

## 參考資料

1. Trawick, B. N.; T., D. A.; Bashkin, J. K., *Chem. Rev.* **1998**, 98, 939-960.
2. Bashkin, J. K.; Frolova, E. I.; Sampath, U., *J. Am. Chem. Soc.* **1994**, 116, 5981-5982.
3. Oivanen, M.; Kuusela, S.; Lonnberg, H., *Chem. Rev.* **1998**, 98, 961-990.
4. Lipkin, D.; Talbert, P. T.; Cohn, M., *J. Am. Chem. Soc.* **1954**, 76, 2871.
5. Brown, D. M.; Magrath, D. I.; Neilson, A. H.; Todd, A. R., *Nature* **1956**, 177, 1124.
6. Lipkin, D.; Dixon, J. S., *Science* **1952**, 116, 525.
7. Komiyama, M.; Tekeda, H.; Shigekawa, H., *Chem. Commun.* **1999**, 1443-1451.
8. Kim, E. E.; Wyckoff, H. W., *J. Mol. Biol.* **1991**, 218, 449-464.
9. Kuimelis, R. G.; L.W., M., *Chem. Rev.* **1998**, 98, 1027-1044.
10. Williams, N. H.; Takasaki, B.; Well, M.; Chin, J., *Acc. Chem. Res.* **1990**, 32, 485-493.
11. Gellman, S. H.; Petter, R.; Breslow, R., *J. Am. Chem. Soc.* **1986**, 108, 2388-2394.
12. McCue, K. P.; Voss, D. A. J.; Marks, C.; Morrow, J. R., *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* **1998**, 2961-2963.
13. McCue, K. P.; Morrow, J. R., *Inorg. Chem.* **1999**, 38, 6136-6142.
14. Branum, M. E.; Tipton, A. K.; Zhu, S.; Que, L., Jr., *J. Am. Chem. Soc.* **2001**, 123, 1898-1904.
15. Deck, K. M.; Tseng, T. A.; Burstyn, J. N., *Inorg. Chem.* **2002**, 41, 669-677.
16. Iranzo, O.; Elmer, T.; Richard, J. P.; Morrow, J., *Inorg. Chem.* **2003**, 42, 7737-7746.
17. Iranzo, O.; Elmer, T.; Richard, J. P.; Morrow, J., *Inorg. Chem.* **2004**, 43, 1743-1750.
18. Morrow, J. R.; Buttrey, L. A.; Shelton, V. L.; Berback, K. A., *J. Am. Chem. Soc.* **1992**, 114, 1903-1905.
19. Takasaki, B. K.; Chin, J., *J. Am. Chem. Soc.* **1994**, 116, 1121-1122.
20. Sumaoka, I.; Miyama, S.; Komiyama, M., *J. Chem. Soc., Chem. Commun.* **1994**, 1755-1756.
21. Matsuda, S.; Endo, M.; Komiyama, M., *J. Chem. Soc., Chem Commun.* **1994**, 2019-2020.
22. Amin, S.; Voss, D. A., Jr.; Horrocks, W. D., Jr.; Morrow, J. R., *Inorg. Chem.* **1996**, 35, 7466-7467.
23. Baker, B. F.; Khalili, H.; Wei, N.; Morrow, J. R., *J. Am. Chem. Soc.* **1997**, 119, 8749-8755.
24. Chappell, I. L.; Voss, D. A., Jr.; Horrocks, W. D., Jr.; Morrow, J. R., *Inorg. Chem.* **1998**, 37, 3989-3998.

