

**meso**取代卟啉衍生物的结构和光学性质

任雪峰, 任爱民, 王钦, 封继康

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|吉林大學化學學院, 長春 130023

摘要:

**meso**取代卟啉衍生物在红色电致发光材料上有较大的应用。本文采用密度泛函理论(DFT)B3LYP方法, 对以反式二噻吩(S)作为能量传输供体的卟啉衍生物, Zn-5,10,15,20-4-(2-[thiophen-2-yl]thiophene)porphyrin(SPZ)和5,10,15,20-4-(2-[thiophen-2-yl]thiophene)porphyrin(TSP), 进行了全价高能(IP)、电子亲和势(EA)、空穴抽取能(HEP)、电子抽取能(EEP)、空穴和电子重组能(A), 评估了它们的载流子注入和传输能力。用含时密度泛函理论(TDDFT)/B3LYP/6-31G(d)方法计算了吸收光谱。用从头算单激发态相互作用(CIS)方法优化了SPZ和TSP的最低激发单重态S<sub>1</sub>, 并用含时Hartree-Fock方法研究了它们的荧光光谱。理论计算结果表明, 引入S基团对卟啉的光物理性质影响很大, 尤其是电子注入和传输性质。

关键词: 密度泛函理论 能量传输 载流子注入 传输能力

收稿日期 2009-08-02 修回日期 2009-10-16 网络版发布日期 2009-11-10

通讯作者: 任爱民 Email: aimin.ren@gmail.com

## 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. 郭彩虹; 贾建峰; 郭玲; 武海顺. Ga<sub>3</sub>P<sub>3</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; 陆杂荣与亲二烯体的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. 咪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
7. 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
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<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
10. 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
11. 刘幼成; 蒋刚; 朱正和. NX(X=F,Cl,Br)分子结构与极化函数 $\sigma$ 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N<sub>3</sub><sup>-</sup>+N<sub>3</sub>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. F+Cl<sub>2</sub>->ClF+Cl和ClF'+Cl->Cl'+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; 李俊霞. 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; 李锐; 李俊霞. SnO<sub>2</sub>(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
19. 吕玲玲; 王永成. Au<sup>+</sup>(<sup>1</sup>S, <sup>3</sup>D)与N<sub>2</sub>O(<sup>1</sup> $\Sigma^+$ )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SC<sub>2n</sub>S<sup>2-</sup>(n=1~12)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<sub>2</sub>Ge(X=H, CH<sub>3</sub>, F, Cl, Br)与乙烷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(SiO<sub>2</sub>)<sub>n</sub>O<sub>2</sub>H<sub>4</sub>的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(02): 152-155
23. 黄帆; 张家兴; 李锐; 申自勇; 侯士敏; 赵钰钰; 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
24. 马文瑾; 武海顺. Al(m)N<sub>2</sub><sup>-</sup> (m=1~8)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<sup>+</sup>和Ti<sup>+</sup>与CS<sub>2</sub>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
28. 方卉; 耿志远; 王永成; 张兴辉; 王冬梅; 高立国; 陈晓霞. 锗烯X<sub>2</sub>Ge与环丙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<sub>8</sub>P<sub>8</sub>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; 潘绍; 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<sup>2+</sup>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; 傅依春. N<sub>2</sub>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; 李俊霞. 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; 胡桂香; 郑何文; 俞庆森. 吡咯咪唑模型化合物与氨基酸加成的理论探讨[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. 含平面配体的反式二价铂配合物与DNA碱基的作用[J]. 物理化学学报, 2009,25(12): 2551-2557
38. 王清高; 杨宗斌. 危书义. 水分子和二氧化钛(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): 0-0
40. 陈晓华; 樊永明; 曹春显; 胡红智. 酞型木素模型物的光学特性[J]. 物理化学学报, 0,0): 0-0
41. 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
42. 任彦亮; 万坚; 刘俊军; 万洪文. 叶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
43. 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
44. 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
45. 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
46. 徐艺军; 李俊霞; 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
47. 邵晓红; 张仁仁; 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
48. 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
49. 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
50. 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
51. 吴阳; 冯瑞; 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
52. 李志伟; 李香芝; 许先芳; 赵春元; 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
53. 孙慧卿; 刘少锋; 王雨田; 邓贝; 范广涌. CdO及Cd<sub>2</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
54. 罗世霞; 张笑一; 张思学; 朱淮武; 胡继伟; 卫钢. 疏基偶氮苯分子电子传输的取代基效应[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1471-1476
55. 马文瑾; 张献明; 许小红; 王艳英; 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
56. 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
57. 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
58. 张旭; 储伟; 陈建钧; 戴晓雁. 甲醇引发的环氧乙烷开环聚合过程[J]. 物理化学学报, 2009,25(03): 451-456
59. 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
60. 罗小杰; 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
61. 洪功义; 黎乐民; 徐光亮; 林宪杰. 单簇基团的键合异构现象[J]. 物理化学学报, 1995,11(06): 481-483
62. 孙宝珍; 陈文凯; 徐兰香. 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
63. 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
64. 李权; 黄方千. 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

