

CN在 Pt(100)表面吸附的密度泛函研究

胡建明; 李俊箴; 李奕; 章永凡; 林伟

福州大学化学化工学院, 结构化学国家重点实验室, 福州 350002; 中国人民武装警察部队福州指挥学校科技教研室, 福州 350002

摘要:

采用密度泛函方法, 以原子簇Pt₁₄为模拟表面, 对CN自由基分子在Pt(100)表面上不同吸附位的吸附情况进行了研究. 结果表明, CN分子吸附在Pt(100)面上时, 通过原子C垂直吸附在表面顶位是其最佳吸附方式, CN键振动频率明显发生蓝移, 与实验事实相吻合; 而在桥位及四方穴位吸附时CN键振动频率均发生红移. 吸附前后, CN分子的 σ 、 n 电子与底物间的电荷转移的差异决定了CN键振动频率的不同变化.

关键词: 密度泛函 Pt(100)表面 CN 吸附

收稿日期 2003-06-16 修回日期 2003-08-27 网络版发布日期 2004-01-15

通讯作者: 李俊箴 Email: quant@fzu.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. 莫依; 黎乐民. 对体系局部进行高精度量子化学计算的研究[J]. 物理化学学报, 2002, 18(08): 716-720
7. 吕鑫; 徐昕; 王南钦; 廖孟生; 张乾二. CO在Cu/ZnO上吸附的簇模型研究[J]. 物理化学学报, 1997, 13(11): 1005-1009
8. 陈锦灿; 李俊; 吴文娟; 郑康成. 系列异构配合物Ru(azpy)₂Cl₂的结构与抗癌活性[J]. 物理化学学报, 2006, 22(04): 391-396
9. 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
10. 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
11. 薛卫东; 张广丰; 朱正和; 汪小琳; 罗德礼; 邹乐西; 孙颖. CO₂二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
12. 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
13. 刘幼成; 蒋刚; 朱正和. NX (X=F, Cl, 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
14. 艾洪奇; 步宇翔. 黄金规则用于N₃⁻+N₃体系电子转移的研究[J]. 物理化学学报, 2001, 17(03): 210-215
15. 王遵尧; 肖鹤鸣; 李金山. F+Cl₂->ClF+Cl和Cl'F+Cl->Cl'+ClF的反应机理[J]. 物理化学学报, 2001, 17(02): 107-110
16. 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
17. 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
18. 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
19. 林伟; 章永凡; 李奕; 陈勇; 李俊箴. SnO₂ (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(1575KB)

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

▶ Pt(100)表面

▶ CN

▶ 吸附

本文作者相关文章

▶ 胡建明

▶ 李俊箴

▶ 李奕

▶ 章永凡

▶ 林伟

20. 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
21. 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
22. 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
23. 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
24. 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
25. 黄飏;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
26. 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
27. 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
28. 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
29. 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
30. 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
31. 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
32. 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
33. 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
34. 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
35. 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
36. 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
37. 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
38. 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
39. 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
40. 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
41. 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,2010,26(01): 155-162
42. 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,2010,26(01): 110-114
43. 陈晓华,樊永明,曹春昱,胡红智.醌型木素模型物的光学特性[J].物理化学学报,2010,26(01): 125-130
44. 刘海波,仇永清,孙世玲,孙晓娜,苏忠民.双咪唑苯和双三唑苯及其衍生物非线性光学性质的密度泛函研究[J].物理化学学报,2010,26(01): 120-124
45. 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
46. 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
47. 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
48. 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
49. 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
50. 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

