

◆ 中文核心期刊  
◆ 中国科技核心期刊

QK2028077

ISSN 1000-9035  
CN 22-1262/O4

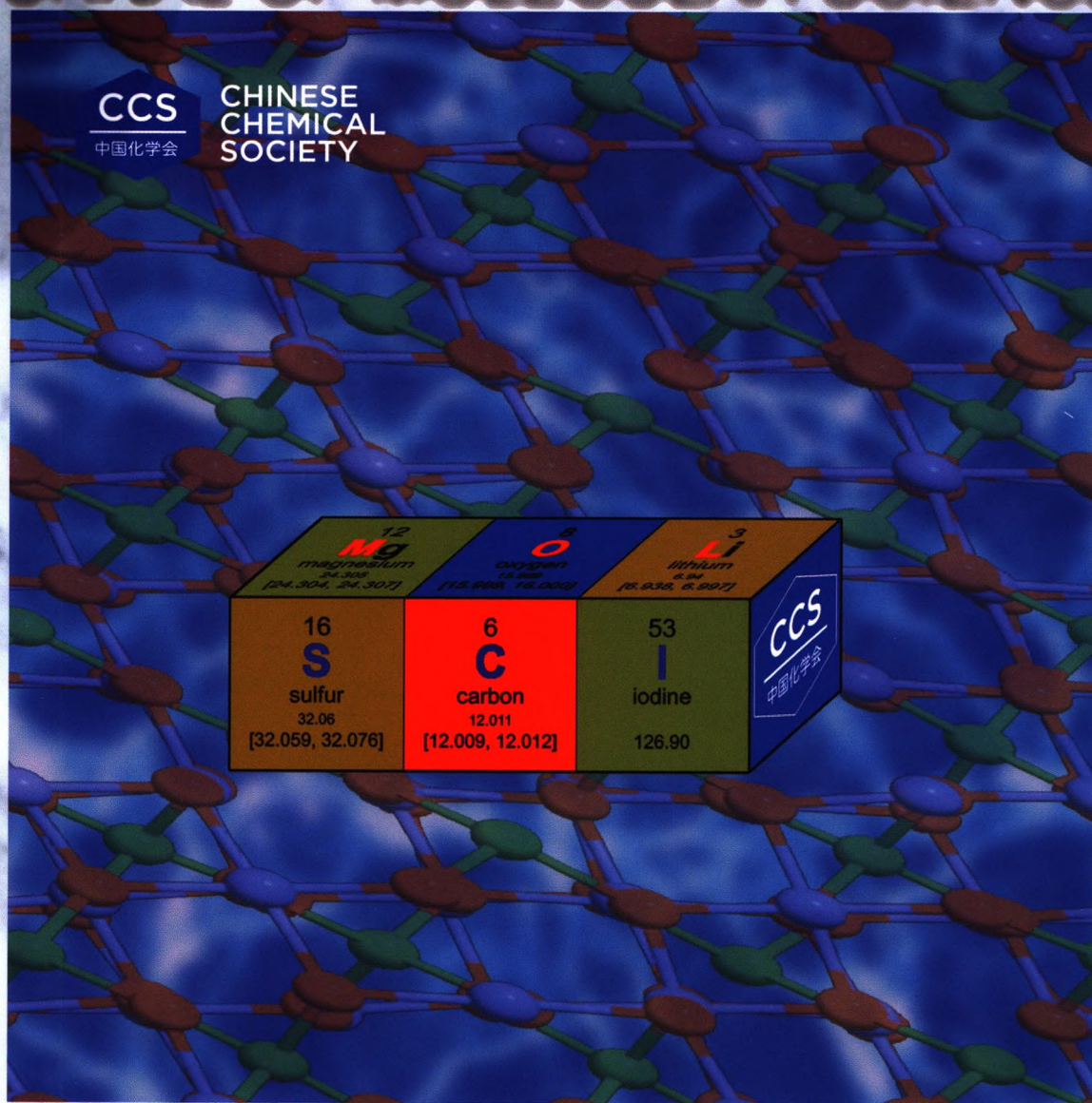
2020

3

第36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

## 目次

## 研究论文

- 氟喹诺酮均三唑衍生物抗肿瘤活性的 CoFMA 研究 ..... 冯 惠, 堵锡华, 陈 艳, 冯长君(177)
- $\text{Fe}(\text{CO})_3(\text{PR}_3)_2$  和  $\text{Fe}(\text{CO})_2(\text{PR}_3)_3$  的结构与性质的理论研究 ..... 郭彩红, 梁 敏, 李 俊, 张 翔(183)
- 类黄酮抑制 IP6Ks 的 3D-QSAR 研究 ..... 王海香, 秦东亚, 岳一珂, 伯维晨, 郑 鑫, 梁桂兆(191)
- 没食子酸修饰的超高交联吸附树脂对 2,4-二氯苯氧乙酸的吸附性能研究  
..... 穆启明, 丁聪聪, 高婷婷, 杨琉涵, 吴福钧, 孙玉凤, 刘总堂, 费正皓(198)
- 高比表面积介孔  $\text{TiO}_2$  的制备及负载钴基催化剂费-托合成反应性能研究  
..... 龙彩燕, 刘成超, 赵燕熹, 张煜华, 李金林(205)
- 电场极化调控聚(3-己基噻吩)薄膜润湿性 ..... 闫 肃, 杨宗翰, 李 伟, 王世伟(212)
- 钯金/碳壳纳米复合材料的制备与电催化性能 ..... 唐艳萍, 刘尚新, 刘哲林(217)
- 磷钨酸盐修饰的氧化钨薄膜的制备与电致变色性质研究  
..... 杨艳艳, 祁 岳, 翟文丽, 冯素洋, 张 洁, 曲小姝(223)
- ZnO-离子液体功能化的石墨烯量子点的制备及荧光性能 ... 王 欢, 来 鑫, 赵 维, 陈佑宁, 李玉红(228)
- 基于过渡态速率理论的叶片类囊体膜离子通道模型..... 吕 辉, 李顺异, 王春波, 崔宝禄, 李 静(235)
- 基于三乙醇胺修饰的 CdSe 量子点-芦丁二元体系的相互作用及其对痕量铝快速、灵敏检测研究  
..... 张红芬, 王文鑫, 石恩娟, 陈安家, 尚卓镛(242)
- 选择性磷酸二酯酶 4D(PDE4D)抑制剂的计算模型建立 ..... 刘景陶, 曹玉成, 王恺奕(249)
- 基于 ZIF-9 的多孔碳对次甲基绿的吸附动力学研究  
..... 韩亭亭, 李政昊, JOHANNES Hermanus Potgieter(257)

