

## 二氢吡啶类染料用于染料敏化太阳能电池光敏剂的比较

詹卫伸, 潘石, 李源作, 陈茂笃

大连理工大学物理与光电工程学院, 近场光学与纳米技术研究所, 辽宁 大连 116023

摘要:

采用密度泛函理论(DFT)和含时密度泛函理论(TD-DFT)对四种二氢吡啶染料进行研究, 从中筛选出相对优秀的染料敏化太阳能电池光敏剂. 对前线分子轨道的计算表明, 二氢吡啶染料的前线分子轨道结构非常有利于染料激发态向TiO<sub>2</sub>电极的电子注入. 对真空中的紫外和可见光吸收光谱的计算表明, 二氢吡啶染料的吸收光谱与太阳辐射光谱匹配较好. 对染料分子的能级计算表明, 二氢吡啶染料的能级结构比较适合于I-/I<sup>-3</sup>作电解液的TiO<sub>2</sub>纳米晶太阳能电池的光敏剂. 二氢吡啶染料最低未占据分子轨道(LUMO)能级均比TiO<sub>2</sub>晶体导带边能级高, 能够保证激发态染料分子高效地向TiO<sub>2</sub>电极转移电子. 二氢吡啶染料最高占据分子轨道(HOMO)的能级比I-/I<sup>-3</sup>能级低, 保证了失去电子的染料分子能够顺利地电解液中得到电子. 与实验数据比较, 得出在提高染料敏化太阳能电池转换效率方面, 对染料的关键要求是LUMO能级的位置. 染料分子的稳定性是染料敏化太阳能电池使用寿命的关键因素. 通过对化学键键长的比较表明, 二氢吡啶染料的分子稳定性基本相同. 对计算结果的分析表明, 二氢吡啶染料1(ID1)的LUMO能级最高, 分子稳定性最好, 在酒精溶液中的吸收光谱与太阳辐射光谱匹配很好, 在同类染料中是较好的染料敏化太阳能电池光敏剂.

关键词: 密度泛函理论 染料敏化太阳能电池 二氢吡啶染料 稳定性

收稿日期 2009-03-02 修回日期 2009-06-16 网络版发布日期 2009-07-31

通讯作者: 潘石 Email: span@dlut.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<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
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. 刘奉岭. C<sub>60</sub>分子间相互作用的Morse势函数及应用[J]. 物理化学学报, 2002,18(11): 967-972
7. 高扬; 赵璧英; 唐有祺. 氧化物表面单层改性对SnO<sub>2</sub>超微粒子热稳定性的影响[J]. 物理化学学报, 1997,13(02): 97-100
8. 周灵萍; 李伟; 陶克毅; 李赫咂; 李宣文. NaBr/KY催化剂在甲苯氧化甲基化反应中的稳定性[J]. 物理化学学报, 2002,18(10): 916-919
9. 徐灿; 曹娟; 朱莉芳; 高晨阳. 二氧化硅纳米管的稳定性及尺寸效应[J]. 物理化学学报, 2006,22(04): 451-455
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. 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. 王树国; 吴东; 孙予罕; 钟炳; 邓风; 岳勇; 罗晴. MCM-48介孔分子筛的高压合成[J]. 物理化学学报, 2001,17(07): 659-661
14. 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
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

扩展功能

本文信息

PDF(552KB)

