

## BaTiO<sub>3</sub>的电子结构和光学性质

张子英, 杨德林, 刘云虎, 曹海滨, 邵建新, 井群

石河子大学师范学院物理系, 生态物理重点实验室, 新疆 石河子 832003| 郑州大学物理工程学院, 郑州 450052

摘要:

采用第一性原理赝势平面波方法, 在局域密度近似(LDA)和广义梯度近似(GGA)下分别计算了BaTiO<sub>3</sub>立方相和四方相的电子结构, 并在局域密度近似下计算了BaTiO<sub>3</sub>立方相的光学性质. 结果表明, BaTiO<sub>3</sub>立方相和四方相都为间接带隙, 方向分别为 $\Gamma$ -M和 $\Gamma$ -X, 大小分别为2.02和2.20 eV. 对BaTiO<sub>3</sub>和PbTiO<sub>3</sub>铁电相短键上电子布居数的对比分析, 给出了它们铁电性大小的差别. 且在30 eV的能量范围内研究了BaTiO<sub>3</sub>的介电函数、吸收系数、折射系数、湮灭系数、反射系数和能量损失系数等光学性质, 并基于电子能带结构对光学性质进行了解释. 计算结果与实验数据相符合.

关键词: 电子结构 密度泛函理论 光学性质 赝势平面波方法

收稿日期 2009-02-24 修回日期 2009-05-21 网络版发布日期 2009-06-23

通讯作者: 杨德林 Email: Dlyang25@yahoo.cn

### 本刊中的类似文章

1. 李宝宗. 2-硫代黄嘌呤互变异构体的密度泛函理论计算[J]. 物理化学学报, 2004,20(12): 1455-1458
2. 王树军; 罗代兵; 阮文娟; 朱志昂; 马毅. 手性锌卟啉的非线性光学性质及对咪唑类客体分子识别的构象研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(08): 834-839
3. 郭彩红; 贾建峰; 郭玲; 武海顺. Ga<sub>x</sub>P<sub>y</sub> (x+y=8) 及其阴离子团簇的结构与性质的DFT研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(10): 1253-1259
4. 王岩; 曾小兰; 汪玲. 硅杂苯与亲二烯体的Diels-Alder反应[J]. 物理化学学报, 2009,25(02): 371-376
5. 崔明侠; 董士红; 王文亮; 尹世伟; 吕剑. 4-(1,2-二苯基)乙炔基-4'-(N,N-二苯基-4-乙炔基苯胺基)联苯及其二氟取代衍生物的电子结构与光谱性质[J]. 物理化学学报, 2009,25(02): 347-352
6. 游晓莉; 徐布一; 李权; 赵可清. 噻唑类生色分子的电子光谱和非线性光学性质[J]. 物理化学学报, 2009,25(02): 314-318
7. 史鸿运; 王一波; 邓洁; 张云黔; 张涛. 沙蚕毒系化合物的结构与生物活性关系[J]. 物理化学学报, 1995,11(12): 1089-1092
8. 曹泽星; 黄宏新; 田安民. O<sub>3</sub> 激发态电子结构及内部电荷转移理论研究[J]. 物理化学学报, 1996,12(02): 97-101
9. 陈学安; 赵凌; 李言; 陈本明; 傅亨. C<sub>2</sub> 近邻环境对金属碳化物电子结构的影响[J]. 物理化学学报, 1996,12(03): 245-251
10. 陈锦灿; 李俊; 吴文娟; 郑康成. 系列异构配合物Ru(azpy)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub> 的结构与抗癌活性[J]. 物理化学学报, 2006,22(04): 391-396
11. 李权; 王红艳; 蒋刚; 朱正和. PuX (X=H, O, N, C) 的结构与势能函数[J]. 物理化学学报, 2001,17(07): 622-625
12. 胡云玩; 钱惠琴; 陈桥; 毛宏颖; 宋飞; 黄寒; 李海洋; 何丕模; 鲍世宁. Fluorescein 有机薄膜在Ag(110)面上的生长研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(04): 470-474
13. 周世琦; 张晓祺. 一个新的桥泛函及其在非均一流体密度泛函理论中的应用[J]. 物理化学学报, 2002,18(08): 699-704
14. 崔万秋; 雷鸣. TiC、TiC<sub>1-x</sub>、(Ti<sub>1-x</sub>Nb<sub>x</sub>)C 电子结构的计算[J]. 物理化学学报, 1998,14(03): 198-203
15. 薛卫东; 张广丰; 朱正和; 汪小琳; 罗德礼; 邹乐西; 孙颖. CO<sub>2</sub> 二聚体分子弱结合作用的DFT计算[J]. 物理化学学报, 2001,17(06): 501-506
16. 武海顺; 许小红; 张聪杰; 张富强. (XN)<sub>4</sub>R<sub>4</sub> 簇合物的结构与化学键 [J]. 物理化学学报, 2002,18(02): 127-130
17. 刘幼成; 蒋刚; 朱正和. NX (X=F, Cl, Br) 分子结构与极化函数 $f$ 轨道的作用 [J]. 物理化学学报, 2002,18(02): 117-121

扩展功能

本文信息

PDF(766KB)

