

◆ 中文核心期刊  
◆ 中国科学引文数据库来源期刊

ISSN  
CN QK1866247

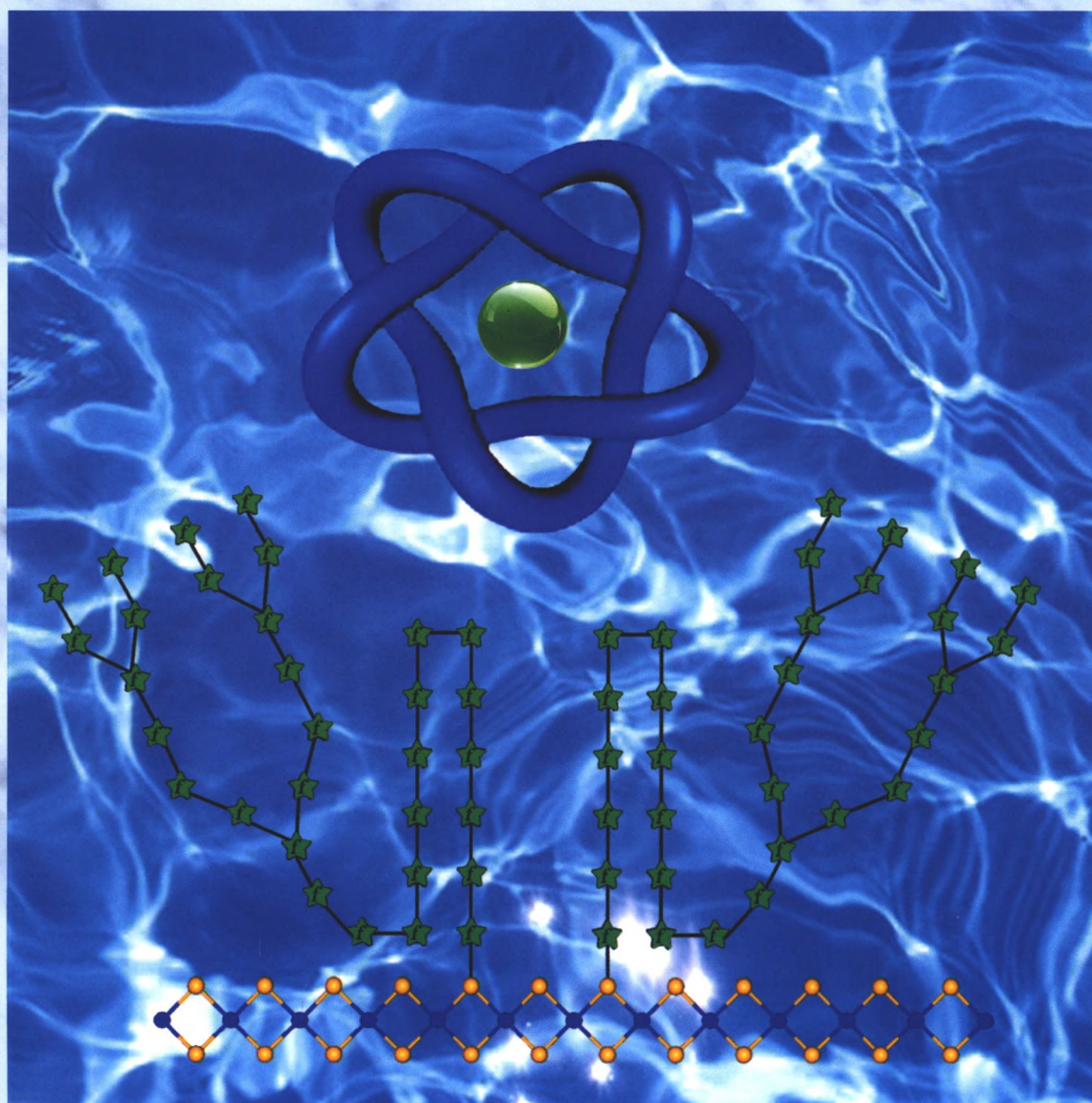
2018

6

第34卷

# 分子科学学报

JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCE



ISSN 1000-9035



万方数据

中国化学会 主办  
东北师范大学

目次(卷终)

