

一种确定反应中间态几何特征和能量的综合性方法

郑 铮[§] 刘振明^{§,*} 张亮仁

(北京大学药学院药物化学系, 天然药物及仿生药物国家重点实验室, 北京 100191)

A Combined Method for Determining Reaction Transition State Geometry and Energy

ZHENG Zheng[§] LIU Zhen-Ming^{§,*} ZHANG Liang-Ren

(State Key Laboratory of Natural and Biomimetic Drugs, Department of Medicinal Chemistry,
School of Pharmaceutical Sciences, Peking University, Beijing 100191, P. R. China)

*Corresponding author. Email: zmlu@bjmu.edu.cn; Tel: +86-10-82805514; Fax: +86-10-82802724.

Table S1 Eigenvalues of frontier molecular orbitals and values of system energy

No.	<i>L</i> (HOMO)/nm	<i>L</i> (LUMO)/nm	E(UHF) (hartree)
1	0.170135	0.130468	-266.104
2	0.170764	0.129285	-266.102
3	0.1716	0.128769	-266.102
4	0.172543	0.128258	-266.101
5	0.173664	0.127726	-266.099
6	0.17328	0.128466	-266.107
7	0.171235	0.129437	-266.113
8	0.16904	0.130391	-266.117
9	0.166691	0.131634	-266.127
10	0.164104	0.133054	-266.135
11	0.161741	0.134402	-266.141
12	0.159355	0.13576	-266.144
13	0.15683	0.137098	-266.147
14	0.152994	0.138644	-266.146
15	0.152485	0.139228	-266.146
16	0.153033	0.139419	-266.146
17	0.155078	0.139059	-266.147
18	0.155089	0.138734	-266.147
19	0.155179	0.139157	-266.150
20	0.154972	0.139141	-266.152
21	0.154853	0.139045	-266.154
22	0.154771	0.138881	-266.155
23	0.154747	0.138662	-266.157
24	0.154714	0.138423	-266.157
25	0.154609	0.138374	-266.157

26	0.154508	0.138404	-266.157
27	0.15451	0.138431	-266.157
28	0.154485	0.138537	-266.157
29	0.154531	0.138491	-266.157
30	0.154523	0.138489	-266.157
31	0.154611	0.138422	-266.157
32	0.154539	0.138476	-266.157
33	0.171384	0.123873	-266.122
34	0.171371	0.124745	-266.128
35	0.171477	0.125263	-266.131
36	0.171679	0.125638	-266.134
37	0.166703	0.129826	-266.145
38	0.164947	0.130959	-266.148
39	0.161879	0.132638	-266.150
40	0.15796	0.134847	-266.150
41	0.153803	0.137273	-266.148
42	0.153467	0.138418	-266.147
43	0.19327	0.126618	-266.048
44	0.196246	0.125803	-266.050
45	0.19981	0.124965	-266.051
46	0.2043	0.124064	-266.052
47	0.204318	0.124256	-266.072
48	0.204749	0.124248	-266.087
49	0.207627	0.1238	-266.098
50	0.206293	0.124259	-266.11
51	0.207342	0.124221	-266.119
52	0.206474	0.124624	-266.128

53	0.205589	0.12503	-266.135
54	0.203989	0.125617	-266.141
55	0.203411	0.126038	-266.144
56	0.203882	0.126233	-266.145
57	0.20551	0.125979	-266.144
58	0.206077	0.125801	-266.144
59	0.206389	0.125641	-266.144
60	0.205728	0.125782	-266.145
61	0.205694	0.125792	-266.145
62	0.205722	0.125802	-266.145
63	0.205481	0.125864	-266.144
64	0.203675	0.126296	-266.146
65	0.207501	0.125399	-266.141
66	0.206131	0.125756	-266.143
67	0.205249	0.125925	-266.144
68	0.205318	0.125886	-266.145
69	0.205238	0.125893	-266.157
70	0.205238	0.125893	-266.159
71	0.154562	0.138477	-266.159
72	0.154788	0.138317	-266.159
73	0.154793	0.138315	-266.162
74	0.154785	0.138317	-266.162
75	0.155253	0.138007	-266.163
76	0.155326	0.137989	-266.163
77	0.155947	0.137647	-266.164
78	0.15602	0.137636	-266.165
79	0.156789	0.137272	-266.165

80	0.156884	0.137277	-266.165
81	0.157848	0.136918	-266.165
82	0.157896	0.137003	-266.165
83	0.158957	0.13673	-266.157
84	0.158705	0.13688	-266.159
85	0.154528	0.1385	-266.159
86	0.154766	0.13833	-266.159
87	0.154776	0.138325	-266.162
88	0.154767	0.138328	-266.162
89	0.155236	0.138017	-266.163
90	0.155308	0.137999	-266.163
91	0.155928	0.137655	-266.164
92	0.156	0.137645	-266.164
93	0.156768	0.13728	-266.165
94	0.156863	0.137285	-266.165
95	0.157827	0.136925	-266.165
96	0.157875	0.137011	-266.165

Note $L(HOMO)$: Distance for HOMO; $L(LUMO)$: Distance for LOMO.

