

量子化学及计算化学

烷基取代对罗丹明的电子结构与光谱的影响

雷永林, 霍冀川

西南科技大学材料科学与工程学院, 四川 绵阳 621010

摘要:

在密度泛函理论(DFT)的B3LYP水平对不同烷基在不同位置取代形成的8种罗丹明化合物进行结构优化, 并在此基础上应用含时密度泛函理论(TD-DFT)和单激发组态相互作用(CIS)方法分析了取代基对罗丹明的电子结构、前线分子轨道及电子光谱的影响. 计算结果表明, 前线分子轨道主要分布在罗丹明分子的氧杂蒽环上, 罗丹明分子中两个N端的H各只有1个H被烷基取代时, 最高占据轨道(HOMO)在主要共轭环分布最多, 且HOMO和最低未占据轨道(LUMO)分布比例相差最小, 两个N端4个H同时被甲基取代时, 能隙最窄, 对气相最大吸收波长红移程度最大, 两个N端4个H同时被乙基取代时, 气相荧光最大, 发射波长最长.

关键词: 密度泛函理论 罗丹明 烷基取代 前线分子轨道 电子光谱

收稿日期 2009-06-22 修回日期 2009-09-28 网络版发布日期 2009-12-14

通讯作者: 霍冀川 Email: huojichuan@swust.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 r 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
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

扩展功能

本文信息

PDF(615KB)

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

▶ 罗丹明

▶ 烷基取代

▶ 前线分子轨道

▶ 电子光谱

本文作者相关文章

▶ 雷永林

▶ 霍冀川

19. 吕玲玲;王永成. $\text{Au}^+(\text{}^1\text{S}, \text{}^3\text{D})$ 与 $\text{N}_2\text{O}(\text{}^1\Sigma^+)$ 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. 黄飘; 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. 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;李俊篔. 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. 吡咯啉酮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, 杨宗献, 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, 2010,26(01): 155-162
40. 任雪峰, 任爱民, 王钦, 封继康. meso 取代吡啶衍生物的结构和光学性质[J]. 物理化学学报, 2010,26(01): 110-114
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, 2010,26(01): 125-130
42. 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
43. 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
44. 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
45. 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
46. 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
47. 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
48. 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
49. 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

50. 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
51. 姜永才; 张晓宏; 吴世康. Oxonol 染料的稳态光物理行为研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(04): 350-354
52. 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
53. 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
54. 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
55. 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
56. 余秀芬; 王哲民. 氧心羧桥异三核过渡金属簇合物 $[\text{Fe}_2\text{MO}(\text{CH}_3\text{COO})_6\text{Py}_3]$. Py (1, $\text{M}=\text{Mn}$; 2, $\text{M}=\text{Co}$; 3, $\text{M}=\text{Ni}$)和 $[\text{Fe}_2\text{MO}(\text{CCl}_3\text{COO})_6(\text{THF})_3]$ (4, $\text{M}=\text{Mn}$; 5, $\text{M}=\text{Co}$; 6, $\text{M}=\text{Ni}$)电子光谱的研究[J]. 物理化学学报, 1991,7(05): 577-581
57. 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
58. 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
59. 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
60. 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
61. 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
62. 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
63. 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
64. 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
65. 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
66. 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
67. 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
68. 王连宾; 吴文鹏; 张敬来; 曹泽星. 反式和顺式 HOOOH 的电子光谱的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(09): 1079-1084
69. 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
70. 吴文娟; 赖榕; 郑康成; 云逢存. 抗癌性咪唑啉衍生物的定量构效关系[J]. 物理化学学报, 2005,21(01): 28-32
71. 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
72. 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
73. 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
74. 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
75. 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
76. 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
77. 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
78. 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
79. 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
80. 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
81. 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
82. 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
83. 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
84. 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
85. 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
86. 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
87. 陈其凤 姜东 徐耀 吴东 孙子罕.溶胶-凝胶-水热法制备Ce-Si/TiO₂及其可见光催化性能[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 617-623
88. 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
89. 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
90. 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TiO₂(101)表面的敏化机理[J]. 物理化学学报, 2009,25(05): 947-952
91. 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
92. 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
93. 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
94. 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
95. 冯利利, 赵威, 刘洋, 焦亮, 李星国.MCM-41分子筛担载纳米TiO₂复合材料光催化降解罗丹明B[J]. 物理化学学报, 2009,25(07): 1347-1351
96. 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, 2010,26(01): 169-174
97. 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, 2010,26(01): 175-182
98. 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
99. 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
100. 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
101. 张富春;张志勇;张威虎;阎军峰;江妮.Pb_xSr_{1-x}TiO₃的电子结构[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 61-66
102. 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
103. 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
104. 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
105. 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
106. 蒋仕宇;滕波涛;鲁继青;刘雪松;杨培芳;杨飞勇;罗孟飞.甲醛在CeO₂(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
107. 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
108. 郑金德;陆春海;孙宝珍;陈文凯.N₂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
109. 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
110. 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
111. 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