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

▶ 染料敏化太阳能电池

▶ 二氢吡啶染料

▶ 稳定性

本文作者相关文章

▶ 詹卫伸

▶ 潘石

▶ 李源作

▶ 陈茂笃

16. 刘幼成; 蒋刚; 朱正和. NX(X=F, Cl, Br)分子结构与极化函数 $\rho$ 轨道的作用 [J]. 物理化学学报, 2002, 18(02): 117-121
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. 胡伟; 叶汝强; 吴树森; 刘洪来. 水相中乙醇对胶体泡沫性质的影响 [J]. 物理化学学报, 2002, 18(02): 122-126
19. 郑康成; 饶火瑜; 何峰; 许值涛; 刘汉钦. Fe、Co、Ni双齿巯基配合物从头算研究[J]. 物理化学学报, 1998, 14(04): 299-304
20. 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
21. 陈福良; 王仪; 郑斐能; 梁文平. 微乳剂低温稳定性的研究[J]. 物理化学学报, 2002, 18(07): 661-664
22. 李维忠; 缪方明. 溶剂化对修饰超氧化物歧化酶稳定性的影响[J]. 物理化学学报, 1998, 14(04): 289-292
23. 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
24. 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
25. 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
26. 李光平; 张华北; 田安民; 鄢国森.  $AlC_n$ 及 $AlC_n^+$ ( $n=1-4$ )原子簇的理论研究[J]. 物理化学学报, 1995, 11(03): 211-217
27. 张菊; 郑小明; 吴念慈; 丁云杰. NiCoB超细非晶合金的化学制备和热稳定性研究[J]. 物理化学学报, 1995, 11(02): 113-117
28. 夏海涛; 林华宽; 陈荣梯. 钴(II)-联吡啶- $\alpha$ -氨基酸的热力学和动力学研究[J]. 物理化学学报, 1995, 11(01): 74-78
29. 贤景春; 朱守荣; 林华宽; 陈荣梯. 配位化学中的直线自由能关系(XIX)[J]. 物理化学学报, 1994, 10(09): 841-846
30. 谢志明; 高翩; 李卓美. 丙烯酸酯共聚物无皂水溶胶稳定性的研究[J]. 物理化学学报, 1994, 10(05): 438-443
31. 尚海蓉; 余赅; 应立明; 高盘良; 赵新生.  $\bar{A}^3 E$ 态 $CH_3N$ 自由基的稳定性[J]. 物理化学学报, 1993, 9(05): 594-596
32. 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
33. 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
34. 林华宽; 朱守荣; Appolin, B. Kondiano; 寇福平; 陈荣梯. 铜(II)-5-取代邻菲罗啉-二氧四胺大环三元体系的稳定性研究[J]. 物理化学学报, 1997, 13(05): 417-424
35. 李海洋; 马晨生; 白吉玲; 何国钟. 样品价态对激光气化产生Cu/Cl团簇的组成和稳定性的影响[J]. 物理化学学报, 1997, 13(10): 933-937
36. 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
37. 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
38. 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
39. 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
40. 黄飙; 张家兴; 李锐; 申自勇; 侯士敏; 赵兴钰; 薛增泉; 吴全德. Al-C<sub>60</sub>-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
41. 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
42. 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
43. 武海顺; 许小红; 张聪杰; 周伟良. 金属硼化物结构与稳定性的理论研究[J]. 物理化学学报, 1997, 13(03): 258-263
44. 严宾; 安学勤; 白晶; 张英华. 超临界CO<sub>2</sub>法制备头孢唑啉钠脂质体[J]. 物理化学学报, 2006, 22(02): 226-229
45. 高恩君; 丁丽娜; 刘祁涛; 孙亚光. 钼(II)三元配合物稳定性及其与DNA作用研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(10): 1091-1095
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

48. 方冉;耿志远;王永成;张兴辉;王冬梅;高立国;陈晓霞. 锗烯 $X_2Ge$ 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. 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
52. 陈文凯;曹梅娟;刘书红;许莹;李奕;李俊钱.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
53. 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
54. 许梦清;左晓希;李伟善;周豪杰;刘建生;袁中直.丁磺酸内酯对锂离子电池性能及负极界面的影响[J]. 物理化学学报, 2006,22(03): 335-340
55. 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
56. 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
57. 王永成;戴国梁;耿志远;吕玲玲;王冬梅.乙炔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
58. 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
59. 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
60. 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
61. 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
62. 杨红平;王先友;汪彤艳;黄伟国;罗旭芳;卓海涛.新型超铁(VI)电池正极材料的制备及性能研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(12): 1150-1153
63. 李增和;银陈;王如骥;王平;郭洪猷. $Co(\mu_2-bpy)V_2O_6$  ( $bpy=4,4'$ -联吡啶)的水热合成和晶体结构[J]. 物理化学学报, 2003,19(12): 1133-1137
64. 杨刚;王妍;周丹红;庄建勤;刘宪春;韩秀文;包信和.La/ZSM-5分子筛热稳定性及镧存在形态研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(01): 60-64
65. 许一婷;戴李宗;何云游;Tahina Rakotoartsoa1;Jean Yves Gal;吴辉煌.聚苯胺衍生物膜修饰电极的 electrochemistry 和催化性质 [J]. 物理化学学报, 2003,19(06): 564-568
66. 张彩云;武海顺.硼氢及客体二十面体簇合物的结构和稳定性[J]. 物理化学学报, 2004,20(02): 118-122
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. 徐艺军;李俊钱;章非凡;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
69. 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
70. 杨锐;何水祥;顾爱萍;文振翼;林翔;文辉忠.镧三元配合物的合成、热稳定性及生物活性[J]. 物理化学学报, 2003,19(07): 610-615
71. 郑均林;张晔;魏伟;吴东;孙子罕;邓凤;罗晴;岳勇.具有强酸性位的高水热稳定介孔分子筛的合成[J]. 物理化学学报, 2003,19(10): 907-912
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. 马文瑾;武海顺. $Al_mN_2$  ( $m=1\sim 8$ )团簇结构与稳定性的DFT研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(03): 290-295
74. 曾莉;王春明;尉继英;朱月香;谢有畅.耐高温高比表面氧化铬/氧化锆体系的制备和表征[J]. 物理化学学报, 2004,20(03): 251-255
75. 张彩云;崔丽亚;武海顺.内含式复合物 $X@(\text{HAINH})_{12}$  ( $X=Be, Mg, Ca, Zn, Al^+, Ga^+$ )的结构和稳定性[J]. 物理化学学报, 2008,24(03): 405-410
76. 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
77. 文莉;林种玉;周剑章;古萍英;傅锦坤;林仲华.用辛烷基硫醇单层保护Au纳米粒子制备CO氧化催化剂 $Au/\gamma-Al_2O_3$  [J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 581-586
78. 耿春宇;丁丽颖;韩清珍;温浩.气体分子对甲烷水合物稳定性的影响[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 595-600