## CONTENTS

### Full Papers

- CoMFA study on anti-tumor activity of fluoroquinolone-3-yl s-triazole derivatives  
..... FENG Hui, DU Xi-hua, CHEN Yan, FENG Chang-jun(177)
- Theoretical study on the structure and properties of  $\text{Fe}(\text{CO})_3(\text{PR}_3)_2$  and  $\text{Fe}(\text{CO})_2(\text{PR}_3)_3$   
..... GUO Cai-hong, LIANG Min, LI Jun, ZHANG Xiang(183)
- 3D-QSAR study of flavonoids inhibiting IP6Ks  
..... WANG Hai-xiang, QIN Dong-ya, YUE Yi-ke, BO Wei-chen, ZHENG Xin, LIANG Gui-zhao(191)
- Adsorption properties investigation of 2,4-dichlorophenoxyacetic acid onto gallic acid modified hyper-cross-linked resin  
..... MU Qi-ming, DING Cong-cong, GAO Ping-ting, YANG Liu-han, WU Fu-jun, SUN Yu-feng, LIU Zong-tang, FEI Zheng-hao(198)
- Preparation of mesoporous  $\text{TiO}_2$  with high surface area and study on the performance of Fischer-Tropsch synthesis of supported cobalt catalyst  
..... LONG Cai-yan, LIU Cheng-chao, ZHAO Yan-xi, ZHANG Yu-hua, LI Jin-lin(205)
- Wettability control of poly (3-hexylthiophene) films by electric-field polarization technique  
..... YAN Su, YANG Zong-han, LI Wei, WANG Shi-wei(212)
- Preparation and electrocatalytic properties of palladium-gold/carbon shell nanocomposite  
..... TANG Yan-ping, LIU Shang-xin, LIU Zhe-lin(217)
- Preparation and properties of films based on tungstophosphate and tungsten oxide  
..... YANG Yan-yan, QI Yue, ZHAI Wen-li, FENG Su-yang, ZHANG Jie, QU Xiao-shu(223)
- Study on preparation and fluorescence property of graphene quantum dots functionalized with ZnO-ionic liquids  
..... WANG Huan, LAI Xin, ZHAO Wei, CHEN You-ning, LI Yu-hong(228)
- Modeling the ion channel of thylakoid membrane in leaves based on the transition state rate theory  
..... LYU Hui, LI Shun-yi, WANG Chun-bo, CUI Bao-lu, LI Jing(235)
- Study on the interaction of triethanolamine modification CdSe quantum dot-rutin binary system and its application in determination of trace aluminium  
..... ZHANG Hong-fen, WANG Wen-xin, SHI En-xian, CHEN An-jia, SHANG Zhuo-bin(242)
- Establishment of a computational model for selective phosphodiesterase 4D (PDE4D) allosteric inhibitor  
..... LIU Jing-tao, CAO Yu-cheng, WANG Kai-yi(249)
- Kinetic studies of ZIF-9-derived porous carbons on the adsorption of methylene green  
..... HAN Ting-ting, LI Zheng-hao, JOHANNES Hermanus Potgieter(257)

# 《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  
**执行主编:**张景萍  
**副主编:**付宏刚 朱广山 苏忠民 杨 柏 张 前 徐海阳 逯乐慧  
**委员:**(以姓氏笔画为序)  
丁益宏 马 列 马 晶 王洪福 王哲明 王 耀 毛宗万  
邓德会 白俊峰 邢 巍 刘心元 刘宝红 刘 俊 刘 雷  
刘新风 许 林 李兴伟 杨英威 杨国昱 肖丰收 宋秋玲  
张立军 张红星 张俊虎 张铁锐 姜雪峰 耿延侯 徐静娟  
栾新军 唐金魁 黄岩谊 梁万珍 梁高林 蒋兴宇 蒋健晖  
程方益 黎书华  
**海外编委:**王植源(加拿大) 任 彤(美国) 郑 冲(美国) 郭 鸿(美国)  
**编辑部主任:**常鹰飞

分 子 科 学 学 报

FENZI KEXUE XUEBAO

(双月刊, 1981年创刊)

第36卷 第3期 总第173期

2020年6月出版

JOURNAL OF MOLECULAR  
SCIENCE

(Bimonthly, First Issue in 1981)

Vol.36 No.3 Sum No.173

June, 2020

**主管单位** 中国科学技术协会  
**主办单位** 中国化学会  
**主 编** 方维海  
**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  
**Chief Editor** FANG Wei-hai  
**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

邮 发 代 号: 国内 12-82  
国外 BM1523

国内订价: 20.00元