65. 吴文娟; 赖琼; 郑康成; 云建春. 抗癌性咪唑唑啉衍生物的结构构效关系[J]. 物理化学学报, 2005, 21(1): 28-32
66. 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
67. 武海顺; 许小红; 马文瑞; 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
68. 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
69. 吕海港; 黎乐民. 表现价态异常分子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
70. 曹小龙; 郭丽. 多通道反反应O(<sup>2</sup>P)+CH<sub>2</sub>F<sub>2</sub>的理论研究[J]. 物理化学学报, 2004, 20(06): 642-646
71. 王利江; 张聪杰. 武海顺. C<sub>n</sub>B<sup>5</sup>(B=O, ±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
72. 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
73. 徐艺军; 李俊强; 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
74. 史福强; 姜小明; 徐志成; 安静仪; 俞稼耀. 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
75. 王勇; 李浩然; 吴从敏; 韩世钧. 烷基咪唑型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
76. 王勇; 李浩然; 王从敏; 许映杰; 韩世钧. 重氮二溴卡宾和甲醛加成反应的量化研究[J]. 物理化学学报, 2004, 20(11): 1339-1344
77. 田欣欣; 张富强; 冯瑞娟; 武海顺. B<sub>2</sub>N<sub>2</sub>笼的稳定性和笼中四元环键类型对笼稳定性的影响[J]. 物理化学学报, 2006, 22(08): 937-941
78. 晋春; 贾银娟; 王宝骏; 范彬彬; 马静红; 李瑞平. 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
79. 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
80. 唐智勇; 胡云楚; 赵莹; 刘述斌. 羧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
81. 刘海洋; 冷科; 胡军; 应晓; 徐志广; 张启光. A<sub>3</sub>型Corralle中位取代基对其β<sup>1</sup>H-NMR的影响[J]. 物理化学学报, 2009, 25(04): 694-700
82. 辜家芳; 陆春海; 陈文凯; 许莹; 郑金德. 气相和水溶液中铂酰配合物UO<sub>2</sub><sup>2+</sup>·n<sup>+</sup>·n<sup>-</sup> (L=F<sup>-</sup>, CO<sub>2</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
83. 倪哲明; 毛江洪; 潘国祥; 胥倩; 李小学. 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
84. 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
85. 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
86. 葛桂英; 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
87. 孙秀良; 黄崇品; 张佩; 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
88. 徐四川; 邓圣荣; 马丽英; 史强; 葛茂发; 张兴康. 牛视紫红质蛋白中视黄醛的活性位点[J]. 物理化学学报, 2009, 25(07): 1290-1296
89. 宋建民; 刘东州; 王云明; 刘立芳; 康艳娟; 王保柱; 朱玲欣; 刘书华. 平行板间超文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): 0-0
90. 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): 0-0
91. 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
92. 刘洁翔; 魏赞; 张曙光; 王桂香; 韩恩山; 王建国. NO<sub>x</sub>分子在[Ag]-AMOR分子筛中的吸附[J]. 物理化学学报, 2009, 25(01): 91-96
93. 张村荣; 吴有春; 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
94. 张富春; 张志勇; 张威虎; 阎军峰; 江妮. Pb<sub>2</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
95. 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
96. 赵新新; 陶向明; 密一鸣; 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
97. 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
98. 毛江洪; 倪哲明; 潘国祥; 胥倩. Cu催化水煤气变换反应机理[J]. 物理化学学报, 2008, 24(11): 2059-2064
99. 蒋仕宇; 滕波涛; 鲁维青; 刘雪峰; 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
100. 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
101. 郑金德; 陆春海; 孙宝珍; 陈文凯. N<sub>2</sub>分子在UO<sub>2</sub>(100)表面的吸附与解离[J]. 物理化学学报, 2008, 24(11): 1995-1999
102. 魏洪源; 罗顺忠; 刘国平; 熊晓玲; 宋宏涛. H原子在完美δ-Pu金属相中的扩散行为[J]. 物理化学学报, 2008, 24(11): 1964-1968
103. 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