研究论文

四氧化三锰八面体材料的制备及磁学性能研究 ..... 高明燕,韩青,杨铭,赵博(441)

金刚烷类抗癌药物的合成、结构和初步活性研究 ..... 赵银苹,陈力,侯瑞斌,夏艳(445)

一维配位聚合物 $[\text{Ni}(\text{L})(\text{bdc})(\text{H}_2\text{O})_2]\cdot 3\text{H}_2\text{O}$ 的晶体结构和性质 .....  
..... 梁爽,迟杰,刘湘湘,田菊香,刘国成(452)

水热法合形成貌和结构可控的二氧化锰材料 ..... 张歆皓,王会东,桑雅丽,刘艳华(458)

新型超支化受阻酚类抗氧化剂清除自由基能力研究 ... 李翠勤,孙鹏,葛腾杰,王华,康伟伟,王俊(465)

基于分子模拟的苯并三氮唑与 Irgamet39 ..... 刘志鹏,李亚莎,刘国成,徐程,沈书林(472)

B位 Cu 掺杂类钙钛矿型  $\text{La}_{1.6}\text{Sr}_{0.4}\text{Ni}_{0.6}\text{Cu}_{0.4}\text{O}_4$  作为锂-空气电池高效阴极催化剂及其催化机理的研究 ...  
..... 谢坤含(477)

复合型硅烷偶联剂的制备及表征 ..... 林海丹,董巍,列剑平,崔明,孙友群,梁永久(486)

抗癌药紫杉醇与 DNA 相互作用的光谱研究 ..... 邱焱,梁静文,李康(490)

(4,4'-二苯醚二甲酸)(诺氟沙星) $\text{Cu}(\text{II})$ 配合物的结构及抑菌活性 .....  
..... 崔阔,王亮亮,刘复新,范卓文,王广树,张春晶(497)

含苯咪唑基 12 顶点碳硼烷衍生物二阶非线性光学性质的 DFT 研究 .....  
..... 刘晓云,王洪强,王慧莹,吴娟,康慧敏,仇永清(501)

$\text{Ni}(\text{salen})$ 与  $\text{Pt}(\text{salen})$ 系列化合物非线性光学性质的理论研究 ..... 蔺彬彬,闫慧君(508)

天然酚类化合物根皮素与根皮苷的抗氧化活性的 DFT 研究 ..... 周北斗,曾丽兰,胡栋宝(517)

