

吡啶咪唑异构体的电子结构和光学性质

王会萍, 白福全, 郑清川, 赵增霞, 赵晓杰, 张红星

吉林大学理论化学研究所, 理论化学计算国家重点实验室, 长春 130023

摘要:

分别采用密度泛函理论(DFT)和单激发组态相互作用(CIS), 在6-31G(d,p)基组水平上优化了5个吡啶咪唑分子的基态和激发态结构. 在此结构的基础上, 用含时密度泛函理论(TD-DFT)在相同基组水平和极化连续介质模型(PCM)下计算了模型分子的吸收和发射光谱. 这几个吡啶咪唑异构体的发射光谱有明显的差别, 如异构体5([3,2-b]型)有较大的振子强度, 但是相对于其他异构体, 其发射能量最小; 异构体4([3,2-a]型)的发射能量最大; 异构体2([2,3-b]型)的最大振子强度在250-450 nm范围内, 与其他几个分子相比为最小. 这主要是由于分子的激发态几何变化和轨道能级的不同导致的. 本文还考察了这类分子的一阶超极化率的结果, 5个分子极化率在同一水平, 但静态第一超极化率(β_0)有明显差别, 异构体2的 β_0 值最大.

关键词: 密度泛函理论 含时密度泛函理论 吡啶咪唑 单激发组态相互作用方法 吸收发射光谱 非线性响应

收稿日期 2009-08-31 修回日期 2009-11-16 网络版发布日期 2009-12-01

通讯作者: 张红星 Email: zhanghx@jlu.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/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 $\text{Au}(100)$ 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

扩展功能

本文信息

PDF(886KB)

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

▶ 含时密度泛函理论

▶ 吡啶咪唑

▶ 单激发组态相互作用方法

▶ 吸收发射光谱

▶ 非线性响应

本文作者相关文章

▶ 王会萍

▶ 白福全

▶ 郑清川

▶ 赵增霞

▶ 赵晓杰

▶ 张红星

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
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.锗烯 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. $\text{AlmN}_2^-(m=1\sim 8)$ 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.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
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. 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
33. 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
34. 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
35. 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
36. 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
37. 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,2009,25(12): 2551-2557
38. 王清高;杨宗猷;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,2009,25(12): 2513-2518
39. 马淳安;刘婷;陈丽涛.CO和H在Pt/WC(0001)表面的吸附[J].物理化学学报,0,(): 0-0
40. 任雪峰;任爱民;王钦;封继康.meso取代卟啉衍生物的结构和光学性质[J].物理化学学报,0,(): 0-0
41. 陈晓华;樊永明;曹春昱;胡红智.酞型木素模型物的光学特性[J].物理化学学报,0,(): 0-0
42. 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
43. 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
44. 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
45. 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
46. 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
47. 徐艺军;李俊箴;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
48. 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
49. 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

50. 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
51. 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
52. 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
53. 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
54. 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, 2008,24(07): 1233-1238
55. 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
56. 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
57. 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
58. 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
59. 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
60. 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
61. 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
62. 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
63. 孙宝珍;陈文凯;徐香兰. 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
64. 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
65. 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
66. 吴文娟;赖琰;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
67. 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
68. 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
69. 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
70. 吕海港;黎乐民.表现价态异常分子 EuS_2 和 Eu_2S 的泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(05): 413-418
71. 曹小龙;郭丽.多通道反应 $\text{O}(^3P)+\text{CH}_2\text{F}$ 的理论研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(06): 642-646
72. 王利江;张聪杰;武海顺. $\text{C}_n\text{B}^\delta$ ($\delta=0, \pm 1; n=1\sim 6$)团簇的结构、稳定性和光谱[J]. 物理化学学报, 2005,21(03): 244-249
73. 李中华;王锐;陈振宁;韦永德;周百斌.用密度泛函方法研究 $\alpha\text{-}[\text{XMo}_{12}\text{O}_{40}]^{n-}$ 杂多阴离子的振动光谱[J]. 物理化学学报, 2004,20(11): 1329-1334
74. 徐艺军;李俊箴;章非凡. O_2 在具有氧和镁缺陷 $\text{MgO}(001)$ 表面的吸附[J]. 物理化学学报, 2003,19(09): 815-818
75. 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
76. 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
77. 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
78. 田欣欣;张富强;冯瑞娟;武海顺. $\text{B}_{28}\text{N}_{28}$ 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
79. 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
80. 孙科举 李微雪 冯兆池 李灿. Fe-AIPO_4 -5分子筛的共振拉曼光谱[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 606-610
81. 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-

