₅ O ₂₃ } 超分子的合成、晶体结构和电化学性质	于凯	于洋	苏占华	周百斌(237)				
含萘并咪唑基团冠醚的合成及离子选择性研究.....	周仙贵	彭明生	王忠先(243)					
磷掺杂锐钛矿二氧化钛能带结构的从头计算研究.....	王丽丽	李阳	刘颖	刘跃(248)				
超声技术合成 1,5-二-(4-羟基苯基)-1,4-戊二烯-3-酮	谭冶	严石静	李立志	申凤善	李香丹(252)			
浓硫酸颜色反应荧光分析法测定甲芬那酸.....	辛建伟	马红燕	杨玉娜(256)					
C ₄₀ X ₂ (X=H, F, Cl, Br) 的理论研究	查林	徐祖民(260)						

CONTENTS

Full Papers

- Secondary orbital interaction in Diels-Alder reaction ... XU Zhen-zhen ZHAO Dong-xia YANG Zhong-zhi(177)
- The fabrication of Ag-Fe₂O₃ core-shell nanocomposite oxide by the hydrothermal method
..... QU Wen-fu ZHANG Shuang SUN Wen-dong(182)
- Determination of phosphate radical in aqueous solution by Pb²⁺ based on PAR as indicator
..... LIU Yan-ling SONG Mei-qin YIN Cai-xia(187)
- Theoretical study on the reaction of N-(4-dehydrophenyl)pyridinium ion with nitroxides within the steric effects LI Hui LIU Xiang-yu WANG Wei JIN Xiao-yong JI Yong-qiang(192)
- Theoretical studies on electronic structures and spectra properties of lophine derivatives
..... QIN Yu-zhu GUO Xiang-feng JIA Li-hua LU Bing-bing LIANG Ting(197)
- A DFT study on supra-molecular interaction between alizarin and AcO⁻ anion
..... NI Liang XIAO Yan ZHU Chong ZHAO Chen-xuan(202)
- Synthesis and biological activity of N-(2-(substituted benzothiazol-2-carbamoyl) substituted phenyl-4-fluoro benzamide derivatives
..... XUE Wei ZHENG Yu-guo XIONG Zhuang Qi Hui-xue FAN Hui-tao HE Yong LU Ping Li Hai-chang(207)
- Study on the supramolecular systems of ciprofloxacin with cyclodextrins
..... ZHANG Hong-fen HOU Xiao-feng LIANG Lei(214)
- Pre-electrolysis purification of NaF-KCl electrolyte and influence for purification
..... ZOU Xiang-yu XIE Hong-wei ZHAI Yu-chun LANG Xiao-chuan(221)
- Synthesis and fluorescence spectrum of the Eu complex and the Eu-L (L=La, Y, Yb, and Nd) complex with 1,2-phenylenedioxydiacetic acid and dibenzoylmethane
..... SU Ming-yue LIU Lian-li SUN Tong(227)
- Hydrothermal synthesis and photocatalytic activity of AgNbO₃
..... DONG Shu-chun SUN Feng-chun CHANG Hai-bo(232)
- Synthesis, crystal structure and electrochemical properties of {P₂Mo₅O₂₃} supramolecular modified with [Co(bim)_x] complex YU Kai YU Yang SU Zhan-hua ZHOU Bai-bin(237)
- Synthesis and ion selectivity of crown ethers containing naphthofuran moiety
..... ZHOU Xian-gui PENG Ming-sheng WANG Zhong-xian(243)
- Ab initio study on the band structure of P-doped anatase TiO₂
..... WANG Li-li LI Yang LIU Ying LIU Yue(248)
- Ultrasonic synthesis of 1,5-2-(4-hydroxyphenyl)-1,4-pentadiene-3-one
..... TAN Ye YAN Shi-jing LI Li-zhong SHEN Feng-shang LI Xiang-dan(252)
- Fluorimetric determination of mefenamic acid by color reaction of concentrated sulfuric acid
..... XIN Jian-wei MA Hong-yan YANG Yu-na(256)
- Theoretical studies on fullerene C₄₀'s derivatives C₄₀X₂ (X=H, F, Cl, Br) ZHA Lin XU Zu-min(260)