

偶氮苯磺酸衍生物的光致顺反异构化机理

朱玥, 蒲敏, 何静, EVANS David G.

北京化工大学化工资源有效利用国家重点实验室, 北京 100029

摘要:

基于密度泛函理论(DFT)中的B3LYP方法, 在6-311++G(d,p)水平上全优化得到了3,3'-偶氮苯磺酸(3,3'-AbS)在S0和T1态顺反异构化机理. 在S0态存在两种异构化途径: 绕角NNC反转和绕NC键旋转相结合的形式和单纯的绕CNCC二面角旋转形式, 两种异构化途径的能垒分别为94.2和124.3 kJ·mol⁻¹. 有必要指出的是, 在反转与旋转结合的途径上存在二次过渡态. 在T1态上仅存在旋转途径且其能垒为21.1 kJ·mol⁻¹. 采用含时密度泛函理论(TD-DFT), 在B3LYP/6-311++G(d,p)水平上, 沿着基态的两种异构化途径计算得到了T1, S1, T2和S2态的垂直激发的势能剖面, 分析了可能的光致异构化途径. 当激发光波长为330 nm时, 反应物分子被激发到S2态, 然后弛豫到较低的能态S1发生异构化反应, 旋转途径存在两条活化途径: (1) 沿着S1/S0的圆锥交叉点衰变到产物; (2) 由S1态弛豫到T1态后, 在S0-T1-S0的区域发生异构化, 再转化到产物. 计算结果表明, 3,3'-AbS通过反转和旋转的结合形式实现在S0态的异构化, 而被激发后倾向于沿着旋转坐标作为其主要的异构化途径.

关键词: 密度泛函理论 3,3'-偶氮苯磺酸 光异构化机理 激发态 势能面

收稿日期 2009-04-21 修回日期 2009-07-04 网络版发布日期 2009-08-24

通讯作者: 蒲敏 Email: pumin@mail.buct.edu.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. 郭彩红; 贾建峰; 郭玲; 武海顺. Ga_xP_y (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
3. 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
4. 崔明侠; 董士红; 王文亮; 尹世伟; 吕剑. 4-(1,2-二苯基)乙烯基-4'-(N,N-二苯基-4-乙烯基苯胺基)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
5. 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
6. 曹泽星; 黄宏新; 田安民. O₃⁻ 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
7. 汪志祥; 刘若庄; 黄明宝. NFCI自由基的理论研究[J]. 物理化学学报, 1996,12(02): 105-108
8. 王泽新; 陈守刚; 乔青安; 张文霞. 氧原子和羟基在Ni低指数表面的吸附动力学研究[J]. 物理化学学报, 2001,17(11): 1006-1012
9. 先晖; 谢代前; 鄢国森. O₃ 势能面和振动激发态的理论研究[J]. 物理化学学报, 1997,13(10): 865-867
10. 陈锦灿; 李俊; 吴文娟; 郑康成. 系列异构配合物Ru(azpy)₂Cl₂ 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. 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
13. 李西平; 涂学炎. ZnNe低激发态的量子化学研究[J]. 物理化学学报, 2000,16(03): 238-242
14. 薛卫东; 张广丰; 朱正和; 汪小琳; 罗德礼; 邹乐西; 孙颖. CO₂ 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
15. 武海顺; 许小红; 张聪杰; 张富强. (XN)₄R₄簇合物的结构与化学键 [J]. 物理化学学报, 2002,18(02): 127-130
16. 刘幼成; 蒋刚; 朱正和. NX(X=F,Cl,Br)分子结构与极化函数轨道的作用 [J]. 物理化学学报, 2002,18(02): 117-121

扩展功能

本文信息

PDF(1662KB)

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

▶ 密度泛函理论

▶ 3,3'-偶氮苯磺酸

▶ 光异构化机理

▶ 激发态

▶ 势能面

本文作者相关文章

▶ 朱玥

▶ 蒲敏

▶ 何静

▶ EVANS David G.