服务与反馈

把本文推荐给朋友

加入我的书架

加入引用管理器

引用本文

Email Alert

文章反馈

浏览反馈信息

本文关键词相关文章

▶ 电子结构

▶ 密度泛函理论

▶ 光学性质

▶ 赝势平面波方法

本文作者相关文章

▶ 张子英

▶ 杨德林

▶ 刘云虎

▶ 曹海滨

▶ 邵建新

▶ 井群

18. 艾洪奇;步宇翔.黄金规则用于 $N_3^- + N_3$ 体系电子转移的研究[J]. 物理化学学报, 2001,17(03): 210-215
19. 王遵尧;肖鹤鸣;李金山. $F + Cl_2 \rightarrow ClF + Cl$ 和 $Cl'F + Cl \rightarrow Cl' + ClF$ 的反应机理[J]. 物理化学学报, 2001,17(02): 107-110
20. 赵良仲;刘芬;张琳. $LnCu_2O_4$  (Ln=Gd,Nd)电子结构的XPS研究 [J]. 物理化学学报, 2001,17(04): 310-313
21. 王繁;黎乐民.高精度相对论密度泛函计算方法[J]. 物理化学学报, 2004,20(08S): 966-973
22. 曹梅娟;陈文凯;刘书红;许莹;李俊箴.苯在Au(100)表面化学吸附的周期性密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(01): 11-15
23. 封学军;李前树.全氟代金刚烷及其自由基的理论研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(09): 1172-1174
24. 武晓君;李群祥;黄静;杨金龙.单分子器件电子输运性质的理论研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(08S): 995-1002
25. 殷元骥, 李文, 汪汉卿.簇合物 $Co_6(\mu_3-E)_8(CO)_6$  (E: -S, -Se)的电子结构及相关性能探讨[J]. 物理化学学报, 1995,11(02): 151-156
26. 杨胜勇;肖慎修;陈天朗. $(NiV_{13}O_{38})^{7-}$ 的电子结构和催化性质的探讨[J]. 物理化学学报, 1994,10(12): 1071-1074
27. 周传华;李奇;黄元河;刘若庄.聚噻吩取代效应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1994,10(09): 825-829
28. 林伟;章永凡;李奕;陈勇;李俊箴. $SnO_2$  (110)弛豫表面构型与电子结构的第一性原理研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(01): 76-81
29. 王世铭;刘平;付贤智.离子交换膜中CdS单分散纳米晶的合成及其光学性质[J]. 物理化学学报, 2005,21(10): 1151-1155
30. 胡兴邦;李浩然;梁婉春;韩世钧.水对5-氟尿嘧啶质子转移影响规律的研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(09): 952-956
31. 吕玲玲;王永成. $Au^+(^1S, ^3D)$ 与 $N_2O(^1\Sigma^+)$ 反应机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(03): 265-269
32. 张敬来;王连宾;吴文鹏;曹泽星.线性簇合物 $SC_{2n}S^{2-}$  ( $n = 1 \sim 12$ )电子吸收光谱[J]. 物理化学学报, 2004,20(12): 1428-1433
33. 耿志远;王永成;汪汉卿.锆烯 $X_2Ge$  (X=H、 $CH_3$ 、F、Cl、Br)与乙烯环加成反应的量子化学研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(12): 1417-1422
34. 徐灿;朱莉芳;高晨阳;曹娟.硅氧团簇 $(SiO_2)_nO_2H_4$ 的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(02): 152-155
35. 黄飙;张家兴;李锐;申自勇;侯士敏;赵兴钰;薛增泉;吴全德. $Al-C_{60}$ -Al分子结电子输运特性的第一性原理计算[J]. 物理化学学报, 2006,22(02): 161-166
36. 马文瑾;武海顺. $AlmN_2^-$  ( $m=1 \sim 8$ )团簇的结构与稳定性[J]. 物理化学学报, 2006,22(02): 178-182
37. 罗小玲;唐典勇;李明.氢甲酰化反应溶剂效应的量子化学研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(12): 1404-1410
38. 高立国;王永成;耿志远;陈晓霞;吕玲玲;戴国梁;王冬梅.气相中 $Sc^+$ 和 $Ti^+$ 与 $CS_2$ 反应的计算研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(10): 1102-1107
39. 章应辉;阮文娟;吴扬.密度泛函理论研究5-单苯基吡啶分子的几何结构和拉曼光谱[J]. 物理化学学报, 2005,21(12): 1390-1394
40. 方冉;耿志远;王永成;张兴辉;王冬梅;高立国;陈晓霞.锆烯 $X_2Ge$ 与环硫乙烷硫转移反应的密度泛函研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(12): 1331-1336
41. 张材荣;陈宏善;陈玉红;冯旺军;李维学;许广济;寇生中. $Al_8P_8$ 团簇环状结构与性质的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(12): 1368-1372
42. 朱孟强;潘纲;刘涛;李贤良;杨玉环;李薇;李晋;胡天斗;吴自玉;谢亚宁.用密度泛函和XANES计算研究 $Zn^{2+}$ 在水锰矿表面的吸附和沉淀[J]. 物理化学学报, 2005,21(12): 1378-1383
43. 朱瑜;蒋刚;于桂凤;朱正和;王和义;傅依备. $N_2$ 在Pd金属表面的吸附行为[J]. 物理化学学报, 2005,21(12): 1343-1346
44. 吴爱玲;赵显;关大任;易希璋.取代苯体系的二阶非线性光学性质:动力学李代数方法[J]. 物理化学学报, 2005,21(11): 1319-1323
45. 李荣;周上祺;陈昌国;梁国明;刘守平;孔纪兰.钒氢化物电子结构的量子化学研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(07): 716-720
46. 陈文凯;曹梅娟;刘书红;许莹;李奕;李俊箴.苯分子在Cu(100)面平板模型上吸附的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(08): 903-908
47. 李会英;蒲敏;陈标华.DFT法研究分子筛催化 $trans$ -2-丁烯的双键异构[J]. 物理化学学报, 2005,21(08): 898-902
48. 和芹;周立新.铂配合物与DNA碱基对间相互作用的理论研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(08): 846-851
49. 王艳花;邹建卫;胡桂香;郑柯文;俞庆森.吡咯啉酮模型化合物与氨亲核加成的理论探讨[J]. 物理化学学报,