51. 张敬来; 苗体方; 陶偌偈; 臧双全; 田安民. 酚氧桥联铜钴异双核配合物的密度泛函研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(06): 549-552
52. 徐艺军; 李俊篔; 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
53. 白玉林; 陈向荣; 杨向东; 芦鹏飞. 硫团簇 S_n ($n=2\sim 8$)结构的朗之万分子动力学计算[J]. 物理化学学报, 2003,19(12): 1102-1107
54. 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
55. 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
56. 夏飞; 林银钟; 许宗祥; 林敬东; 吕鑫; 廖代伟. C_{2v} 对称性簇 Ru_2N_2 的理论计算[J]. 物理化学学报, 2003,19(12): 1119-1122
57. 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
58. 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
59. 吴阳; 冯璐; 张向东. $C_6H_5-H\cdots X$ 分子间氢键的理论计算[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 653-658
60. 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
61. 孙慧卿; 丁少锋; 王雨田; 邓贝; 范广涵. CdO 及 $Cd_xZn_{1-x}O$ 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
62. 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
63. 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
64. 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
65. 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
66. 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
67. 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
68. 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
69. 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
70. 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
71. 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
72. 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
73. 吴文娟; 赖璐; 郑康成; 云逢存. 抗癌性吡啶啉衍生物的定量构效关系[J]. 物理化学学报, 2005,21(01): 28-32
74. 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
75. 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
76. 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
77. 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
78. 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
79. 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
80. 刘跃; 刘佳雯; 杨小震. 新型镍催化剂催化乙炔聚合的阳离子机理[J]. 物理化学学报, 2002,18(12): 1068-1070
81. 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
82. 徐艺军; 李俊篔; 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

83. 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
84. 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
85. 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
86. 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
87. 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
88. 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
89. 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
90. 刘海洋 冷科 胡军 应晓 徐志广 张启光. A_3 型Corrolle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
91. 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 $UO_2L^{2-n}a_n$ ($L=F^-, CO_3^{2-}, NO_3^-$; $n=0-6, a=1, 2$)的结构和振动光谱[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 655-660
92. 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
93. 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
94. 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
95. 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
96. 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
97. 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
98. 宋建民, 刘东州, 王云明, 刘立芳, 康艳霜, 王保柱, 朱玲欣, 刘书华.平行板间超支化聚物流体的密度分布和溶剂化力[J]. 物理化学学报, 2010,26(01): 169-174
99. 姚萍, 倪哲明, 胥倩, 毛江洪, 刘晓明, 王巧巧.锡锑水滑石中的超分子作用[J]. 物理化学学报, 2010,26(01): 175-182
100. 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
101. 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
102. 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
103. 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
104. 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
105. 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
106. 张建坡 周欣 白福全 张红星.一类 $[Os^{(III)}(CO)_3(tfa)(L)]$ ($L=O^{\wedge}O, O^{\wedge}N, N^{\wedge}N$)配合物的结构和光谱特征[J]. 物理化学学报, 2008,24(12): 2243-2248
107. 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
108. 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
109. 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
110. 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
111. 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
112. 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

113. 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
114. 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
115. 陈新;李瑛;蒋青. 几种(C[^]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
116. 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
117. 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
118. 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
119. 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
120. 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
121. 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
122. 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
123. 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
124. 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
125. 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
126. 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
127. 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
128. 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
129. 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
130. 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
131. 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
132. 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
133. 孙文秀;张聪杰. 一种新型包含平面四配位碳二硼有机化合物的理论研究[J]. 物理化学学报, 2008,24(01): 32-36
134. 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
135. 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
136. 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
137. 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
138. 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
139. 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
140. 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
141. 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
142. 李思殿;郭巧凌;苗常青;任光明. 含平面配位碳的过渡金属羰基配合物M_nH_nC密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(05): 743-745
143. 王朝杰. 铁原子与氮分子间的相互作用——单端位构型[J]. 物理化学学报, 2007,23(05): 676-682