104. 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
105. 陈新; 李琪; 蒋青. 几种(C<sup>+</sup>N)Pt<sup>II</sup>Q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
106. 李宗宝; 姚凯伦; 刘祖黎. 有机-无机杂化化合物[Cu(μ-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
107. 黄水丽; 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
108. 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
109. 李会学; 王晓峰; 董小宁; 袁焜. 朱元成; 萧泰. 烟碱二聚体的结构与性质[J]. 物理化学学报, 2009, 25(01): 161-168
110. 刘海峰; 闫华; 刘志勇; 王少龙. 三氟化氮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
111. 林英武; 王中华; 聂长明; 倪峰云. 取代基对吡啶结构和性质的影响[J]. 物理化学学报, 2007, 23(10): 1594-1598
112. 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
113. 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
114. 王罗新; 刘勇; 庾新林; 李松年; 王晓江. H<sup>+</sup>、NH<sub>4</sub><sup>+</sup>对HMx的NO<sub>2</sub>键解离能的影响[J]. 物理化学学报, 2007, 23(10): 1560-1564
115. 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
116. 姜勇; 傅伟; 伍成发; 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
117. 潘国祥; 倪哲明; 李小学. 类水滑石主体层板与客体CO<sub>2</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
118. 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
119. 王艳芳; 马文瑞; 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
120. 杨作银; 周宏伟; 张敬敏; 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
121. 王溢磊; 吴国是. 香豆素衍生物的光发射能计算及XC泛函的合理选择[J]. 物理化学学报, 2007, 23(12): 1831-1838
122. 李磊; 桑萃; 张鹏程; 蒋刚. α-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>阻氧微观机制研究[J]. 物理化学学报, 2007, 23(12): 1912-1916
123. 徐伯华; 李来才; 王欣; 田安民. N<sub>n</sub>H<sub>3</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
124. 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
125. 王溢磊; 吴国是. ESIP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
126. 贝逸翊; 沈沉浮; 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
127. 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
128. 王朝杰; 蔡跃凯. 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
129. 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
130. 张静; 王艳芳; 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
131. 李思殿; 郭巧凌; 苗苗青; 任光明. 含平面配位碳的过渡金属配合物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
132. 蒲敏; 王海霞; 冯霄; 吴东; 孙子罕. DFT法研究3-羟基丙烯酰胺的双键旋转异构反应机理[J]. 物理化学学报, 2002, 18(06): 522-526
133. 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
134. 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
135. 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
136. 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
137. 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
138. 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
139. 李权; 刘晓亚; 高涛; 朱正和; 傅亿备; 汪小琳; 孙琳. PuO<sup>2+</sup>的势能函数的稳定性[J]. 物理化学学报, 2000, 16(11): 987-991
140. 张晓清; 贾建峰; 武海顺; 裴晓琴. 羰基硼化合物(BCO)<sub>n</sub> (n=1~12)的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006, 22(06): 684-690
141. 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
142. 陈波珍; 黄明宝; 颜达予. (CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>N和(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>NH<sup>+</sup>的密度泛函理论计算[J]. 物理化学学报, 1999, 15(06): 495-499
143. 周立新; 莽朝水; 章永凡. 1,2-二磺酸的气相酸性和芳香性[J]. 物理化学学报, 2000, 16(01): 15-21