50. 王永成;戴国梁;耿志远;吕玲玲;王冬梅. 乙烯自由基与臭氧反应的DFT计算研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(09): 1071-1077
51. 蒲敏;陈标华;李会英;刘坤辉.DFT法研究离子液中EMIM<sup>+</sup>催化丁烯双键异构反应机理(II)[J]. 物理化学学报, 2005,21(04): 383-387
52. 任彦亮;万坚;刘俊军;万洪文. 吡吩垂直激发态的理论研究方法的比较[J]. 物理化学学报, 2004,20(09): 1089-1092
53. 陈人杰;吴锋. 高氯酸锂-乙酰胺新型二元熔盐电解质的谱学研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(02): 177-181
54. 周俊红;曾艳丽;孟令鹏;郑世钧. ClO与ClO自由基反应机理及电子密度拓扑分析[J]. 物理化学学报, 2005,21(02): 166-172
55. 李永红;陈丽萍;徐文媛;洪三国. 2-溴丙酸气相热消除反应的机理[J]. 物理化学学报, 2003,19(05): 389-392
56. 徐艺军;李俊钺;章永凡;陈文凯. O<sub>2</sub>在MgO(001)完整和缺陷表面上的吸附[J]. 物理化学学报, 2003,19(05): 414-418
57. 邵晓红;张现仁;汪文川. 密度泛函与分子模拟计算介孔孔径分布比较[J]. 物理化学学报, 2003,19(06): 538-542
58. 黄寒;严欣激;毛宏颖;陈桥;钱惠琴;张建华;李海洋;何丕模;鲍世宁. 银(110)表面花有序薄膜电子态的研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(08): 892-896
59. 李宝宗. 6-硫代黄嘌呤互变异构体的密度泛函理论计算[J]. 物理化学学报, 2004,20(05): 503-506
60. 罗文华;蒙大桥;李赣;陈虎翅. Pu<sub>3</sub>M和PuM<sub>3</sub> (M=Ga, In, Sn, Ge)化合物的电子结构和形成热[J]. 物理化学学报, 2008,24(03): 388-392
61. 苗月;袁宏宽;陈洪. 双钙钛矿Sr<sub>2-x</sub>La<sub>x</sub>CrReO<sub>6</sub>的电子结构和磁性[J]. 物理化学学报, 2008,24(03): 448-452
62. 胥倩;倪哲明;潘国祥;陈丽涛;刘婷. 水滑石限域空间中Cl<sup>-</sup>与H<sub>2</sub>O的超分子作用[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 601-606
63. 吴阳;冯璐;张向东. C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>-H...X分子间氢键的理论计算[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 653-658
64. 李志伟;李香芝;许先芳;赵存元;陈六平. NaP<sub>4</sub>及其正负离子的结构和光谱性质[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 670-674
65. 梁初;黎光旭;蓝志强;刘奕新;韦文楼;郭进. LiAlH<sub>4</sub>与Li<sub>3</sub>AlH<sub>6</sub>的成键特性及热力学稳定性[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 686-690
66. 孙慧卿;丁少锋;王雨田;邓贝;范广涵. CdO及Cd<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>O化合物的结构、能量和电子性能分析[J]. 物理化学学报, 2008,24(07): 1233-1238
67. 罗世霞;张笑一;张思亭;朱淮武;胡继伟;卫钢. 巯基偶氮苯单分子电子传输的取代基效应[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1471-1476
68. 马文瑾;张献明;许小红;王艳宾;武海顺. C<sub>n</sub>Al<sub>2</sub> (n=1-10)团簇的结构特征与稳定性[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1477-1480
69. 王云海;刘永东;罗云敬;钟儒刚. 过氧亚硝酸与酪氨酸的反应机理[J]. 物理化学学报, 2008,24(07): 1207-1213
70. 张材荣 陈宏善 陈玉红 魏智强 蒲忠胜. 亚甲基富勒烯衍生物[6,6]-苯基-C<sub>61</sub>丁酸甲酯的密度泛函研究[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1353-1358
71. 张旭 储伟 陈建钧 戴晓雁. 甲醇钠引发的环氧乙烷开环聚合反应过程[J]. 物理化学学报, 2009,25(03): 451-456
72. 刘述斌. 概念密度泛函理论及近来的一些进展[J]. 物理化学学报, 2009,25(03): 590-600
73. 罗小艳;贾文红;张聪杰. In<sub>n</sub>Na和In<sub>n</sub>Na<sup>+</sup> (n=2-8)的团簇结构和电子性质[J]. 物理化学学报, 2009,25(02): 261-266
74. 洪功义;黎乐民;徐光宪;林宪杰. 单碳基团的键合异构现象[J]. 物理化学学报, 1995,11(06): 481-483
75. 孙宝珍;陈文凯;徐香兰. NO双分子在Cu<sub>2</sub>O(111)面吸附与解离的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(09): 1126-1131
76. 张华;陈小华;张振华;邱明. 接枝羟基对有限长碳纳米管电子结构的影响[J]. 物理化学学报, 2006,22(09): 1101-1105
77. 李权;黄方千. 邻二氮杂苯-水复合物的氢键结构与性质[J]. 物理化学学报, 2005,21(01): 52-56
78. 吴文娟;赖榕;郑康成;云逢存. 抗癌性咪唑啉啉衍生物的定量构效关系[J]. 物理化学学报, 2005,21(01): 28-32
79. 赵彦英;刘亚军;郑世钧;黄明宝;孟令鹏. 戊烯自由基阳离子的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2002,18(12): 1081-1086
80. 武海顺;许小红;马文瑾;贾建峰. AMT异构体互变机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(05): 408-413