17. 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
18. 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
19. 王宝山;郭敬忠;顾月姝;毛文涛;孔繁放. $CO(\nu)$ 高振动激发态向 C_2H_2 的振动传能研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(04): 327-331
20. 王胜龙;屈军艳;郭锐;赵新生. ArH^+ 势能曲线的从头计算[J]. 物理化学学报, 2001,17(04): 289-291
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. 廖结楼;辛厚文.势能面拓扑结构失稳与 $A + B_2$ 反应途径分叉条件[J]. 物理化学学报, 1995,11(03): 247-251
25. 张华北, 田安民, 鄢国森. Li_2B_2 的几何结构和垂直激发态光谱的量子化学研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(02): 142-146
26. 赵梅山.SPK势能面上 Cl 和 H_2 反应的量子动力学计算[J]. 物理化学学报, 1994,10(09): 818-824
27. 汪鹏飞;吴世康.4'- N,N -二甲氨基黄酮类衍生物的发光行为研究[J]. 物理化学学报, 1994,10(08): 744-749
28. 张华北;田安民;鄢国森. Li_3Al 和 Li_2B_2 的稳定性和垂直激发态光谱[J]. 物理化学学报, 1994,10(06): 481-483
29. 曹泽星;田安民;鄢国森.HCB和 HCB^- 的激发态光谱与态-态转化的理论研究[J]. 物理化学学报, 1994,10(05): 387-390
30. 张敬来;曹泽星;顾健德;田安民;鄢国森. Si_2 分子基态和低激发态的电子结构[J]. 物理化学学报, 1994,10(05): 396-398
31. 李全新;俞书勤;陈从香;马兴孝. C_2H_4-K 体系中振动态至电子态传能的研究[J]. 物理化学学报, 1994,10(04): 330-335
32. 杨丕鹏.定量共振论与MO的关系——奇共轭烃的激发态[J]. 物理化学学报, 1994,10(01): 77-81
33. 矫玉秋;孙强;范镛. $Au(I)$ 炔基配合物激发态性质的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(10): 1196-1200
34. 陈晓霞;王永成;耿志远;高立国;方冉;张兴辉.气相中 CrO_2^+ 和 H_2 反应的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(01): 59-64
35. 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
36. 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
37. 李强;毛文涛;李红志;朱起鹤;孔繁放;黄明宝.乙酰基的电子激发态[J]. 物理化学学报, 1997,13(10): 879-884
38. 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
39. 谢安东;施德恒;朱遵略;朱正和.BH分子 $X^1\Sigma^+$ 、 $A^1\Pi$ 和 $B^1\Sigma^+$ 态的势能函数[J]. 物理化学学报, 2005,21(06): 658-662
40. 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
41. 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
42. 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
43. 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
44. 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
45. 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
46. 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
47. 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
48. 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
49. 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

