

## 高精度相对论密度泛函计算方法

王繁; 黎乐民

北京大学化学与分子工程学院, 稀土材料化学及应用国家重点实验室, 北京 100871

摘要:

对适用于含重元素体系的高精度相对论密度泛函计算方法作简要的评述. 结合本实验室的研究工作, 重点介绍严格处理相对论效应的四分量相对论密度泛函计算方法和近似处理相对论效应的两分量和标量相对论密度泛函计算方法, 包括零级规则展开近似 (ZORA) 方法及其改进和排除奇点的近似展开 (SEAX) 方法, 以及适合处理局部包含重元素大体系的接合两分量-标量相对论 (或非相对论) 计算方法.

关键词: 密度泛函理论 高精度计算 相对论效应 重元素

收稿日期 2004-02-09 修回日期 2004-02-23 网络版发布日期 2004-08-15

通讯作者: 黎乐民 Email: lilm@pku.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.  $\text{Ga}_x\text{P}_y$  ( $x+y=8$ ) 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.  $\text{PuX} + (\text{X}=\text{H}, \text{O}, \text{N}, \text{C})$  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.  $\text{CO}_2$  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. (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.  $\text{NX}$  ( $\text{X}=\text{F}, \text{Cl}, \text{Br}$ ) 分子结构与极化函数  $f$  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. 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
15. 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
16. 林伟; 章永凡; 李奕; 陈勇; 李俊箴.  $\text{SnO}_2$  (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
17. 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
18. 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
19. 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
20. 耿志远; 王永成; 汪汉卿. 锆烯  $\text{X}_2\text{Ge}$  ( $\text{X}=\text{H}, \text{CH}_3, \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}$ ) 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
21. 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
22. 黄飙; 张家兴; 李锐; 申自勇; 侯士敏; 赵兴钰; 薛增泉; 吴全德.  $\text{Al-C}_{60}$ -Al 分子结电子输运特性的第一性原理计算

扩展功能

本文信息

PDF(1882KB)

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

▶ 高精度计算

▶ 相对论效应

▶ 重元素

本文作者相关文章

▶ 王繁

▶ 黎乐民

23. 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
24. 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
25. 高立国;王永成;耿志远;陈晓霞;吕玲玲;戴国梁;王冬梅.气相中 $\text{Sc}^+$ 和 $\text{Ti}^+$ 与 $\text{CS}_2$ 反应的计算研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(10): 1102-1107
26. 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
27. 方冉;耿志远;王永成;张兴辉;王冬梅;高立国;陈晓霞.锗烯 $\text{X}_2\text{Ge}$ 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
28. 张材荣;陈宏善;陈玉红;冯旺军;李维学;许广济;寇生中. $\text{Al}_8\text{P}_8$ 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
29. 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 $\text{Zn}^{2+}$ 在水锰矿表面的吸附和沉淀[J]. 物理化学学报, 2005,21(12): 1378-1383
30. 朱瑜;蒋刚;于桂凤;朱正和;王和义;傅依备. $\text{N}_2$ 在Pd金属表面的吸附行为[J]. 物理化学学报, 2005,21(12): 1343-1346
31. 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
32. 李会英;蒲敏;陈标华.DFT法研究分子筛催化 $\text{trans-2-}$ 丁烯的双键异构[J]. 物理化学学报, 2005,21(08): 898-902
33. 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
34. 王艳花;邹建卫;胡桂香;郑柯文;俞庆森.吡咯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
35. 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
36. 蒲敏;陈标华;李会英;刘坤辉.DFT法研究离子液中 $\text{EMIM}^+$ 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
37. 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
38. 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
39. 周俊红;曾艳丽;孟令鹏;郑世钧. $\text{ClO}$ 与 $\text{ClO}$ 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
40. 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
41. 徐艺军;李俊钱;章永凡;陈文凯. $\text{O}_2$ 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
42. 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
43. 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
44. 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
45. 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
46. 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
47. 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
48. 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
49. 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
50. 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
51. 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
52. 张材荣;陈宏善;陈玉红;魏智强;蒲忠胜.二甲基富勒烯衍生物[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
53. 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
54. 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
55. 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
56. 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
57. 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

58. 张华; 陈小华; 张振华; 邱明. 接枝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
59. 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
60. 吴文娟; 赖榕; 郑康成; 云逢存. 抗癌性吡啶啉生物碱衍生物的定量构效关系[J]. 物理化学学报, 2005,21(01): 28-32
61. 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
62. 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
63. 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
64. 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
65. 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
66. 王利江; 张聪杰; 武海顺. C<sub>n</sub>B<sub>n</sub><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
67. 李中华; 王锐; 陈振宁; 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
68. 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
69. 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
70. 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
71. 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
72. 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
73. 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
74. 孙科举; 李微雪; 冯兆池; 李灿. Fe-AIPO<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
75. 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
76. 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
77. 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
78. 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
79. 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
80. 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
81. 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
82. 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
83. 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
84. 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, 0,(): 0-0
85. 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
86. 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
87. 张富春; 张志勇; 张威虎; 阎军峰; 江妮. Pb<sub>x</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
88. 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
89. 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
90. 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
91. 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
92. 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

93. 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
94. 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
95. 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
96. 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
97. 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
98. 陈新;李瑛;蒋青.几种(C<sup>+</sup>N)Pt<sup>II</sup>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
99. 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
100. 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
101. 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
102. 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
103. 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
104. 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
105. 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
106. 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
107. 王罗新;刘勇;虞新林;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
108. 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
109. 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
110. 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
111. 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
112. 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
113. 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
114. 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
115. 李磊;桑革;张鹏程;蒋刚. $\alpha$ -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
116. 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
117. 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
118. 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
119. 贝逸翎;王沉浮;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
120. 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
121. 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
122. 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
123. 张静;王艳宾;武海顺.(BCO)<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
124. 李思殿;郭巧凌;苗常青;任光明.含平面配位碳的过渡金属炔配合物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
125. 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
126. 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
127. 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
128. 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
129. 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
130. 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
131. 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
132. 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
133. 张晓清;贾建峰;武海顺;裴晓琴.碳硼化合物 $(BCO)_n(n=1\sim 12)$ 的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(06): 684-690
134. 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
135. 陈波珍;黄明宝;颜达予. $(CH_2)_2N$ 和 $(CH_3)_2NH^+$ 的密度泛函理论计算[J]. 物理化学学报, 1999,15(06): 495-499
136. 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
137. 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
138. 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
139. 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
140. 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
141. 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
142. 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
143. 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
144. 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
145. 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
146. 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
147. 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
148. 李权;李德华;盛勇;朱正和. $PdY^{n\pm}(n=0, 1, 2, 3)$ 分子离子的结构与稳定性[J]. 物理化学学报, 2006,22(12): 1516-1519
149. 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
150. 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
151. 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 $K_4Ce_2Ta_{10}O_{30}$ 、 $K_4Ce_2Nb_{10}O_{30}$ 及其固溶体的电子结构[J]. 物理化学学报, 2007,23(04): 466-472
152. 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, 0,(): 0-0
153. 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, 0,(): 0-0
154. 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, 0,(): 0-0
155. 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, 0,(): 0-0
156. 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, 0,(): 0-0
157. 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, 0,(): 0-0
158. 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, 0,(): 0-0