81. 蒲敏;刘坤辉;李会英;陈标华.DFT法研究离子液中EMIM<sup>+</sup>催化丁烯双键异构反应机理[J]. 物理化学学报, 2004,20(08): 826-830
82. 吕海港;黎乐民.表观价态异常分子EuS<sub>2</sub>和Eu<sub>2</sub>S的泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(05): 413-418
83. 曹小龙;郭丽.多通道反应O(<sup>3</sup>P)+CH<sub>2</sub>F的理论研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(06): 642-646
84. 王利江;张聪杰;武海顺.C<sub>n</sub>B<sup>δ</sup>(δ=0, ±1; n =1~6)团簇的结构、稳定性和光谱[J]. 物理化学学报, 2005,21(03): 244-249
85. 李中华;王锐;陈振宇;韦永德;周百斌.用密度泛函方法研究α-[XMo<sub>12</sub>O<sub>40</sub>]<sup>n-</sup>杂多阴离子的振动光谱[J]. 物理化学学报, 2004,20(11): 1329-1334
86. 胡亚兰;黄锋;蒋辉;范崇旭;陈常英;陈冀胜.σ-芋螺毒素构效关系与分子设计[J]. 物理化学学报, 2005,21(05): 474-478
87. 杨兵;张海全;许海;郑岩;于景生;马於光;沈家骢.间位聚苯及其衍生物的构象与电子结构的理论研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(12): 1476-1480
88. 徐艺军;李俊钱;章永凡.O<sub>2</sub>在具有氧和镁缺陷MgO(001)表面的吸附[J]. 物理化学学报, 2003,19(09): 815-818
89. 史福强;姜小明;徐志成;安静仪;俞稼铺.吡咯-HCN体系在气相及溶液中相互作用的理论研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(11): 1324-1328
90. 王勇;李浩然;吴韬;王从敏;韩世钧.烷基咪唑型卤盐类离子液体的合成机理研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(05): 517-522
91. 王勇;李浩然;王从敏;许映杰;韩世钧.单重态二溴卡宾和甲醛环加成反应的量化研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(11): 1339-1344
92. 王树军;章应辉;阮文娟;罗代兵;朱志昂;田建国;刘智波.新型手性基团修饰的金属卟啉的合成及性质研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(08): 981-986
93. 田欣欣;张富强;冯瑞娟;武海顺.B<sub>28</sub>N<sub>28</sub>笼的稳定性及笼中四元环间键联类型对笼稳定性的影响[J]. 物理化学学报, 2006,22(08): 937-941
94. 晋春;贾银娟;王宝俊;范彬彬;马静红;李瑞丰.Y型分子筛中对称与不对称Co(II)Salen型席夫碱配合物的结构和催化性能[J]. 物理化学学报, 2006,22(08): 947-952
95. 孙科举;李微雪;冯兆池;李灿.Fe-AlPO<sub>4</sub>-5分子筛的共振拉曼光谱[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 606-610
96. 唐智勇;胡云楚;赵莹;刘述斌.氰乙基对几种芳胺结构和光谱的影响[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 701-706
97. 刘海洋;冷科;胡军;应晓;徐志广;张启光.A<sub>3</sub>型Corrolle中位取代基对其β位<sup>1</sup>H-NMR的影响[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 694-700
98. 辜家芳;陆春海;陈文凯;许莹;郑金德.气相和水溶液中铀酰配合物UO<sub>2</sub>L<sup>2-n\*a</sup><sub>n</sub> (L=F<sup>-</sup>, CO<sub>3</sub><sup>2-</sup>, NO<sub>3</sub><sup>-</sup>; n=0-6, a=1, 2)的结构和振动光谱[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 655-660
99. 倪哲明;毛江洪;潘国祥;胥倩;李小年.Pd催化甲醇裂解制氢的反应机理[J]. 物理化学学报, 2009,25(05): 876-882
100. 苏荣;薛卫东;冯勇;王建华;易丹.8-羟基喹啉铁配合物对锐钛矿型TiO<sub>2</sub>(101)表面的敏化机理[J]. 物理化学学报, 2009,25(05): 947-952
101. 陈琦丽;唐超群.N/F掺杂和N-F双掺杂锐钛矿相TiO<sub>2</sub>(101)表面电子结构的第一性原理计算[J]. 物理化学学报, 2009,25(05): 915-920
102. 齐齐;孙岳明;哈涌泉.1,8-萘酰亚胺类衍生物的结构及紫外-可见吸收光谱[J]. 物理化学学报, 2009,25(06): 1143-1148
103. 葛桂贤;唐光辉;井群;罗有华.CO与Pd<sub>n</sub>(n=1-8)团簇的相互作用[J]. 物理化学学报, 2009,25(06): 1195-1200
104. 孙秀良;黄崇品;张傑;陈标华.Beta分子筛中Al的分布和Brønsted酸的酸性强度[J]. 物理化学学报, 2009,25(06): 1136-1142
105. 徐四川;邓圣荣;马丽英;史强;葛茂发;张兴康.牛视紫红质蛋白质中视黄醛的活性位点[J]. 物理化学学报, 2009,25(07): 1290-1296
106. 倪碧莲;蔡亚萍;李奕;丁开宁;章永凡.不同覆盖度下Li原子在Si(001)表面上的吸附构型和电子结构[J]. 物理化学学报, 2009,25(08): 1535-1544
107. 刘洁翔;魏贤;张晓光;王桂香;韩恩山;王建国.NO<sub>x</sub>分子在[Ag]-AIMOR分子筛中的吸附[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 91-96
108. 张材荣;吴有智;陈玉红;陈宏善.有机染料敏化剂JK16和JK17的几何结构、电子结构及相关性质[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 53-60
109. 张富春;张志勇;张威虎;阎军峰;江妮.Pb<sub>x</sub>Sr<sub>1-x</sub>TiO<sub>3</sub>的电子结构[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 61-66
110. 于艳春;肖鹤鸣.琥珀酸二油脂磺酸钠的合成、结构及水合作用[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 30-34
111. 赵新新;陶向明;宓一鸣;谭明秋.Pt/Cu(001)-p(2×2)-O表面吸附结构的总能计算[J]. 物理化学学报,