79. 胥倩;倪哲明;潘国祥;陈丽涛;刘婷.水滑石限域空间中 $\text{Cl}^-$ 与 $\text{H}_2\text{O}$ 的超分子作用[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 601-606
80. 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
81. 李志伟;李香芝;许先芳;赵存元;陈六平. $\text{NaP}_4$ 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
82. 梁初;黎光旭;蓝志强;刘奕新;韦文楼;郭进. $\text{LiAlH}_4$ 与 $\text{Li}_3\text{AlH}_6$ 的成键特性及热力学稳定性[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 686-690
83. 潘海波;王芳;黄金陵;陈耐生.原位合成 $\text{CoPc}/\text{SnO}_2$ 的键合特性及可见光光催化活性[J]. 物理化学学报, 2008,24(06): 992-996
84. 艾洪奇;杨爱彬;李允刚.溶液中 $\text{Zn}^{2+}$ 与腺嘌呤异构体间相互作用的理论研究[J]. 物理化学学报, 2008,24(06): 1047-1052
85. 王亚明;刘岚;罗远芳;贾德民.氟橡胶/改性乙丙橡胶并用胶的热稳定性[J]. 物理化学学报, 2008,24(06): 1100-1104
86. 孙慧卿;丁少锋;王雨田;邓贝;范广涵. $\text{CdO}$ 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, 2008,24(07): 1233-1238
87. 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
88. 马文瑾;张献明;许小红;王艳宾;武海顺. $\text{C}_n\text{Al}_2$  ( $n=1-10$ )团簇的结构特征与稳定性[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1477-1480
89. 田真宁;许旋.配合物 $[\text{M}(\text{CO})_3(\text{PPh}_2\text{py})_2]$  ( $\text{M}=\text{Fe}, \text{Ru}$ )异构体的理论研究[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1482-1486
90. 史艳华;孟惠民;孙冬柏;俞宏英;付花荣.脉冲阳极电沉积制备锰氧化物涂层电极[J]. 物理化学学报, 2008,24(07): 1199-1206
91. 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
92. 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- $\text{C}_{60}$ 丁酸甲酯的密度泛函研究[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1353-1358
93. 黄银燕;赵璧英;谢有畅.复合固体超强酸催化剂 $\text{SO}_4^{2-}-\text{WO}_3-\text{ZrO}_2$ 的结构研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(06): 547-552
94. 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
95. 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
96. 罗小艳;贾文红;张聪杰. $\text{In}_n\text{Na}$ 和 $\text{In}_n\text{Na}^+$  ( $n=2-8$ )的团簇结构和电子性质[J]. 物理化学学报, 2009,25(02): 261-266
97. 刘沛妍;褚莹;吴子生;严忠;康万利.液膜稳定性的研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(04): 320-324
98. 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
99. 朱永法;叶小燕;姚文清;陈德朴;曹立礼. $\text{Ar}$ 离子束作用下 $\text{C}_{60}$ 薄膜的结构稳定性研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(08): 699-703
100. 孙宝珍;陈文凯;徐香兰. $\text{NO}$ 双分子在 $\text{Cu}_2\text{O}(111)$ 面吸附与解离的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(09): 1126-1131
101. 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
102. 陶长元;颜红梅;刘信安;张胜涛;罗久里.酸度对B-Z振荡反应的影响[J]. 物理化学学报, 2000,16(09): 835-838
103. 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
104. 吴文娟;赖璐;郑康成;云逢存.抗癌性吲哚啉啉生物碱的定量构效关系[J]. 物理化学学报, 2005,21(01): 28-32
105. 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
106. 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
107. 安增建;周珊;蹇锡高;蔡天锡.热稳定性良好的磺化聚醚砜酮催化剂[J]. 物理化学学报, 2003,19(07): 654-656
108. 马文瑾;武海顺. $\text{Al}_m\text{N}$  ( $m=2\sim 9$ )团簇结构与稳定性的DFT研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(10): 927-932
109. 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