## CONTENTS(End of Volume)

### Full Papers

- Preparation and properties of  $Mn_3O_4$  octahedron ..... GAO Ming-yan, HAN Qing, YANG Ming, ZHAO Bo(441)
- Synthesis, structure and preliminary activity of adamantane derivatives as anticancer agents  
..... ZHAO Yin-ping, CHEN Li, HOU Rui-bin, XIA Yan(445)
- Crystal structure and properties of a 1D coordination polymer of  $[Ni(L)(bdc)(H_2O)_2] \cdot 3H_2O$   
..... LIANG Shuang, CHI Jie, LIU Xiang-xiang, TIAN Ju-xiang, LIU Guo-cheng(452)
- Hydrothermal synthesis of  $MnO_2$  with controlled morphology and structure  
..... ZHANG Xin-hao, WANG Hui-dong, SANG Ya-li, LIU Yan-hua(458)
- Free radical scavenging ability of novel hyperbranched bridged hindered phenols  
..... LI Cui-qin, SUN Peng, GE Teng-jie, WANG Hua, KANG Wei-wei, WANG Jun(465)
- Comparative research of corrosion performance between benzotriazole and Irgamet39 based on molecular simulation ..... LIU Zhi-peng, LI Ya-sha, LIU Guo-cheng, XU Cheng, SHEN Shu-lin(472)
- Perovskite-like  $La_{1.6}Sr_{0.4}Ni_{0.6}Cu_{0.4}O_4$  with Cu doping at B-sites as a high-performance cathodic catalyst for  $Li-O_2$  batteries and its catalytic mechanism ..... XIE Kun-han(477)
- Preparation and characterization of silane coupling complexes  
..... LIN Hai-dan, DONG Wei, LIE Jian-ping, YANG Ming, CUI Ming, LIU He, SUN You-qun, LIANG Yong-jiu(486)
- Spectroscopic study on the interaction of paclitaxel with DNA ..... QIU Lang, LIANG Jing-wen, LI Kang(490)
- Structure and antibacterial activity of Cu ( II ) complex (4,4'- diphenyl ether dicarboxylic acid) containing norfloxacin ..... CUI Kuo, WANG Liang-liang, LIU Fu-xin, FAN Zhuo-wen, WANG Guang-shu, ZHANG Chun-jing(497)
- The DFT study on second-order NLO properties of 12-Vertex carborane compounds with phenyl carbazoles  
..... LIU Xiao-yun, WANG Hong-qiang, WANG Hui-ying, WU Juan, KANG Hui-min, QIU Yong-qing(501)
- The theoretical investigation of nonlinear optical properties of Ni(salen) and Pt(salen) series compounds  
..... LIN Bin-bin, YAN Hui-jun(508)
- Study on antioxidant activity of natural phenolic compounds about phloretin and phlorizin by DFT method  
..... ZHOU Bei-dou, ZENG Li-lan, HU Dong-bao(517)

# 《分子科学学报》编辑委员会

创刊人: 唐教庆 孙家钟

名誉顾问: 黎乐民 李前树 R. Hoffmann M. Karplus

主编: 方维海

副主编: 杨柏 付宏刚 张景萍

委员: (以姓氏笔画为序)

丁世良 王南钦 王哲明 王曙光 方德彩 帅志刚 许林

苏忠民 张红星 李象远 李泽生 何福城 辛厚文 杨频

杨学明 陈志达 陈凯先 房喻 封继康 赵成大 耿延候

傅孝愿 蒋华良 戴树珊

海外编委: 王植源(加拿大) 任彤(美国) 郑冲(美国) 郭鸿(美国)

总编辑: 张景萍

分子科学学报

FENZI-KEXUE XUEBAO

(双月刊, 1981年创刊)

第34卷第6期 总第164期

2018年12月出版

JOURNAL OF MOLECULAR  
SCIENCE

(Bimonthly, First Issue in 1981)

Vol.34 No.6 Sum No.164

December, 2018

主管单位 中国科学技术协会  
主办单位 中国化学会  
东北师范大学  
主编 方维海  
副主编 杨柏 付宏刚 张景萍  
出版 《分子科学学报》编辑部  
(长春市人民大街5268号 邮编 130024)

国内发行 吉林省报刊发行局  
国外总发行 中国国际图书贸易集团有限公司  
(北京399信箱)

网址 <http://fzkb.cbpt.cnki.net>  
电子信箱 [fzxb@vip.163.com](mailto:fzxb@vip.163.com)  
电话 0431-85099521  
订购处 全国各地邮局  
印刷 吉林省文林印务有限公司

Competent Authority China Association  
for Science and Technology  
Sponsor Chinese Chemical Society  
Northeast Normal University  
Chief Editor FANG Wei-hai  
Deputy Chief Editors YANG Bai  
FU Hong-gang ZHANG Jing-ping  
Publisher Editorial Department of  
Journal of Molecular Science  
(5268 Renmin Street,  
Changchun 130024, China)  
Website <http://fzkb.cbpt.cnki.net>  
E-mail [fzxb@vip.163.com](mailto:fzxb@vip.163.com)  
Tel. 0431-85099521  
Overseas Distributor China International  
Book Trading Corporation  
(P.O.Box 399, Beijing)

中国标准连续出版物号: ISSN 1000-9035  
CN 22-1262/O4

国内订价: 15.00元

邮发代号: 国内12-82  
国外1523Q