112. 杜晔平;陈敬超;冯晶.不同 $\text{SnO}_2$ 晶体结构的力学性能及电子结构[J]. 物理化学学报, 2009,25(02): 278-284
113. 李葵英;郭静;刘通;周冰晶;李悦.掺镧多孔 $\text{TiO}_2$ 纳米晶表面电子结构与能量转换机制[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 2096-2101
114. 王小露;万辉;管国锋.[EPy]Cl和[EPy]Br离子对的气相和液相结构及阴阳离子间的相互作用[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 2077-2082
115. 毛江洪;倪哲明;潘国祥;胥倩.Cu催化水煤气的变换反应机理[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 2059-2064
116. 蒋仕宇;滕波涛;鲁继青;刘雪松;杨培芳;杨飞勇;罗孟飞.甲醛在 $\text{CeO}_2(111)$ 表面吸附的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 2025-2031
117. 李来才;王译伟;田安民.甲醇在Pt-Mo(111)/C表面上的吸附[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 2013-2018
118. 郑金德;陆春海;孙宝珍;陈文凯. $\text{N}_2$ 分子在 $\text{UO}(100)$ 表面的吸附与解离[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 1995-1999
119. 魏洪源;罗顺忠;刘国平;熊晓玲;宋宏涛.H原子在完美 $\delta$ -Pu金属体相中的扩散行为[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 1964-1968
120. 胡燕飞;孔凡杰;周春.3C-SiC的结构和热力学性质[J]. 物理化学学报, 2008,24(10): 1845-1849
121. 干琴芳;倪碧莲;李奕;丁开宁;章永凡.CO分子在 $\text{TiC}(001)$ 表面上的吸附构型与电子结构[J]. 物理化学学报, 2008,24(10): 1850-1858
122. 陈新;李瑛;蒋青.几种 $(\text{C}^{\wedge}\text{N})\text{Pt}^{\text{II}}\text{O}$ 型配合物的电子结构和紫外-可见吸收光谱[J]. 物理化学学报, 2008,24(10): 1797-1802
123. 李宗宝;姚凯伦;刘祖黎.有机-无机杂化化合物 $[\text{Cu}(\mu\text{-cbdca})(\text{H}_2\text{O})]_n$ 的电子结构及铁磁性[J]. 物理化学学报, 2008,24(09): 1681-1684
124. 黄永丽;刘志平.氢和硫原子在Pd、Au和Cu及PdAu、PdCu合金(111)表面吸附的密度泛函研究[J]. 物理化学学报, 2008,24(09): 1662-1668
125. 张士国;张立超;杨频.胞嘧啶与一氧化碳复合物的结构与性质[J]. 物理化学学报, 2008,24(09): 1637-1642
126. 李会学;王晓峰;董小宁;袁焜;朱元成;萧泰.烟酸二聚体的结构与性质[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 161-168
127. 刘海峰;闫华;刘志勇;王少龙.三氟化氯和水反应的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(07): 1099-1104
128. 林英武;王中华;聂长明;倪峰云.取代基对吡吩结构和性质的影响[J]. 物理化学学报, 2007,23(10): 1594-1598
129. 梁云霄;水淼;李榕生.硼/氮掺杂富勒烯 $\text{C}_{20}$ 的结构和稳定性[J]. 物理化学学报, 2007,23(10): 1647-1651
130. 徐灿;张小芳;陈亮;朱莉芳;张荣君.二氧化硅纳米线中振动模式奇偶振荡的理论研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(11): 1733-1737
131. 王罗新;刘勇;虞新林;李松年;王晓工. $\text{H}^+$ 、 $\text{NH}_4^+$ 对HMX的 $\text{N}-\text{NO}_2$ 键解离能的影响[J]. 物理化学学报, 2007,23(10): 1560-1564
132. 李会学;唐惠安;杨声;萧泰.3-(3'-吡啶基)-6-芳基-1,2,4-三唑并[3,4-b]-1,3,4-噻二唑衍生物基态和激发态性质[J]. 物理化学学报, 2007,23(11): 1781-1786
133. 姜勇;储伟;江成发;王耀红. $\text{Pd}_n(n=1-7)$ 团簇及其与甲烷相互作用的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(11): 1723-1727
134. 潘国祥;倪哲明;李小年.类水滑石主体层板与客体 $\text{CO}_3^{2-}$ 、 $\text{H}_2\text{O}$ 间的超分子作用[J]. 物理化学学报, 2007,23(08): 1195-1200
135. 张丽敏;范广涵;丁少锋.Mg、Zn掺杂AlN电子结构的第一性原理计算[J]. 物理化学学报, 2007,23(10): 1498-1502
136. 王艳宾;马文瑾;张静 武海顺. $\text{C}_n\text{Al}(n=2-11)$ 团簇的结构特征与稳定性[J]. 物理化学学报, 2007,23(06): 873-876
137. 杨作银;周宏伟;张敬畅;曹维良.Mg-Al类水滑石层板结构中Al/Mg比与稳定性的关系[J]. 物理化学学报, 2007,23(06): 795-800
138. 王溢磊;吴国是.香豆素衍生物的荧光发射能计算及XC泛函的合理选择[J]. 物理化学学报, 2007,23(12): 1831-1838
139. 李磊;桑革;张鹏程;蒋刚. $\sigma\text{-Al}_2\text{O}_3$ 阻氢微观机制研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(12): 1912-1916
140. 徐伯华;李来才;王欣;田安民. $\text{N}_5\text{H}_5$ 异构体的结构与稳定性的理论研究[J]. 物理化学学报, 2008,24(01): 67-73
141. 陈琨;范广涵;章勇;丁少锋.N掺杂p-型ZnO的第一性原理计算[J]. 物理化学学报, 2008,24(01): 61-66
142. 王溢磊;吴国是.ESIPT和TICT荧光发射的电子结构特征及发射能计算[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 552-560