110. 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
111. 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
112. 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
113. 张荣斌;李凤仪;杨美华.载体γ-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>和钐对非晶态NiB合金热稳定性的影响[J].物理化学学报,2003,19(10):970-973
114. 李中华;王锐;陈振宁;韦永德;周百斌.用密度泛函方法研究a-[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
115. 范荫恒;廖世健;余道容.纳米氯化钠的热稳定性和化学反应活性[J].物理化学学报,1998,14(12):1057-1060
116. 徐艺军;李俊箴;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
117. 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
118. 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
119. 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
120. 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
121. 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
122. 赫崇衡;张文敏;汪仁.稀土修饰Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>的表面积热稳定性[J].物理化学学报,1996,12(11):971-975
123. 钱建刚;顾惕人.醋酸十二铵的吸附和SiO<sub>2</sub>悬浮液的稳定性[J].物理化学学报,1996,12(08):698-703
124. 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
125. 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
126. 刘海洋 冷科 胡军 应晓 徐志广 张启光.A<sub>3</sub>型Corrole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
127. 胡洁 袁安保 王玉芹 王秀玲.低热固相法制备纳米MnO<sub>2</sub>/CNT超电容复合电极的循环稳定性[J].物理化学学报,2009,25(05):987-993
128. 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<sub>2</sub>L<sup>2-n\*</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
129. 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
130. 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
131. 杨术明,寇慧芝,汪玲,王红军,付文红.N3敏化Ho<sup>3+</sup>离子修饰TiO<sub>2</sub>纳米晶电极的光电化学性质[J].物理化学学报,2009,25(06):1219-1224
132. 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
133. 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
134. 孙秀良,黄崇品,张傑,陈标华.Beta分子筛中Al的分布和Bronsted酸的酸性强度[J].物理化学学报,2009,25(06):1136-1142
135. 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
136. 黄小璇,许旋.Ir(CO)Cl<sub>a</sub>(Ph<sub>2</sub>Ppy)<sub>2</sub>HgCl<sub>b</sub>(HgCl<sub>2</sub>)<sub>c</sub>(a,b=1,2,c=0,1)的Ir-Hg相互作用和氧化还原反应性质[J].物理化学学报,2009,25(07):1362-1366
137. 李雷,詹瑛瑛,陈崇启,余育生,林性怡,郑起.不同方法制备的CeO<sub>2</sub>载体对CuO/CeO<sub>2</sub>催化剂水煤气变换活性和稳定性的影响[J].物理化学学报,2009,25(07):1397-1404
138. 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
139. 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