50. 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
51. 黄宏新.精确固定节面量子Monte Carlo差值法[J]. 物理化学学报, 2005,21(06): 632-636
52. 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
53. 陈文凯;曹梅娟;刘书红;许莹;李奕;李俊钺.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
54. 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
55. 韩克利.非绝热量子散射动力学[J]. 物理化学学报, 2004,20(08S): 1032-1036
56. 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
57. 王艳花;邹建卫;胡桂香;郑柯文;俞庆森.吡咯喹啉醌模型化合物与氨亲核加成的理论探讨[J]. 物理化学学报, 2004,20(09): 1129-1133
58. 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
59. 张东东, 周立新.含平面胺配体的反式二价钡配合物与DNA碱基的作用[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
60. 张树东, 张海芳, 曾文碧.1-萘酚的紫外共振双光子电离光谱[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
61. 王清高, 杨宗献, 危书义.水分子和二氧化铈(111)表面相互作用的DFT+ U 研究[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
62. 周建华;马万勇;姜海辉;张纪明;王少坤;顾月姝.高振动激发态吡啶碰撞传能的QCT计算研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(04): 388-391
63. 蒲敏;陈标华;李会英;刘坤辉.DFT法研究离子液中EMIM⁺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
64. 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
65. 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
66. 周俊红;曾艳丽;孟令鹏;郑世钧.CIO与CIO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
67. 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
68. 张文霞;田凤惠;陈守刚;王泽新.两体扰动势和 H_2O 通道反应的三原子体系解析势[J]. 物理化学学报, 2003,19(06): 543-548
69. 徐艺军;李俊钺;章永凡;陈文凯. O_2 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
70. 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
71. 王珺;郭迎春;杨晓华;吴升海;刘煜炎;陈扬毅.CASSCF方法对 H_2O^+ 激发态势能面的研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(08): 877-881
72. 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
73. 蔡孟秋;唐璧玉;杨国伟;杨益明;韩克利.碰撞能量对反应 $Sr+HF$ 转动取向的影响[J]. 物理化学学报, 2001,17(06): 521-525
74. 苗月;袁宏宽;陈洪.双钙钛矿 $Sr_{2-x}La_xCrReO_6$ 的电子结构和磁性[J]. 物理化学学报, 2008,24(03): 448-452
75. 胥倩;倪哲明;潘国祥;陈丽涛;刘婷.水滑石限域空间中 Cl^- 与 H_2O 的超分子作用[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 601-606
76. 吴阳;冯璐;张向东. $C_6H_5-H...X$ 分子间氢键的理论计算[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 653-658
77. 李志伟;李香芝;许先芳;赵存元;陈六平. NaP_4 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
78. 孙慧卿;丁少锋;王雨田;邓贝;范广涵. CdO 及 $Cd_xZn_{1-x}O$ 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
79. 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
80. 马文瑾;张献明;许小红;王艳宾;武海顺. C_nAl_2 ($n=1-10$)团簇的结构特征与稳定性[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1477-1480
81. 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

82. 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-C₆₁-丁酸甲酯的密度泛函研究[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1353-1358
83. 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
84. 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
85. 罗小艳; 贾文红; 张聪杰. In_nNa和In_nNa⁺ (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
86. 洪功义; 黎乐民; 徐光宪; 林宪杰. 单羰基钨的键合异构现象[J]. 物理化学学报, 1995,11(06): 481-483
87. 孙宝珍; 陈文凯; 徐香兰. NO双分子在Cu₂O(111)面吸附与解离的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(09): 1126-1131
88. 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
89. 李权; 黄方千. 邻二氯杂苯-水复合物的氢键结构与性质[J]. 物理化学学报, 2005,21(01): 52-56
90. 吴文娟; 赖璐; 郑康成; 云逢存. 抗癌性咪唑啉衍生物的定量构效关系[J]. 物理化学学报, 2005,21(01): 28-32
91. 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
92. 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
93. 蒲敏; 刘坤辉; 李会英; 陈标华. DFT法研究离子液中EMIM⁺催化丁烯双键异构反应机理[J]. 物理化学学报, 2004,20(08): 826-830
94. 吕海港; 黎乐民. 表现价态异常分子EuS₂和Eu₂S的泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(05): 413-418
95. 曹小龙; 郭丽. 多通道反应O(³P)+CH₂F的理论研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(06): 642-646
96. 王利江; 张聪杰; 武海顺. C_nB^δ (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
97. 凤尔银; 黄武英; 董书宝; 崔执凤. He-LiH体系转动非弹性碰撞的理论研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(03): 250-254
98. 李中华; 王锐; 陈振宁; 韦永德; 周百斌. 用密度泛函方法研究α-[XMo₁₂O₄₀]ⁿ⁻杂多阴离子的振动光谱[J]. 物理化学学报, 2004,20(11): 1329-1334
99. 徐艺军; 李俊钺; 章超凡. O₂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
100. 史福强; 姜小明; 徐志成; 安静仪; 俞稼镛. 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
101. 王勇; 李浩然; 吴韬; 王从敏; 韩世钧. 烷基咪唑啉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
102. 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
103. 田欣欣; 张富强; 冯瑞娟; 武海顺. B₂₈N₂₈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
104. 晋春; 贾银娟; 王宝骏; 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
105. 郭建新; 张启元. 二苯基-2-吡啶啉等分子内电子转移的研究[J]. 物理化学学报, 1996,12(09): 780-785
106. 张积树; 张文霞; 王泽新. 氢原子在钼低指数表面上的吸附和扩散[J]. 物理化学学报, 1996,12(09): 773-779
107. 孙科举 李微雪 冯兆池 李灿. Fe-AlPO₄-5分子筛的共振拉曼光谱[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 606-610
108. 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
109. 刘海洋 冷科 胡军 应晓 徐志广 张启光. A₃型Corrole中位取代基对其β位¹H-NMR的影响[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 694-700
110. 辜家芳 陆春海 陈文凯 许莹 郑金德. 气相和水溶液中铈酰配合物UO₂L^{2-n*} (L=F⁻, CO₃²⁻, NO₃⁻; 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
111. 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
112. 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TiO₂(101)表面的敏化机理[J]. 物理化学学报, 2009,25(05): 947-952