143. 贝逸翎;主沉浮;刘庆阳;戚桂斌.卤代硅烷( $R_3SiX$ )与 $NR'_3$ 形成五配位硅化合物的加成反应[J]. 物理化学学报, 2008,24(02): 217-222
144. 纪永军;武海顺;张富强;贾建峰.( $MN$ ) $_nH_m$ ( $M=Ga, In; n=1-4; m=1, 2$ )团簇的结构与稳定性[J]. 物理化学学报, 2008,24(02): 257-262
145. 王琰;侯延冰;唐爱伟;封宾;李妍;滕枫.水相中CdTe纳米晶的制备及其光学性质[J]. 物理化学学报, 2008,24(02): 296-300
146. 王朝杰;蔡跃飘.铁原子与氮分子间的相互作用——单侧双配位构型[J]. 物理化学学报, 2008,24(02): 289-295
147. 欧阳方平;徐慧;李明君;肖金.Armchair型石墨纳米带的电子结构和输运性质[J]. 物理化学学报, 2008,24(02): 328-332
148. 胡海泉;李恒帅;崔守鑫;王文军.Fe/Cr超晶格的电子结构和磁性质[J]. 物理化学学报, 2007,23(06): 846-850
149. 张静;王艳宾;武海顺.(BCO) $_n^+$ ( $n=1-12$ )团簇的结构与稳定性[J]. 物理化学学报, 2007,23(05): 733-737
150. 李思殿;郭巧凌;苗常青;任光明.含平面配位碳的过渡金属羧配合物 $M_nH_nC$ 密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(05): 743-745
151. 张建华;庄友谊;吴悦;鲍世宁;刘凤琴;奎热西·易卜拉欣;钱海杰.己烯在Ru(1010)表面价带电子特性研究[J]. 物理化学学报, 2002,18(05): 437-440
152. 蒲敏;王海霞;冯霄;吴东;孙予罕.DFT法研究3-羟基丙烯醛的双键旋转异构反应机理[J]. 物理化学学报, 2002,18(06): 522-526
153. 杨刚;龙翔云;杨高文;曾小君.二苯并四氮杂[14]轮烯金属配合物电子结构和性质 [J]. 物理化学学报, 2002,18(02): 100-105
154. 于海涛;池玉娟;傅宏刚;黄旭日;孙家锤.HBO $_2$ 异构体的结构和相对稳定性[J]. 物理化学学报, 2002,18(01): 87-90
155. 施申蕾;楼辉;张建华;吕萍;江宁;何丕模;鲍世宁.COT-H在金属Ru表面上沉积的光电子能谱分析[J]. 物理化学学报, 2002,18(01): 30-33
156. 谭金芝;肖鹤鸣;贡雪东;李金山.硝酸甲酯分子间相互作用的DFT和*ab initio*比较[J]. 物理化学学报, 2002,18(04): 307-314
157. 傅爱萍;杜冬梅;周正宇;俞庆森.金属原子(离子)-苯配合物的电子转移反应[J]. 物理化学学报, 2000,16(04): 317-324
158. 吴卫东;张古文;罗江山;唐永建;郑永铭;陆晓明;赵鹏骥.Cu $_x$ C $_{60}$ 薄膜紫外-可见吸收光谱研究[J]. 物理化学学报, 2001,17(01): 83-86
159. 陈常英;丁晓琴;冯珊.西加毒素(CTX)的电子结构及构效关系研究[J]. 物理化学学报, 2000,16(04): 307-311
160. 李富友;郑杰;柳汀汀;金林培;赵新生;郭建权.“推拉”型希夫碱染料的光化学和光电化学性质[J]. 物理化学学报, 2000,16(09): 787-791
161. 仇永清;刘春光;陈徽;苏忠民;杨国春;王荣顺.具有三维结构的Co(II)配合物二阶非线性光学性质的DFT研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(07): 836-839
162. 张志强;屈一新;任慧.纳米二氧化硅物理吸附乙醇的密度泛函研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(07): 820-825
163. 王利江;张聪杰.B $_2$ C $_n^+$ ( $n=1\sim 9$ )团簇的结构及其稳定性[J]. 物理化学学报, 2006,22(06): 726-731
164. 陈波珍;黄明宝.HCS自由基超精细结构的密度泛函理论计算[J]. 物理化学学报, 1999,15(08): 673-675
165. 李权;刘晓亚;高涛;朱正和;傅依备;汪小琳;孙颖.PuO $^{n+}$ 的势能函数的稳定性[J]. 物理化学学报, 2000,16(11): 987-991
166. 徐国亮.原子个数 $n$ 对碳分子线C $_n$ ( $n=3\sim 10$ )基态结构特性的影响[J]. 物理化学学报, 2006,22(06): 701-705
167. 郑康成;陈忠宁;黄加多;刘汉钦.草酰胺桥联双核铜配合物结构单元的从头算[J]. 物理化学学报, 1999,15(03): 204-209
168. 张晓清;贾建峰;武海顺;裴晓琴.羰基硼化合物(BCO) $_n$ ( $n=1\sim 12$ )的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(06): 684-690
169. 贡雪东;肖鹤鸣.丁二酰亚胺的结构、振动频率和热力学性质计算[J]. 物理化学学报, 1999,15(08): 688-692
170. 李文;张瑞林;余瑞璜.Ti-Al系金属间化合物的价电子结构分析[J]. 物理化学学报, 1999,15(09): 824-829
171. 陈波珍;黄明宝;颜达予.(CH $_2$ ) $_2$ N和(CH $_3$ ) $_2$ NH $^+$ 的密度泛函理论计算[J]. 物理化学学报, 1999,15(06): 495-499
172. 张琳;赵良仲;张金彪;徐翠英;刘世宏.BaK $PbO$ 和BaK $PbBiO$ 的熔盐阳极电结晶[J]. 物理化学学报, 1999,15(11): 1049-1052