144. 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
145. 郭森立;侯廷军;徐俊杰;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
146. 李权;徐成刚;王红艳;朱正和;PuH<sub>2</sub>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
147. 陈文凯;许娇;章永凡;周立新;李俊甄.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
148. 李凤仪;徐文斌;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
149. 张远;曹爱华;孙岳明;刘举正;顾瑾.NO双分子和二聚体与Cu<sub>2</sub>作用的理论计算[J].物理化学学报, 2003,19(03): 193-197
150. 曹阳;吕春绪;吕早生;蔡春;魏运洋;李斌栋.硝酸根离子和二氧化碳分子的弯曲变形研究[J].物理化学学报, 2002,18(06): 527-531
151. 蔡建秋;陶向明;谭明秋.氮原子吸附的Cu(100)表面原子结构和电子态[J].物理化学学报, 2007,23(03): 355-360
152. 王云海;刘永东;罗云敬;张伟;钟儒刚.过氧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
153. 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
154. 张树强;王雅琼;郑旭明.硝基炔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
155. 李权;李德华;盛勇;朱正和;Pd<sup>n+</sup>(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
156. 马文瑞;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
157. 孟理美;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
158. 田蒙奎;蒋丽;上官雪峰;王世杰;欧阳自远.可见光响应光催化剂K<sub>4</sub>Ce<sub>2</sub>Ta<sub>10</sub>O<sub>30</sub>、K<sub>4</sub>Ce<sub>2</sub>Nb<sub>10</sub>O<sub>30</sub>及其固溶体的电子结构[J].物理化学学报, 2007,23(04): 466-472
159. 蒋仕宇;滕波涛;袁金焕;郭晓伟;罗孟飞.CO在CeO<sub>2</sub>(111)表面的吸附与氧化[J].物理化学学报, 2009,25(08): 1629-1634
160. 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
161. 张子英;杨德林;刘云虎;曹海滨;邵建新;井群.BaTiO<sub>3</sub>的电子结构和光学性质[J].物理化学学报, 2009,25(09): 1731-1736
162. 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
163. 杨艳;张宜恒;丁兰;汪汉卿.一种天然产物Wangzaozin A的细胞毒性[J].物理化学学报, 2009,25(09): 1749-1755
164. 陈毓敏;刘珂;袁晓辉;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
165. 原现瑞;尚振华;李润岩;刘英华;陈晓霞;张慧丽;修勇.N-半基酰胺分子的氮-氮键旋转位阻及分子构象[J].物理化学学报, 2009,25(09): 1785-1790
166. 罗姗姗;仇永清;刘晓东;刘春光;苏惠民.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
167. 张美一;何广智;丁程程;陈灏;潘俐.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
168. 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
169. 张福兰;李来才;田安民.乙烷在Ni(111)表面的吸附和解吸[J].物理化学学报, 2009,25(09): 1883-1889
170. 詹卫仲;潘石;李源作;陈茂笃.二氢咪唑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
171. 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
172. 赵新新;陶向明;宓一鸣;陈成;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
173. 杨宗斌;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, 2009,25(11): 2329-2335
174. 倪哲明;晋倩;姚萍;毛江洪;刘晓明.层间水含量对Mg<sub>2</sub>Al-LDHs-Cl力学特性的影响[J].物理化学学报, 2009,25(11): 2325-2328
175. 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
176. 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
177. 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, 2009,25(12): 2543-2550
178. 左志军;黄伟;韩培德;李志红.CO和H<sub>2</sub>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
179. 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
180. 徐晓芳;高放;李红茹;张胜涛.生色团连接的苯硼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
181. 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
182. 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
183. 王会萍;白福全;郑清川;赵增霞;赵晓杰;张红星.咪唑咪唑异构体的电子结构和光学性质[J].物理化学学报, 0,(): 0-0
184. 姜富灵;翟高红;丁黎;岳可芬;刘妮;史自楨;文振翼.NO<sub>2</sub><sup>-</sup>、OH<sup>-</sup>、OH<sup>·</sup>对HMX初始热解的影响[J].物理化学学报, 0,(): 0-0
185. 彭洪亮;丁贤勇;易平贵;汪朝旭;李筱芳;王涛;周继明.2-(3-巯基-2-吡啶基)苯基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