144. 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
145. 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
146. 王永成;耿志远;陈宏善.羰基氧化物环化反应动力学的计算研究[J]. 物理化学学报, 2002,18(01): 45-49
147. 刘建军;封继康;付伟;任爱民;刘桂霞. $^1\text{CH}_2 + \text{N}_2\text{O}$ 反应的势能面[J]. 物理化学学报, 2001,17(07): 586-593
148. 刘奉岭.不饱和类卡宾 $\text{H}_2\text{C}=\text{CLIF}$ 的密度泛函研究 [J]. 物理化学学报, 2002,18(03): 228-231
149. 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
150. 郑康成;匡代彬;沈勇;王菊平.钌吡啶单配体双取代基效应 [J]. 物理化学学报, 2001,17(01): 43-47
151. 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
152. 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
153. 王利江;张聪杰. $\text{B}_2\text{C}_n^+(n=1\sim 9)$ 团簇的结构及其稳定性[J]. 物理化学学报, 2006,22(06): 726-731
154. 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
155. 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
156. 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
157. 蔡小萍;方德彩;傅孝愿. ClONO_2 与 $\text{O}(^3P)$ 的反应机理[J]. 物理化学学报, 2000,16(08): 689-693
158. 郑康成;匡代彬;王菊平;沈勇. $\text{M}(\text{bpy})_3^{2+}$ ($\text{M}=\text{Fe}, \text{Ru}, \text{Os}$)电子结构与相关性质[J]. 物理化学学报, 2000,16(07): 608-612
159. 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
160. 刘丹;陈光巨;刘若庄;傅孝愿.2-溴乙酸气相热消除反应的机理探讨[J]. 物理化学学报, 1999,15(10): 872-876
161. 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
162. 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
163. 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
164. 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
165. 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
166. 朱瑜;蒋刚;方芳;于桂凤;朱正和. PdN 、 PdN_2 分子的结构与势能函数*[J]. 物理化学学报, 2006,22(05): 538-541
167. 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
168. 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
169. 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
170. 宋争林;张复实;陈锡侨;赵福群.酞菁基态和激发态的计算[J]. 物理化学学报, 2003,19(02): 130-133
171. 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
172. 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
173. 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
174. 李丽;吴锋;陈实;陈人杰. $\text{LaNi}_{5-x}\text{Co}_x$ 合金电子结构的第一性原理分析[J]. 物理化学学报, 2006,22(11): 1331-1336
175. 倪哲明;潘国祥;王力耕;陈丽涛. LDHs主体层板与卤素阴离子超分子作用的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(11): 1321-1324
176. 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,

177. 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
178. 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
179. 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
180. 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
181. 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
182. 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
183. 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
184. 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
185. 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
186. 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
187. 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
188. 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
189. 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
190. 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
191. 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
192. 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
193. 詹卫伸, 潘石, 李源作, 陈茂笃.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
194. 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
195. 赵新新, 陶向明, 宓一鸣, 陈戎, 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
196. 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
197. 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
198. 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
199. 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
200. 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
201. 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
202. 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
203. 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, 2010,26(01): 131-140
204. 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, 2010,26(01): 259-264
205. 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

206. 陈秀敏, 杨斌, 陶东平, 戴永年. AlCl₃歧化反应分解法制备金属铝过程中[AlCl]_n的形成机理[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
207. 刘玲玲, 王永成. 气相中W⁺活化CO₂分解的自旋禁阻反应机理[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
208. 唐典勇, 黄雪娜, 邹婷, 金诚, 胡建平, 伏秦超. 金钼二元小团簇的几何结构与电子性质[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
209. 李敏杰, 李亚军, 彭淳容, 陆文聪. 一种新型细梗胡枝子黄酮类提取物的结构和抗氧化活性[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
210. 雷永林, 霍冀川. 烷基取代对罗丹明的电子结构与光谱的理论研究[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
211. 张诚, 严妍, 陈丽涛, 马淳安. 9,9'-螺双芴的光电性能[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
212. 曹青松, 邓开明. C₅₆X₁₀ (X=F, Cl, Br, I)的结构稳定性和电子性质[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
213. 王会萍, 白福全, 郑清川, 赵增霞, 赵晓杰, 张红星. 咪唑啉异构体的电子结构和光学性质[J]. 物理化学学报, 2010,26(01): 115-119
214. 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
215. 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, 2010,26(01): 141-148
-