173. 周立新; 莽朝永; 章永凡. 1,2-二硫方酸的气相酸性和芳香性[J]. 物理化学学报, 2000,16(01): 15-21
174. 喻典; 陈志达; 王繁; 李述周. 元素电负性和硬度的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2001,17(01): 15-22
175. 郭森立; 侯廷军; 徐筱杰; 张斌; 朱道本. 一个新BEDT-TTF电荷转移盐的晶体结构预测[J]. 物理化学学报, 2002,18(04): 289-91
176. 李权; 徐成刚; 王红艳; 朱正和.  $\text{PuH}_2$  气态分子热力学稳定性的理论研究[J]. 物理化学学报, 2002,18(10): 952-955
177. 陈文凯; 许娇; 章永凡; 周立新; 李俊箴. 2-羟基吡啶质子转移过程的理论研究[J]. 物理化学学报, 2002,18(09): 802-807
178. 李凤仪; 徐文媛; 余军文. 二氯甲基硅烷醇解的量化计算[J]. 物理化学学报, 2003,19(04): 338-341
179. 张远; 曹爱年; 孙岳明; 刘举正; 顾璠. NO双分子和二聚体与 $\text{Cu}_2$ 作用的理论计算[J]. 物理化学学报, 2003,19(03): 193-197
180. 邱丽美; 刘芬; 赵良仲. K-Pb-Tl-O复合氧化物的合成和电子结构的XPS研究 [J]. 物理化学学报, 2002,18(07): 633-635
181. 曹阳; 吕春绪; 吕早生; 蔡春; 魏运洋; 李斌栋. 硝酰阳离子和二氧化氮分子的弯曲变形研究[J]. 物理化学学报, 2002,18(06): 527-531
182. 蔡建秋; 陶向明; 谭明秋. 氢原子吸附的Cu(100)表面原子结构和电子态[J]. 物理化学学报, 2007,23(03): 355-360
183. 王云海; 刘永东; 罗云敬; 张伟; 钟儒刚. 过氧亚硝酸与苯酚的反应机理理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(10): 1266-1271
184. 董南; 朱龙观; 吴念慈.  $\text{La}(\text{NO}_3)_3 \cdot \text{bipy} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  (B-15-C-5) 电子结构和电化学键[J]. 物理化学学报, 1993,9(02): 252-255
185. 黎乐民.  $[\text{Nd}(\text{SSCNH}_2)_4]^-$  的电子结构 一种有机硫配位镧系络合物的模型阴离子[J]. 物理化学学报, 1992,8(01): 10-17
186. 李丽; 吴锋; 陈实; 陈人杰.  $\text{LaNi}_5\text{-xCox}$  合金电子结构的第一性原理分析[J]. 物理化学学报, 2006,22(11): 1331-1336
187. 倪敏; 贺黎明; 金乾元; 刘洪霖. 非晶态Co-B的局域电子结构的 $X_{\text{O}}$ 原子簇计算[J]. 物理化学学报, 1992,8(04): 550-554
188. 刘光华; 黎乐民; 徐光宪; 梁珍璇. 五配位双核铁簇合物的电子结构研究[J]. 物理化学学报, 1991,7(01): 64-71
189. 叶元杰. 蛋白质的电子结构与活性关系——理论与计算方法[J]. 物理化学学报, 1991,7(03): 257-259
190. 陈学安; 傅亨; 唐有祺; 朱敏慧; 徐江. 结构调制对 $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CuO}_6$  电子结构的影响[J]. 物理化学学报, 1991,7(04): 396-399
191. 杨振; 徐志军; 杨晓宁. 基于密度泛函理论研究二元排斥Yukawa流体的表面结构性质[J]. 物理化学学报, 2006,22(12): 1460-1465
192. 张树强; 王雅琼; 郑旭明. 硝基烃光异构化反应的密度泛函理论计算[J]. 物理化学学报, 2006,22(12): 1489-1494
193. 贾建峰; 武海顺. BN纳米管内含C纳米管——结构与电学性质[J]. 物理化学学报, 2006,22(12): 1520-1525
194. 李权; 李德华; 盛勇; 朱正和.  $\text{PdY}^{n\pm}$  ( $n=0, 1, 2, 3$ ) 分子离子的结构与稳定性[J]. 物理化学学报, 2006,22(12): 1516-1519
195. 马文瑾; 王艳宾; 张静; 武海顺.  $\text{BmN}$  ( $m=2\sim 9$ ) 团簇结构的特征与稳定性[J]. 物理化学学报, 2007,23(02): 169-172
196. 孟现美; 黄晓明; 王传奎. 有机杂环分子的双光子吸收特性[J]. 物理化学学报, 2007,23(02): 228-231
197. 田蒙奎; 蒋丽; 上官文峰; 王世杰; 欧阳自远. 可见光响应光催化剂 $\text{K}_4\text{Ce}_2\text{Ta}_{10}\text{O}_{30}$ 、 $\text{K}_4\text{Ce}_2\text{Nb}_{10}\text{O}_{30}$ 及其固溶体的电子结构[J]. 物理化学学报, 2007,23(04): 466-472
198. 蒋仕宇; 滕波涛; 袁金焕; 郭晓伟; 罗孟飞. CO在 $\text{CeO}_2$ (111)表面的吸附与氧化[J]. 物理化学学报, 2009,25(08): 1629-1634
199. 梁晓静; 崔丽; 吴德印; 田中群. 腺嘌呤和质子化腺嘌呤的结构和振动光谱[J]. 物理化学学报, 2009,25(08): 1605-1610
200. 吴阳; 张甜甜; 于宁. 1-乙基-3-甲基咪唑阳离子与天冬酰胺阴离子的相互作用[J]. 物理化学学报, 2009,25(08): 1689-1696
201. 杨相艳; 张宜恒; 丁兰; 汪汉卿. 一种天然产物Wangzaozin A的细胞毒活性[J]. 物理化学学报, 2009,25(09): 1749-1755
202. 陈毓敏; 邓珂; 裘晓辉; 王琛. 一氧化碳共吸附法确定叔丁胺分子在Cu(111)表面的吸附位[J]. 物理化学学报, 2009,25(08): 1485-1489
203. 原现瑞; 尚振华; 李润岩; 刘英华; 陈晓霞; 张慧丽; 修勇. *N'*-苄基酰胺分子的氮-氮键旋转位阻及分子构象[J]. 物理化学学报, 2009,25(09): 1785-1790