140. 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
141. 张富春; 张志勇; 张威虎; 阎军峰; 江妮.  $\text{Pb}_x\text{Sr}_{1-x}\text{TiO}_3$  的电子结构[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 61-66
142. 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
143. 赵新新 陶向明 宓一鸣 谭明秋. Pt/Cu(001)- $p(2 \times 2)$ -O表面吸附结构的总能计算[J]. 物理化学学报, 2009,25(03): 567-574
144. 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
145. 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
146. 蒋仕宇; 滕波涛; 鲁继青; 刘雪松; 杨培芳; 杨飞勇; 罗孟飞. 甲醛在CeO<sub>2</sub>(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
147. 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
148. 郑金德; 陆春海; 孙宝珍; 陈文凯. N<sub>2</sub>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
149. 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
150. 柯曦; 崔国峰; 沈培康. 钨铁合金催化剂的稳定性[J]. 物理化学学报, 2009,25(02): 213-217
151. 程海斌; 王金铭; 马会茹; 侯鹏; 官建国; 张清杰. 有机分子修饰铁粒子表面改善水基磁流变液的抗氧化性和稳定性[J]. 物理化学学报, 2008,24(10): 1869-1874
152. 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
153. 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
154. 陈新; 李瑛; 蒋青. 几种(C<sup>N</sup>)Pt<sup>II</sup>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
155. 李宗宝; 姚凯伦; 刘祖黎. 有机-无机杂化化合物[Cu( $\mu$ -cbdca)(H<sub>2</sub>O)]<sub>n</sub>的电子结构及铁磁性[J]. 物理化学学报, 2008,24(09): 1681-1684
156. 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
157. 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
158. 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
159. 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
160. 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
161. 梁云霄; 水淼; 李榕生. 硼/氮掺杂富勒烯C<sub>20</sub>的结构和稳定性[J]. 物理化学学报, 2007,23(10): 1647-1651
162. 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
163. 王罗新; 刘勇; 庾新林; 李松年; 王晓工. H<sup>+</sup>、NH<sub>4</sub><sup>+</sup>对HMX的N—NO<sub>2</sub>键解离能的影响[J]. 物理化学学报, 2007,23(10): 1560-1564
164. 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
165. 刘红晶; 贺高红; 林畅; 赵薇; 肖公奎. W/O/W多重乳液中水传递的控制[J]. 物理化学学报, 2007,23(06): 935-939
166. 姜勇; 储伟; 江成发; 王耀红. Pd<sub>n</sub>(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
167. 潘国祥; 倪哲明; 李小年. 类水滑石主体层板与客体CO<sub>3</sub><sup>2-</sup>、H<sub>2</sub>O间的超分子作用[J]. 物理化学学报, 2007,23(08): 1195-1200
168. 殷开梁; 邹定辉; 张雪红; 席海涛; 夏庆. 含金纳米粒子链相关性探讨及其热稳定性的分子模拟[J]. 物理化学学报, 2007,23(08): 1207-1212
169. 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
170. 王艳宾; 马文瑾; 张静 武海顺. C<sub>n</sub>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

171. 杨作银;周宏伟;张敬畅;曹维良.Mg-Al类水滑石层结构中Al/Mg比与稳定性的关系[J]. 物理化学学报, 2007,23(06): 795-800
172. 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
173. 李磊;桑革;张鹏程;蒋刚. $\sigma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>阻氢微观机制研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(12): 1912-1916
174. 郭营军;晨辉;其鲁.锂离子电池电解液研究进展[J]. 物理化学学报, 2007,23(Supp): 80-89
175. 徐伯华;李来才;王欣;田安民.N<sub>5</sub>H<sub>5</sub>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
176. 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
177. 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
178. 贝逸翎;主沉浮;刘庆阳;戚桂斌.卤代硅烷(R<sub>3</sub>SiX)与NR'<sub>3</sub>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
179. 纪永军;武海顺;张富强;贾建峰.(MN)<sub>n</sub>H<sub>m</sub>(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
180. 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
181. 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
182. 张静;王艳宾;武海顺.(BCO)<sub>n</sub><sup>+</sup>(n=1-12)团簇的结构与稳定性[J]. 物理化学学报, 2007,23(05): 733-737
183. 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<sub>n</sub>H<sub>n</sub>C密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(05): 743-745
184. 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
185. 于海涛;池玉娟;傅宏刚;黄旭日;孙家锤.HBO<sub>2</sub>异构体的结构和相对稳定性[J]. 物理化学学报, 2002,18(01): 87-90
186. 范荫恒;廖世健;李伟娜;徐杰;王复东.纳米KH颗粒的热稳定性及其化学反应活性 [J]. 物理化学学报, 2002,18(01): 55-58
187. 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
188. 侯廷军;安钰;茹炳根;徐筱杰.三种金属硫蛋白动力学稳定性的理论研究[J]. 物理化学学报, 2000,16(03): 221-225
189. 刘朝阳;黄荣彬;郑兰荪.C<sub>n</sub>Al<sup>-</sup>(n=1-11)结构的量子化学从头计算[J]. 物理化学学报, 1997,13(07): 621-625
190. 周立新;黄尊行;田安民;吴立明;胡建明;李俊钱.C<sub>4</sub>S<sup>m-</sup><sub>4</sub>相对稳定性的从头算研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(08): 752-756
191. 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
192. 何煦;赵国玺;朱王步瑶.双月桂酸三乙醇胺酯水溶液的囊泡性质研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(06): 509-513
193. 陈兆旭;肖鹤鸣;高宝华.四唑及其衍生物的理论研究(6) [J]. 物理化学学报, 1998,14(08): 757-764
194. 高洁;王世忠.二甲醚燃料电池复合镍阳极的研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(07): 851-855
195. 肖建华;李雪辉;邓莎;徐建昌;王乐夫.Mn/Ba/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>催化剂的NO<sub>x</sub>氧化-储存和耐硫性能[J]. 物理化学学报, 2006,22(07): 815-819
196. 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
197. 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
198. 王利江;张聪杰.B<sub>2</sub>C<sub>n</sub><sup>+</sup>(n=1~9)团簇的结构及其稳定性[J]. 物理化学学报, 2006,22(06): 726-731
199. 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
200. 李啸风;陈志荣;刘迪霞;潘海华;李浩然;韩世钧.乳化剂初始位置对乳状液稳定性的影响[J]. 物理化学学报, 2000,16(11): 964-967
201. 李权;刘晓亚;高涛;朱正和;傅依备;汪小琳;孙颖.PuO<sup>n+</sup>的势能函数的稳定性[J]. 物理化学学报, 2000,16(11): 987-991

