

含有噻唑生色团的Y-型有机分子的二阶非线性光学性质

罗姗姗, 仇永清, 刘晓东, 刘春光, 苏忠民

东北师范大学化学学院, 功能材料化学研究所, 长春 130024

摘要:

采用密度泛函理论(DFT)B3LYP/6-31G*方法优化了一系列含有噻唑生色团的Y-型有机杂环分子的几何构型, 在此基础上结合有限场(FE)方法和含时密度泛函理论(TD-DFT)对分子的非线性光学(NLO)活性和电子光谱进行计算分析. 结果表明, 这些分子具有A- π -D- π -A(A: 受体, D: 给体)结构, 分子基态偶极矩、极化率和二阶NLO系数(β)随支链共轭桥的增长及生色团共轭效应的增大而增大. 同时, 该系列有机杂环分子的二阶极化率总的有效值(β_{tot})与其前线分子轨道能级相关, 分子的前线分子轨道能级差越小, β_{tot} 值越大.

关键词: 密度泛函理论 Y-型有机分子 噻唑生色团 二阶非线性光学性质

收稿日期 2009-04-07 修回日期 2009-06-03 网络版发布日期 2009-07-14

通讯作者: 仇永清 Email: qiuyq466@nenu.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. 陈锦灿; 李俊; 吴文娟; 郑康成. 系列异构配合物 $\text{Ru}(\text{azpy})_2\text{Cl}_2$ 的结构与抗癌活性[J]. 物理化学学报, 2006,22(04): 391-396
7. 李权; 王红艳; 蒋刚; 朱正和. PuX ($X=\text{H}, \text{O}, \text{N}, \text{C}$) 的结构与势能函数[J]. 物理化学学报, 2001,17(07): 622-625
8. 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
9. 薛卫东; 张广丰; 朱正和; 汪小琳; 罗德礼; 邹乐西; 孙颖. CO_2 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
10. 武海顺; 许小红; 张聪杰; 张富强. $(\text{XN})_4\text{R}_4$ 簇合物的结构与化学键 [J]. 物理化学学报, 2002,18(02): 127-130
11. 刘幼成; 蒋刚; 朱正和. NX ($X=\text{F}, \text{Cl}, \text{Br}$) 分子结构与极化函数 r 轨道的作用 [J]. 物理化学学报, 2002,18(02): 117-121
12. 艾洪奇; 步宇翔. 黄金规则用于 $\text{N}_3^- + \text{N}_3$ 体系电子转移的研究[J]. 物理化学学报, 2001,17(03): 210-215
13. 王遵尧; 肖鹤鸣; 李金山. $\text{F} + \text{Cl}_2 \rightarrow \text{ClF} + \text{Cl}$ 和 $\text{Cl} + \text{F} + \text{Cl} \rightarrow \text{Cl}' + \text{ClF}$ 的反应机理[J]. 物理化学学报, 2001,17(02): 107-110
14. 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
15. 曹梅娟; 陈文凯; 刘书红; 许莹; 李俊. 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
16. 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
17. 林伟; 章永凡; 李奕; 陈勇; 李俊. 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
18. 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

扩展功能

本文信息

PDF(869KB)

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

▶ Y-型有机分子

▶ 噻唑生色团

▶ 二阶非线性光学性质

本文作者相关文章

▶ 罗姗姗

▶ 仇永清

▶ 刘晓东

▶ 刘春光

▶ 苏忠民

19. 吕玲玲;王永成. $\text{Au}^+(^1\text{S}, ^3\text{D})$ 与 $\text{N}_2\text{O}(^1\Sigma^+)$ 反应机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(03): 265-269
20. 张敬来;王连宾;吴文鹏;曹泽星.线性簇合物 $\text{SC}_{2n}\text{S}^{2-}$ ($n=1\sim 12$)电子吸收光谱[J]. 物理化学学报, 2004,20(12): 1428-1433
21. 耿志远;王永成;汪汉卿.锆烯 X_2Ge ($\text{X}=\text{H}, \text{CH}_3, \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}$)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
22. 徐灿;朱莉芳;高晨阳;曹娟.硅氧团簇 $(\text{SiO}_2)_n\text{O}_2\text{H}_4$ 的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(02): 152-155
23. 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
24. 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
25. 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
26. 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
27. 章应辉;阮文娟;吴扬.密度泛函理论研究5-单苯基卟啉分子的几何结构和拉曼光谱[J]. 物理化学学报, 2005,21(12): 1390-1394
28. 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
29. 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
30. 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
31. 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
32. 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
33. 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
34. 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
35. 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
36. 王艳花;邹建卫;胡桂香;郑柯文;俞庆森.吡咯喹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, 2004,20(09): 1129-1133
37. 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
38. 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
39. 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
40. 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
41. 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
42. 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
43. 徐艺军;李俊钺;章永凡;陈文凯. O_2 在 $\text{MgO}(001)$ 完整和缺陷表面上的吸附[J]. 物理化学学报, 2003,19(05): 414-418
44. 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
45. 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
46. 苗月;袁宏宽;陈洪.双钙钛矿 $\text{Sr}_{2-x}\text{La}_x\text{CrReO}_6$ 的电子结构和磁性[J]. 物理化学学报, 2008,24(03): 448-452
47. 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
48. 吴阳;冯璐;张向东. $\text{C}_6\text{H}_5-\text{H}\cdots\text{X}$ 分子间氢键的理论计算[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 653-658
49. 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
50. 孙慧卿;丁少锋;王雨田;邓贝;范广涵. CdO 及 $\text{Cd}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ 化合物的结构、能量和电子性能分析[J]. 物理化学学报