113. 许海 何凤 杨兵 张厚玉 刘随军 谷新 刘丹丹 刘晓冬 于景生 马於光. 联苯桥联的聚对苯乙烯撑齐聚物基态、激发态的结构与光电性能[J]. 物理化学学报, 2009,25(05): 869-875
114. 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
115. 葛桂贤, 唐光辉, 井群, 罗有华. CO与Pd_n(n=1-8)团簇的相互作用[J]. 物理化学学报, 2009,25(06): 1195-1200
116. 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
117. 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
118. 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
119. 郑铮, 刘振明, 张亮仁. 一种确定反应中间态几何特征和能量的综合性方法[J]. 物理化学学报, 2009,25(07): 1439-1442
120. 刘洁翔; 魏贤; 张晓光; 王桂香; 韩恩山; 王建国. NO_x分子在[Ag]-AIMOR分子筛中的吸附[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 91-96
121. 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
122. 张富春; 张志勇; 张威虎; 阎军峰; 江妮. Pb_xSr_{1-x}TiO₃的电子结构[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 61-66
123. 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
124. 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, 2009,25(03): 567-574
125. 张建坡 周欣 白福全 张红星. 一类[Os^(II)(CO)₃(tfa)(L)](L=O[^]O, O[^]N, N[^]N)配合物的结构和光谱特征[J]. 物理化学学报, 2008,24(12): 2243-2248
126. 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
127. 高立国; 宋小利; 陈晓霞; 王永成. 气相中Y⁺活化CS₂中的C—S键[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 2083-2088
128. 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
129. 蒋仕宇; 滕波涛; 鲁继青; 刘雪松; 杨培芳; 杨飞勇; 罗孟飞. 甲醛在CeO₂(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
130. 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
131. 郑金德; 陆春海; 孙宝珍; 陈文凯. N₂分子在UO(100)表面的吸附与解离[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 1995-1999
132. 魏洪源; 罗顺忠; 刘国平; 熊晓玲; 宋宏涛. H原子在完美δ-Pu金属体相中的扩散行为[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 1964-1968
133. 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
134. 干琴芳; 倪碧莲; 李奕; 丁开宁; 章永凡. CO分子在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
135. 陈新; 李瑛; 蒋青. 几种(C[^]N)Pt^{II}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
136. 李宗宝; 姚凯伦; 刘祖黎. 有机-无机杂化化合物[Cu(μ-cbdca)(H₂O)]_n的电子结构及铁磁性[J]. 物理化学学报, 2008,24(09): 1681-1684
137. 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
138. 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
139. 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
140. 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
141. 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
142. 梁云霄; 水淼; 李榕生. 硼/氮掺杂富勒烯C₂₀的结构和稳定性[J]. 物理化学学报, 2007,23(10): 1647-1651
143. 路熙; 王华阳; 蔡政亭; 冯大诚. 一种计算Feshbach共振态寿命的新方法[J]. 物理化学学报, 2007,23(06): 929-931