204. 罗姗姗, 仇永清, 刘晓东, 刘春光, 苏忠民. 含有噻唑生色团的Y-型有机分子的二阶非线性光学性质[J]. 物理化学学报, 2009,25(09): 1867-1873
205. 张美一, 何广智, 丁程程, 陈灏, 潘纲. As(V)在TiO<sub>2</sub>表面的吸附机理[J]. 物理化学学报, 2009,25(10): 2034-2038
206. 梁锦霞, 贾文红, 张聪杰, 曹泽星. 包含平面四配位和五配位碳原子的特殊硼碳化合物[J]. 物理化学学报, 2009,25(09): 1847-1852
207. 张福兰, 李来才, 田安民. 乙烷在Ni(111)表面的吸附和分解[J]. 物理化学学报, 2009,25(09): 1883-1889
208. 应晓, 彭春超, 汤安民, 王晓纯, 刘海洋, 张启光. 手性联萘桥联双卟啉的电子光谱与二阶非线性光学性质[J]. 物理化学学报, 2009,25(09): 1895-1905
209. 詹卫伸, 潘石, 李源作, 陈茂笃. 二氢卟啉类染料用于染料敏化太阳能电池光敏剂的比较[J]. 物理化学学报, 2009,25(10): 2087-2092
210. 朱玥, 蒲敏, 何静, EVANS David G.. 偶氮苯磺酸衍生物的光致顺反异构化机理[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
211. 赵新新, 陶向明, 宓一鸣, 谭明秋. Ni(110)-p2mg(2×1)-CO表面的原子结构和电子态[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
212. 杨宗献, 于小虎, 马东伟. 氧原子在具有Pt皮肤的Pt<sub>3</sub>Ni(111)表面的吸附和扩散[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
213. 倪哲明, 胥倩, 姚萍, 毛江洪, 刘晓明. 层间水含量对Mg<sub>3</sub>Al-LDHs-Cl力学特性的影响[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
214. 吕存琴, 凌开成, 王贵昌. 甲胺在清洁及磷改性Mo(100)表面的解离[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
215. 刘洁翔, 魏贤, 张晓光, 韩恩山. Cu-[M']MOR和Ag-[M']MOR (M'=B, Al, Ga, Fe)的酸性[J]. 物理化学学报, 2009,25(10): 2123-2129
216. 陈锦灿, 陈兰美, 廖思燕, 郑康成. 抗癌性钌配合物[HL][trans-Ru<sup>III</sup>Cl<sub>4</sub>L<sub>2</sub>](L=2-NH<sub>2</sub>-5-Me-STz)的水解机理[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
217. 左志军, 黄伟, 韩培德, 李志红. CO和H<sub>2</sub>在Cu(111)面的吸附和溶剂化效应[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
218. 刘建才, 张新明, 陈明安, 唐建国, 刘胜胆. 密度泛函理论预测微量元素在Al(100)表面的偏聚[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
219. 赵亚华. 含有一个非平面杂环胺配体的新型反铂抗癌药物的水解机理[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0