Table S2 Cross-validation monitored ANN training result (data in the table was standardized)

<i>E</i> (calc)	<i>E</i> (pred)	Error
0.5634	0.42195	-0.14145
0.57385	0.51299	-0.06086
0.57727	0.57371	-0.00360
0.58622	0.60143	0.01521
0.60266	0.62477	0.02211
0.53759	0.53427	-0.00332
0.48782	0.48589	-0.00193
0.45924	0.46072	0.00148
0.37809	0.3639	-0.01419
0.32067	0.30288	-0.01779
0.27398	0.26329	-0.01069
0.24397	0.23697	-0.00700
0.22249	0.23079	0.00830
0.22943	0.27173	0.04230
0.22813	0.24509	0.01696
0.23415	0.19511	-0.03904
0.21939	0.19775	-0.02164
0.21939	0.19775	-0.02164
0.20066	0.1891	-0.01156
0.18614	0.16939	-0.01675
0.16972	0.14933	-0.02039

0.15692	0.14308	-0.01384
0.14709	0.14346	-0.00363
0.14172	0.14031	-0.00141
0.14152	0.13816	-0.00336
0.14226	0.13568	-0.00658
0.14258	0.13586	-0.00672
0.14371	0.13521	-0.00850
0.14322	0.13551	-0.00771
0.14319	0.13538	-0.00781
0.14227	0.13558	-0.00669
0.14303	0.13546	-0.00757
0.41687	0.30078	-0.11609
0.37325	0.29651	-0.07674
0.34623	0.29219	-0.05404
0.32704	0.28769	-0.03935
0.23955	0.27163	0.03208
0.21724	0.26354	0.04630
0.20035	0.25648	0.05613
0.19845	0.25238	0.05393
0.21529	0.25436	0.03907
0.22216	0.26264	0.04048
1.00000	0.94707	-0.05293
0.98735	0.95489	-0.03246
0.9774	0.95818	-0.01922
0.96953	0.96058	-0.00895
0.81671	0.87983	0.06312
0.69388	0.71543	0.02155

0.60848	0.60497	-0.00351
0.51462	0.48021	-0.03441
0.44013	0.42474	-0.01539
0.37096	0.37362	0.00266
0.31651	0.33456	0.01805
0.27352	0.29207	0.01855
0.24839	0.26445	0.01606
0.23879	0.25509	0.01630
0.24458	0.27159	0.02701
0.24577	0.2804	0.03463
0.24492	0.28466	0.03974
0.24139	0.27434	0.03295
0.24211	0.27223	0.03012
0.24265	0.27329	0.03064
0.24329	0.26984	0.02655
0.23467	0.24664	0.01197
0.26778	0.33708	0.06930
0.2511	0.29070	0.03960
0.24322	0.26917	0.02595
0.24254	0.26628	0.02374
0.14239	0.13440	-0.00799
0.12856	0.11872	-0.00984
0.1286	0.11862	-0.00998
0.12864	0.11876	-0.00988
0.10831	0.11028	0.00197
0.10747	0.10791	0.00044
0.094255	0.10194	0.007685

0.093482	0.099699	0.006217
0.085936	0.088872	0.002936
0.085174	0.087022	0.001848
0.082006	0.074012	-0.00799
0.081217	0.073706	-0.00751
0.078631	0.06138	-0.01725
0.078703	0.063984	-0.01472
0.14323	0.13601	-0.00722
0.12909	0.11861	-0.01048
0.12902	0.11851	-0.01051
0.12907	0.11865	-0.01042
0.10873	0.10940	0.00067
0.10789	0.10706	-0.00083
0.094691	0.10126	0.00657
0.093917	0.09901	0.00509
0.086392	0.08828	0.00189
0.08563	0.08647	0.00084
0.082499	0.07361	-0.00889
0.081713	0.07321	-0.00850
0.079124	0.06086	-0.01827
0.079238	0.06349	-0.01575