82. 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
83. 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 $UO_2L^{2-n^*a}_n$ ($L=F^-, CO_3^{2-}, NO_3^-$; $n=0-6, a=1, 2$)的结构和振动光谱[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 655-660
84. 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
85. 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]. 物理化学学报, 2009,25(05): 947-952
86. 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
87. 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
88. 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
89. 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
90. 宋建民 刘东州 王云明 刘立芳 康艳霜 王保柱 朱玲欣 刘书华. 平行板间超支化聚合物流体的密度分布和溶剂化力[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
91. 姚萍 倪哲明 胥倩 毛江洪 刘晓明 王巧巧. 镁锡水滑石中的超分子作用[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
92. 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
93. 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
94. 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
95. 张富春 张志勇 张威虎 阎军峰 江妮. $Pb_xSr_{1-x}TiO_3$ 的电子结构[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 61-66
96. 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
97. 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
98. 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
99. 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
100. 蒋仕宇 滕波涛 鲁继青 刘雪松 杨培芳 杨飞勇 罗孟飞. 甲醛在 $CeO_2(111)$ 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
101. 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
102. 郑金德 陆春海 孙宝珍 陈文凯. N_2 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
103. 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
104. 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
105. 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
106. 陈新 李瑛 蒋青. 几种 $(C^{\wedge}N)Pt^{II}O$ 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
107. 李宗宝 姚凯伦 刘祖黎. 有机-无机杂化化合物 $[Cu(\mu-cbdca)(H_2O)]_n$ 的电子结构及铁磁性[J]. 物理化学学报, 2008,24(09): 1681-1684
108. 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
109. 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
110. 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
111. 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
112. 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-

113. 梁云霄;水森;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
114. 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
115. 王罗新;刘勇;庾新林;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
116. 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
117. 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
118. 潘国祥;倪哲明;李小年.类水滑石主体层板与客体CO₃²⁻、H₂O间的超分子作用[J]. 物理化学学报, 2007,23(08): 1195-1200
119. 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
120. 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
121. 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
122. 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
123. 李磊;桑革;张鹏程;蒋刚.α-Al₂O₃阻氢微观机制研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(12): 1912-1916
124. 徐伯华;李来才;王欣;田安民.N₅H₅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
125. 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
126. 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
127. 贝逸翎;主沉浮;刘庆阳;戚桂斌.卤代硅烷(R₃SiX)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
128. 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
129. 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
130. 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
131. 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
132. 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
133. 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
134. 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
135. 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
136. 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
137. 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
138. 王利江;张聪杰.B₂C_n⁺(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
139. 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
140. 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
141. 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
142. 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

143. 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

144. 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

145. 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

146. 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

147. 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

148. 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研究[J]. 物理化学学报, 2002,18(09): 802-807

149. 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

150. 张远; 曹爱年; 孙岳明; 刘举正; 顾璠. NO双分子和二聚体与 Cu_2 作用的理论计算[J]. 物理化学学报, 2003,19(03): 193-197

151. 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

152. 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

153. 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

154. 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

155. 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

156. 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

157. 马文瑾; 王艳宾; 张静; 武海顺. 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

158. 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

159. 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

160. 蒋仕宇; 滕波涛; 袁金焕; 郭晓伟; 罗孟飞. CO在 CeO_2 (111)表面的吸附与氧化[J]. 物理化学学报, 2009,25(08): 1629-1634

161. 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

162. 张子英; 杨德林; 刘云虎; 曹海滨; 邵建新; 井群. BaTiO_3 的电子结构和光学性质[J]. 物理化学学报, 2009,25(09): 1731-1736

163. 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

164. 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

165. 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

166. 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

167. 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

168. 张美一; 何广智; 丁程程; 陈灏; 潘纲. As(V)在 TiO_2 表面的吸附机理[J]. 物理化学学报, 2009,25(10): 2034-2038

169. 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

170. 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

171. 詹卫仲; 潘石; 李源作; 陈茂筠. 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

172. 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, 2009,25(11): 2296-2304

173. 赵新新; 陶向明; 宓一鸣; 陈成; 谭明秋. Ni(110)- $p2mg(2\times 1)$ -CO表面的几何结构和电子态[J]. 物理化学学

报, 2009,25(11): 2305-2311

174. 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
175. 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
176. 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
177. 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
178. 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, 2009,25(12): 2543-2550
179. 左志军, 黄伟, 韩培德, 李志红. CO和H₂分子在Cu(111)面的吸附和溶剂化效应[J]. 物理化学学报, 2009,25(12): 2507-2512
180. 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, 2009,25(12): 2519-2523
181. 徐晓芳, 高放, 李红茹, 张胜涛. 生色团连接的苯并三氮唑衍生物的激发态分子内质子转移[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
182. 何书珩, 蒲敏, 李军男, 何静, EVANS David G.. 酸性橙插层铝水滑石的组装及其结构与性能[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
183. 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
184. 姜富灵, 翟高红, 丁黎, 岳可芬, 刘妮, 史启祯, 文振翼. NO₂、OH、OH⁻对HMX初始热解的影响[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
185. 彭洪亮, 于贤勇, 易平贵, 汪朝旭, 李筱芳, 王涛, 周继明. 2-(3-巯基-2-吡啶基)苯并咪唑分子内质子转移及溶剂化效应[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0