25. Epstein, D. M.; Chappell, L. L.; Khalili, H. S., R. M.; Horrocks, W. D., Jr.; Morrow, J. R., *Inorg. Chem.* **2000**, *39*, 2130-2134.
26. Gómez-Tagle, P.; Yatsimirsky, A. K., *Inorg. Chem.* **2001**, *40*, 3786-3796.
27. Endo, M.; Azuma, Y.; Y., S.; Kawai, M.; Komiyama, M., *J Org. Chem.* **1997**, *62*, 846-852.
28. Chang, C. A.; Wu, B. H.; Kuan, B. Y., *Inorg. Chem.* **2005**, *44*, 6646-6654.
29. Jurek, P. E.; Jurek, A., M.; Martell, A. E., *Inorg. Chem.* **2000**, *39*, 1016-1020.
30. Gómez-Tagle, P.; Yatsimirsky, A. K., *J. Chem. Soc., Dalton Trans.* **1998**, 2957-2958.
31. 管佈雲. 銅系金屬與大環配位子錯合物切割磷酸二酯與去氧核糖核酸動力學催化效力的研究. 1998.
32. 吳柏宏. 銅系金屬離子錯合物水解磷酸酯之動力學研究. 2003.
33. Branum, M. E.; Que, L., Jr., *J. Biol. Inorg. Chem.* **1999**, *4*, 593-600.
34. Chang, C. A.; Ochaya, V. O., *Inorg. Chem.* **1986**, *25*, 355-358.
35. Sekhar, V. C.; Chang, C. A., *Inorg. Chem.* **1986**, *25*, 2061-2065.
36. Chang, C. A.; Rowland, M. E., *Inorg. Chem.* **1983**, *22*, 3866-3869.
37. Chang, C. A.; Sekhar, V. C., *Inorg. Chem.* **1987**, *26*, 1981-1985.
38. Chang, C. A.; Francesconi, L. C.; Malley, M. F.; Kumar, K.; Gougoutas, J. Z.; Lee, D. W.; Wilson, L. J., *Inorg. Chem.* **1993**, *32*, 3501-3508.
39. Kumar, K.; Chang, C. A.; Tweedle, M. F., *Inorg. Chem.* **1993**, *32*, 587-593.
40. Chang, C. A.; Liu, Y. L., *J. Chin. Chem. Soc.* **2004**, *47*, 1001-1006.
41. Anet, F. A. L.; Rawdah, T. N., *J. Am. Chem. Soc.* **1978**, *100*, 7166-7171.
42. Dale, J., *Acta Chem Scand.* **1973**, *27*, 1130.
43. Saunders, M., *J. Comput. Chem.* **1991**, *12*, 645.
44. Kolossváry, I.; Guida, W. C., *J. Am. Chem. Soc.* **1993**, *115*, 2107-2119.
45. Pertsin, A. J.; Hahn, J.; Grossmann, H. P., *J. Comput. Chem.* **1994**, *15*, 1121.
46. Christensen, I. T.; Jørgensen, F. S., *J. Comput.-Aided Mmol. Des.* **1997**, *11*, 385-394.
47. Warden, A.; Graham, B.; Hearn, M. T. W.; L., S., *Org. Lett.* **2001**, *3*, 2855-2858.
48. Bazzicalupi, C.; A., B.; Bianchi, A.; Luicia, B.; Giorgi, C.; Valtancolo, B., *J. Org. Chem.* **2005**, *70*, 4257-4266.
49. Fossheim, R.; Dahl, S. G., *Acta Chem. Scand.* **1990**, *44*, 698-706.
50. Frey, S. T.; Chang, C. A.; Carvalho, J. F.; Varadarajan, A.; Schultze, L. M.; Pounds, K. L.; Horrocks, W. D., Jr., *Inorg. Chem.* **1994**, *33*, 2882-2889.
51. Wu, S. L.; Horrocks, W. D., Jr., *Inorg. Chem.* **1995**, *34*, 3724-3732.
52. Chang, C. A.; Liu, Y. L.; Chen, C. Y.; Chou, X. M., *Inorg. Chem.* **2001**, *40*, 3448-3455.
53. Kumar, K.; Chang, C. A.; Francesconi, L. C.; Dischino, D. D.; Malley, M. F.;

- Gougoutas, J. Z.; Tweedle, M. F., *Inorg. Chem.* **1994**, *33*, 3567-3575.
54. Maurya, M. R.; Zaluzec, E. J.; Pavkovic, S. F.; Herlinger, A. W., *Inorg. Chem.* **1991**, *30*, 3657-3662.
55. Kang, J. G.; Na, M. K.; Yoon, S. K.; Sohn, Y.; Kim, Y. D.; Suh, I. H., *Inorg. Chim. Acta* **2000**, *310*, 56-64.
56. Spirlet, M. R.; Rebizant, J.; Loncin, M. F.; Desreux, J. F., *Inorg. Chem.* **1984**, *23*, 4278-4283.
57. de Andrade, A. V. M.; da Costa, N. B., Jr.; Simas, A. M.; de Sá, G. F., *Chem. Phys. Lett.* **1994**, *227*, 349-353.
58. Cundari, T. R.; Moody, E. W.; Sommerer, S. O., *Inorg. Chem.* **1995**, *34*, 5989-5999.
59. Cundari, T. R.; Saunders, L. C., *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* **1998**, *38*, 523-528.
60. Rocha, G. B.; Freire, R. O.; da Costa, N. B., Jr.; de Sá, G. F.; Simas, A. M., *Inorg. Chem.* **2004**, *43*, 2346-2354.
61. Freire, R. O.; Rocha, G. B.; Simas, A. M., *Inorg. Chem.* **2005**, *44*, 3299-3310.
62. Freire, R. O.; Rocha, G. B.; Simas, A. M., *J. Comput. Chem.* **2005**, *26*, 1524-1528.
63. Dolg, M.; Stoll, H.; Savin, A.; Preuss, H., *Theor. Chim. Acta* **1989**, *75*, 173.
64. Cosentino, U.; Moro, G.; Pitea, D.; Villa, A.; Fantucci, P. C.; Maiocchi, A.; Uggeri, F., *J. Phys. Chem. A* **1998**, *102*, 4606-4614.
65. Hay, P. J.; Wadt, W. R., *J. Chem. Phys.* **1985**, *82*, 299-310.
66. Jang, Y. H.; Blanco, M.; Dasgupta, S.; Keire, D. A.; Shively, J. E.; Goddard III, W. A., *J. Am. Chem. Soc.* **1999**, *121*, 6142-6151.
67. Cosentino, U.; Villa, A.; Pitea, D.; Moro, G.; Barone, V.; Maiocchi, A., *J. Am. Chem. Soc.* **2002**, *124*, 4901-4909.
68. Dolg, M.; Stoll, H.; Preuss, H., *Theor. Chim. Acta* **1993**, *85*, 441.
69. Gutierrez, F.; Rabbe, C.; Poteau, R.; Daudey, J. P., *J. Phys. Chem. A* **2005**, *109*, 4325-4330.
70. Allinger, N. L., *J. Am. Chem. Soc.* **1977**, *99*, 8127-8134.
71. Burkert, U.; Allinger, N. L., *Molecular Mechanics*. American Chemical Society, Washington D. C.: 1982.
72. Weiner, P. K.; Kollman, P. A., *J. Comp. Chem.* **1981**, *2*, 287-303.
73. Weiner, S. J.; Kollman, P. A.; Nguyen, D. T.; Case, D. A., *J. Comp. Chem.* **1986**, *7*, 230-252.
74. Brooks, B. R.; Bruccoleri, R. E.; Olafson, B. D. S., D.J.; Swaminathan, S. K., M., *J. Comp. Chem.* **1983**, *4*, 187-217.
75. MacKerell, A. D.; Bashford, D.; Bellott, M.; Dunbrack, R. L.; Eva seck, J. D.; Field, M. J.; Fischer, S.; Gao, J.; Guo, H.; Ha, S.; JosephMcCarthy, D.; Kucnir,