51. 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
52. 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
53. 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
54. 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_{61} 丁酸甲酯的密度泛函研究[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1353-1358
55. 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
56. 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
57. 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
58. 洪功义;黎乐民;徐光宪;林宪杰. 单羰基钼的键合异构现象[J]. 物理化学学报, 1995,11(06): 481-483
59. 孙宝珍;陈文凯;徐香兰. NO双分子在 $Cu_2O(111)$ 面吸附与解离的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(09): 1126-1131
60. 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
61. 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
62. 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
63. 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
64. 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
65. 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
66. 吕海港;黎乐民. 表面价态异常分子 EuS_2 和 Eu_2S 的泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(05): 413-418
67. 曹小龙;郭丽. 多通道反应 $O(^3P)+CH_2F$ 的理论研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(06): 642-646
68. 王利江;张聪杰;武海顺. C_nB^δ ($\delta=0, \pm 1; n=1\sim 6$)团簇的结构、稳定性和光谱[J]. 物理化学学报, 2005,21(03): 244-249
69. 李中华;王锐;陈振宁;韦永德;周百斌. 用密度泛函方法研究 $\alpha-[XMo_{12}O_{40}]^{n-}$ 杂多阴离子的振动光谱[J]. 物理化学学报, 2004,20(11): 1329-1334
70. 徐艺军;李俊箴;章永凡. O_2 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
71. 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
72. 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
73. 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
74. 田欣欣;张富强;冯瑞娟;武海顺. $B_{28}N_{28}$ 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
75. 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
76. 孙科举 李微雪 冯兆池 李灿. Fe- $AlPO_4$ -5分子筛的共振拉曼光谱[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 606-610
77. 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
78. 刘海洋 冷科 胡军 应晓 徐志广 张启光. A_3 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
79. 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 $UO_2L^{2-n^*a}$ ($L=F^-, CO_3^{2-}, NO_3^-; n=0-6, a=1, 2$)的结构和振动光谱[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 655-660
80. 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
81. 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 $TiO_2(101)$ 表面的敏化机理[J]. 物理化学学

82. 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
83. 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
84. 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
85. 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
86. 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
87. 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
88. 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
89. 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
90. 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
91. 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
92. 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
93. 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
94. 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
95. 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
96. 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
97. 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
98. 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
99. 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
100. 陈新, 李瑛, 蒋青. 几种(C[∧]N)Pt^{II}Q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
101. 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
102. 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
103. 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
104. 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
105. 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
106. 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
107. 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
108. 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
109. 王罗新, 刘勇, 虞新林, 李松年, 王晓工. H⁺、NH₄⁺对HMX的N-NO₂键解离能的影响[J]. 物理化学学报, 2007,23(10): 1560-1564
110. 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
111. 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

112. 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
113. 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
114. 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
115. 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
116. 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
117. 李磊;桑革;张鹏程;蒋刚. $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 阻氢微观机制研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(12): 1912-1916
118. 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
119. 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
120. 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
121. 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
122. 纪永军;武海顺;张富强;贾建峰. $(\text{MN})_n\text{H}_m$ ($\text{M}=\text{Ga}, \text{In}; n=1-4; m=1, 2$)团簇的结构与稳定性[J]. 物理化学学报, 2008,24(02): 257-262
123. 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
124. 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[J]. 物理化学学报, 2007,23(06): 846-850
125. 张静;王艳宾;武海顺. $(\text{BCO})_n^+$ ($n=1-12$)团簇的结构与稳定性[J]. 物理化学学报, 2007,23(05): 733-737
126. 李思殿;郭巧凌;苗常青;任光明.含平面配位碳的过渡金属烃配合物 $\text{M}_n\text{H}_n\text{C}$ 密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(05): 743-745
127. 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
128. 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
129. 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
130. 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
131. 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
132. 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
133. 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
134. 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
135. 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
136. 张晓清;贾建峰;武海顺;裴晓琴.羰基硼化合物 $(\text{BCO})_n$ ($n=1\sim 12$)的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(06): 684-690
137. 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
138. 陈波珍;黄明宝;颜达予. $(\text{CH}_2)_2\text{N}$ 和 $(\text{CH}_3)_2\text{NH}^+$ 的密度泛函理论计算[J]. 物理化学学报, 1999,15(06): 495-499
139. 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
140. 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
141. 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
142. 李权;徐成刚;王红艳;朱正和. 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

143. 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
144. 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
145. 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
146. 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
147. 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
148. 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
149. 杨振;徐志军;杨晓宁.基于密度泛函理论研究二元排斥Yukawa流体的表面结构性性质[J]. 物理化学学报, 2006,22(12): 1460-1465
150. 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
151. 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
152. 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
153. 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
154. 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
155. 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
156. 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
157. 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
158. 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
159. 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
160. 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
161. 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
162. 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
163. 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
164. 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
165. 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
166. 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
167. 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
168. 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
169. 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, 0,(): 0-0
170. 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, 0,(): 0-0
171. 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
172. 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

173. 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): 0-0
174. 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): 0-0
175. 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): 0-0
176. 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): 0-0
-