202. 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
203. 刘海波; 侯占佳; 刘丽英; 徐志凌; 徐雷; 王文澄; 李富铭; 叶明新. 三聚氰胺甲醛树脂的光学性质[J]. 物理化学学报, 2000,16(06): 563-567
204. 刘勇; 王敬先; 杨竹仙; 何阿弟; 陈晓银. 钡对氧化铝的高温热稳定作用[J]. 物理化学学报, 2000,16(06): 533-537
205. 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
206. 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
207. 张建业; 李宣文; 刘兴云.  $\beta$ -沸石骨架稳定性与表面酸性的红外光谱研究[J]. 物理化学学报, 1999,15(12): 1092-1097
208. 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
209. 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
210. 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
211. 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
212. 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
213. 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
214. 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
215. 刘东艳; 樊彦贞; 张园力; 王桂香; 吴东; 任杰. 碱土金属修饰 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 的表面热稳定性[J]. 物理化学学报, 2001,17(11): 1036-1039
216. 于海涛; 池玉娟; 傅宏刚; 李泽生; 孙家锤. 磷炔 $\text{R-C}\equiv\text{P}$  ( $\text{R}=\text{-BH}_2, \text{-CH}_3, \text{-NH}_2, \text{-OH}$ )及其异构体的稳定性[J]. 物理化学学报, 2003,19(02): 125-129
217. 王邦宁; 韩布兴; 谈夫. 溶液组成对乌头酸梅构象热稳定性的影响[J]. 物理化学学报, 2000,16(03): 284-288
218. 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
219. 蔡建秋; 陶向明; 谭明秋. 氢原子吸附的 $\text{Cu}(100)$ 表面原子结构和电子态[J]. 物理化学学报, 2007,23(03): 355-360
220. 王著; 朱灵峰; 张国宝; 赵根锁; 朱琰. 改性羧甲基羟丙基田菁胶热裂解动力学研究[J]. 物理化学学报, 1996,12(07): 598-603
221. 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
222. 李思殿; R. 约翰斯顿; J. 莫诺. 锡原子簇的结构和相对稳定性[J]. 物理化学学报, 1993,9(05): 642-649
223. 朱宏耀; 江元生. 简单晶格的簇—Bethe格模型[J]. 物理化学学报, 1993,9(04): 473-477
224. 林华宽; 刘在均; 唐祥海; 陈荣悌. 配合物中直线自由能关系的进一步探讨[J]. 物理化学学报, 1993,9(04): 565-568
225. 张迪倡; 宗保宁; 金泽明; 田敏; 闵恩泽. 稀土(Y、Ce、Sm)对Ni-P非晶态合金热稳定性的影响[J]. 物理化学学报, 1993,9(03): 325-330
226. 阚锦晴; 穆绍林. 聚苯胺尿酸酶电极性能的研究[J]. 物理化学学报, 1993,9(03): 345-350
227. 史扬; 张南; 高振; 朱起鹤; 孔繁敖. 铝硫二元团簇的组分及其光解规律[J]. 物理化学学报, 1993,9(03): 299-301
228. 赵东源; 杨亚书; 郭燮贤; 王国甲. 铁铝复合柱撑粘土的制备、柱结构和稳定性(I)[J]. 物理化学学报, 1993,9(02): 193-199
229. 张河哲; 白光月; 王玉洁; 严忠. 动态单滴法研究乳状液液膜的稳定性[J]. 物理化学学报, 1993,9(02): 233-237
230. 冯克; 曾兆华; 李卓美. 含不同金属离子的EPDM磺酸盐离聚物的研究[J]. 物理化学学报, 1992,8(03): 370-375
231. 汤大新; 董玺娟; 王卉; 白玉白; 李丽华; 李铁津. 10,12-双炔甘三酸镉盐LB膜的FT-IR光谱[J]. 物理化学学报, 1992,8(03): 394-397
232. 杜少斌; 王瑾; 马福泰; 郑洪元; 楼辉; 敬承衡. La-Mn-Ni-O催化剂组成、结构、还原性能及氧化活性[J]. 物理化学学报, 1992,8(05): 630-635