144. 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
145. 王罗新;刘勇;虞新林;李松年;王晓工. H^+ 、 NH_4^+ 对HMX的N— NO_2 键解离能的影响[J]. 物理化学学报, 2007,23(10): 1560-1564
146. 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
147. 姜勇;储伟;江成发;王耀红. 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
148. 潘国祥;倪哲明;李小年.类水滑石主体层板与客体 CO_3^{2-} 、 H_2O 间的超分子作用[J]. 物理化学学报, 2007,23(08): 1195-1200
149. 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
150. 王艳宾;马文瑾;张静 武海顺. C_nAl ($n=2-11$)团簇的结构特征与稳定性[J]. 物理化学学报, 2007,23(06): 873-876
151. 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
152. 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
153. 李磊;桑革;张鹏程;蒋刚. $\alpha-Al_2O_3$ 阻氢微观机制研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(12): 1912-1916
154. 吴广新;张捷宇;吴永全;李谦;周国治;包新华.H在Mg(0001)表面吸附、解离和扩散的第一性原理研究[J]. 物理化学学报, 2008,24(01): 55-60
155. 徐伯华;李来才;王欣;田安民. N_5H_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
156. 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
157. 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
158. 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
159. 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
160. 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
161. 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
162. 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
163. 徐国亮;肖小红;刘玉芳;孙金锋;朱正和.外电场作用下甲基乙烯基硅酮分子结构和电子光谱[J]. 物理化学学报, 2007,23(05): 746-750
164. 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
165. 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
166. 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
167. 刘建军;封继康;付伟;任爱民;刘桂霞. $^1CH_2 + N_2O$ 反应的势能面[J]. 物理化学学报, 2001,17(07): 586-593
168. 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
169. 沈关林;张敏;董峰;李学初;王秀岩. $NH_2(A^2A_1, 090, 4_2, 3)$ 的电子猝灭和转动态-态传能 [J]. 物理化学学报, 2001,17(09): 840-844
170. 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
171. 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
172. 王利江;张聪杰. $B_2C_n^+$ ($n=1\sim 9$)团簇的结构及其稳定性[J]. 物理化学学报, 2006,22(06): 726-731
173. 张云光;高涛;李桂霞;张传瑜;陈东;朱正和. He_2^+ 和 He_2^{++} 分子离子基态和激发态的特性研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(07): 780-785
174. 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