- L.; Kuczera, K.; Lau, F. T. K.; Mattos, C.; Michnick, S.; Ngo, T.; Nguyen, D. T.; Prohom, B.; Reiher, W. E.; Roux, B.; Schlenkrich, M.; Smith, J. C.; Stote, R.; Straub, J.; Watanabe, M.; Wiorkiewicz-Kuczera, J.; Yin, D.; Karplus, M., *J. Phys. Chem., B* **1998**, *102*, 3586-3617.
76. Mackerell, A. D.; Wiorkiewicz-Kuczera, J.; Karplus, M., *J. Am. Chem. Soc.* **1995**, *117*, 11946-11975.
  77. Dauber-Osguthorpe, P.; Roberts, V. A.; Osguthorpe, D. J.; Wolff, J. G., M.; Hagler, A. T., *Proteins: Structure, Function and Genetics* **1988**, *4*, 31-47.
  78. Allinger, N. L.; Kok, R. A.; Imam, M. R., *J. Comp. Chem.* **1988**, *9*, 591-595.
  79. Allinger, N. L.; Yuh, Y. H.; Lii, J. H., *J. Am. Chem. Soc.* **1989**, *111*, 8551-8565.
  80. Hagler, A. T.; Ewig, C. S., *Comp. Phys. Comm.* **1994**, *84*, 131-155.
  81. Sun, H., *J. Phys. Chem., B* **1998**, *102*, 7338.
  82. Rappe, A. K.; Casewit, C. J.; Colwell, K. S.; Goddard III, W. A.; Skiff, W. M., *J. Am. Chem. Soc.* **1992**, *114*, 10024.
  83. Mayo, S. L.; Olafson, B. D.; Goddard III, W. A., *J. Phys. Chem., B* **1990**, *94*, 8897.
  84. Frenkel, D.; Smit, B., *Understanding Molecular Simulation*. Academic Press: 2002.
  85. Levine, I. N., *Quantum Chemistry*. Pearson Education Taiwan Ltd.: 2004.
  86. Jensen, F., *Introduction to Computational Chemistry*. John Wiley & Sons Ltd.: 1999.
  87. CSD System Documentation, Cambridge Crystallographic Data Centre. In.
  88. CSD System Documentation, Cambridge Crystallographic Data Centre. In.
  89. Accelrys. In.
  90. Life Science Documentation, Accelrys. In.
  91. InsightII, Accelrys. In.
  92. Chemistry at HARvard macromolecular Mechanics. In.
  93. CHARMM in InsightII, Accelrys. In.
  94. CHARMM principles, Accelrys. In *CHARMM principles, Accelrys*.
  95. Pople, J. A., *Rev. Mod. Phys.* **1999**, *71*, 1267-1274.
  96. Gaussian 03 Online Manual., Gaussian. In.
  97. Huskens, J.; Sherry, A. D., *J. Am. Chem. Soc.* **1996**, *118*, 4396-4404.
  98. 謝發坤. 多胺與多乙酸基配位子與金屬離子錯合物穩定常數研究. 1996.