233. 郭宁;曾广斌;席时权.四氯合铜酸二烷基铵相变的热分析和红外光谱[J]. 物理化学学报, 1992,8(06): 783-788
234. 蔡国强;董南.乙醛二聚体的从头计算[J]. 物理化学学报, 1991,7(03): 270-275
235. 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
236. 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
237. 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
238. 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
239. 郭荣.直链醇链长对层状液晶结构与稳定性的影响[J]. 物理化学学报, 1991,7(06): 703-707
240. 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
241. 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
242. 杜新贞;周嵘;陶小娟;王芳平;陈慧.修饰 $\beta$ -环糊精/4-(*N,N*-二甲氨基)-苯甲酸-2'-乙基己基酯笼型包结物研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(09): 1065-1070
243. 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
244. 温兆银;林祖纘;陈昆刚.一种层状化合物的水热合成及其特性[J]. 物理化学学报, 1995,11(10): 876-880
245. 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
246. 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
247. 张子英;杨德林;刘云虎;曹海滨;邵建新;井群. $\text{BaTiO}_3$ 的电子结构和光学性质[J]. 物理化学学报, 2009,25(09): 1731-1736
248. 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
249. 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
250. 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
251. 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
252. 李贵安;朱庭良;叶录元;邓仲勋;张亚娟;焦飞;郑海荣.原位法常压干燥制备疏水 $\text{SiO}_2$ 气凝胶及其热稳定性[J]. 物理化学学报, 2009,25(09): 1811-1815
253. 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
254. 张美一;何广智;丁程程;陈灏;潘纲.As(V)在 $\text{TiO}_2$ 表面的吸附机理[J]. 物理化学学报, 2009,25(10): 2034-2038
255. 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
256. 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
257. 吕雪川;谭志诚;高肖汉.新型镧三元配合物 $\text{La}(\text{Glu})(\text{Im})_6(\text{ClO}_4)_3 \cdot 4\text{HClO}_4 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ 的合成和热化学性质[J]. 物理化学学报, 2009,25(10): 1945-1950
258. 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
259. 赵新新;陶向明;宓一鸣;谭明秋.Ni(110)- $p(2 \times 1)$ -CO表面的原子结构和电子态[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
260. 王晓文;周正发;任凤梅;汪瑾;马海红;徐卫兵.水溶性封闭异氰酸酯单体的解封动力学[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
261. 刘瑞辉;张存满;马建新.具有良好热稳定性的 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 改性 $\text{Fe}_2\text{O}_3$ 基纳米金催化剂[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
262. 杨宗献;于小虎;马东伟.氧原子在具有Pt皮肤的 $\text{Pt}_3\text{Ni}$ (111)表面的吸附和扩散[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
263. 倪哲明;胥倩;姚萍;毛江洪;刘晓明.层间水含量对 $\text{Mg}_3\text{Al-LDHs-Cl}$ 力学特性的影响[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0

264. 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
265. 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
266. 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
267. 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
268. 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
-