175. 李权;刘晓亚;高涛;朱正和;傅依备;汪小琳;孙颖.PuOⁿ⁺的势能函数的稳定性[J]. 物理化学学报, 2000,16(11): 987-991
176. 张晓清;贾建峰;武海顺;裴晓琴.羰基硼化合物(BCO)_n(n=1~12)的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(06): 684-690
177. 黄宏新;曾宪标.量子Monte Carlo处理激发态[J]. 物理化学学报, 2000,16(08): 681-688
178. 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
179. 侯华;王宝山;顾月姝.F+NCO反应的机理和动力学[J]. 物理化学学报, 2000,16(06): 517-521
180. 陈波珍;黄明宝;颜达予.(CH₂)₂N和(CH₃)₂NH⁺的密度泛函理论计算[J]. 物理化学学报, 1999,15(06): 495-499
181. 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
182. 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
183. 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
184. 李权;徐成刚;王红艳;朱正和.PuH₂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
185. 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
186. 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
187. 刘国跃;孙卫国;冯灏.部分卤素双原子分子激发态的势函数[J]. 物理化学学报, 2003,19(04): 293-296
188. 张远;曹爱年;孙岳明;刘举正;顾璠.NO双分子和二聚体与Cu₂作用的理论计算[J]. 物理化学学报, 2003,19(03): 193-197
189. 宋争林;张复实;陈锡侨;赵福群.酞菁基态和激发态的计算[J]. 物理化学学报, 2003,19(02): 130-133
190. 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
191. 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
192. 许宗荣;高艳玲.三原子分子振动光谱的相互作用模式计算[J]. 物理化学学报, 1996,12(06): 555-559
193. 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
194. 王志麟;杨明;郑企克.配位体SO₄²⁻对激发态铀(VI)去活化的影响[J]. 物理化学学报, 1993,9(04): 569-574
195. 汪鹏飞;吴世康.分子内电荷转移化合物的光谱和光物理[J]. 物理化学学报, 1992,8(03): 405-409
196. 许宗荣;田之悦.分子离子NO⁺激发态的势能函数[J]. 物理化学学报, 1991,7(03): 342-344
197. 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
198. 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
199. 李权;李德华;盛勇;朱正和.PdY^{n±}(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
200. 马文瑾;王艳宾;张静;武海顺 .BmN (m=2~9)团簇结构的特征与稳定性[J]. 物理化学学报, 2007,23(02): 169-172
201. 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
202. 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K₄Ce₂Ta₁₀O₃₀、K₄Ce₂Nb₁₀O₃₀及其固溶体的电子结构[J]. 物理化学学报, 2007,23(04): 466-472
203. 蒋仕宇;滕波涛;袁金焕;郭晓伟;罗孟飞.CO在CeO₂(111)表面的吸附与氧化[J]. 物理化学学报, 2009,25(08): 1629-1634
204. 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
205. 张子英;杨德林;刘云虎;曹海滨;邵建新;井群.BaTiO₃的电子结构和光学性质[J]. 物理化学学报, 2009,25(09): 1731-1736
206. 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
207. 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):

208. 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
209. 原现瑞, 尚振华, 李润岩, 刘英华, 陈晓霞, 张慧丽, 修勇. *N*-苯基酰胺分子的氮-氮键旋转位阻及分子构象[J]. 物理化学学报, 2009,25(09): 1785-1790
210. 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
211. 张美一, 何广智, 丁程程, 陈灏, 潘纲. As(V)在TiO₂表面的吸附机理[J]. 物理化学学报, 2009,25(10): 2034-2038
212. 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
213. 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
214. 詹卫伸, 潘石, 李源作, 陈茂笃. 二氢吡啶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
215. 莽朝永, 自俊青, 赵霞, 吴克琛. Ph₃PAuX和Ph₃AsAuX(X=Cl, Br)的最低三重激发态[J]. 物理化学学报, 2009,25(10): 2113-2117
216. 赵新新, 陶向明, 宓一鸣, 陈戎, 谭明秋. Ni(110)-p2mg(2×1)-CO表面的几何结构和电子态[J]. 物理化学学报, 2009,25(11): 2305-2311
217. 杨宗献, 于小虎, 马东伟. 氧原子在具有Pt皮肤的Pt₃Ni(111)表面的吸附和扩散[J]. 物理化学学报, 2009,25(11): 2329-2335
218. 倪哲明, 胥倩, 姚萍, 毛江洪, 刘晓明. 层间水含量对Mg₃Al-LDHs-Cl力学特性的影响[J]. 物理化学学报, 2009,25(11): 2325-2328
219. 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, 2009,25(11): 2336-2342
220. 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
221. 陈锦灿, 陈兰美, 廖思燕, 郑康成. 抗癌性钌配合物[HL][*trans*-Ru^{III}Cl₄L₂](L=2-NH₂-5-Me-STz)的水解机理[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
222. 左志军, 黄伟, 韩培德, 李志红. CO和H₂在Cu(111)面的吸附和溶剂化效应[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
223. 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
224. 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, 2009,25(11): 2350-2356