112. 陈新;李琪;蒋青.几种(C^{^N})Pt^{II}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
113. 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
114. 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
115. 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
116. 刘海洋;李立;应晓;王湘利;徐志广;廖世军;张启光.锰(III)5,10,15-三(五氟苯基)-Corrole配合物的DFT计算[J]. 物理化学学报, 2008,24(09): 1602-1608
117. 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
118. 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
119. 林英武;王中华;聂长明;倪峰云.取代基对卟吩结构和性质的影响[J]. 物理化学学报, 2007,23(10): 1594-1598
120. 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
121. 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
122. 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
123. 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
124. 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
125. 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
126. 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
127. 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
128. 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
129. 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
130. 李磊;桑革;张鹏程;蒋刚. σ -Al₂O₃阻氢微观机制研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(12): 1912-1916
131. 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
132. 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
133. 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
134. 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
135. 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
136. 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
137. 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
138. 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
139. 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
140. 蒲敏;王海霞;冯雷;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
141. 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
142. 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

143. 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

144. 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

145. 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

146. 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

147. 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

148. 张晓清;贾建峰;武海顺;裴晓琴.羰基硼化合物 $(BCO)_n(n=1\sim 12)$ 的理论研究[J].物理化学学报,2006,22(06):684-690

149. 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

150. 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

151. 周立新;莽春永;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

152. 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

153. 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

154. 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

155. 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

156. 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

157. 张聪杰;曹泽星;武海顺;徐昕;张乾二.聚炔烃电子吸收光谱的理论研究[J].物理化学学报,2002,18(07):585-589

158. 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

159. 朱诗国;唐珂;向娟娟;吕红斌;李小玲;聂新民;周后德;沈守荣;李桂源.生物荧光氧化硅纳米颗粒的研制与应用[J].物理化学学报,2003,19(04):311-314

160. 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

161. 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

162. 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

163. 吴立新;田永驰;梁映秋.含Schiff碱基双分子膜聚集态的pH依存性[J].物理化学学报,1992,8(03):304-306

164. 赵德超;叶兴凯;吴越.氧化和加氧酶的化学模拟 I. MPC、MTPP/DMF(M=Fe、Co、Cu、Pb和TPP分别为酞菁和四苯基卟啉环;DMF为*N-N'*二甲基甲酰胺)体系的电子光谱和吸氧动力学[J].物理化学学报,1991,7(04):436-442

165. 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

166. 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

167. 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

168. 李静谊;斯琴高娃;刘丽娜. TiO_2 /膨润土光催化降解有机污染物[J].物理化学学报,2007,23(01):16-20

169. 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

170. 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

171. 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

172. 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

173. 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

174. 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

175. 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

176. 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

177. 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

178. 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

179. 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

180. 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

181. 梁锦霞, 贾文红, 张杰杰, 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

182. 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

183. 应晓, 彭春超, 汤安民, 王晓纯, 刘海洋, 张启光. 手性联萘桥联双卟啉的电子光谱与二阶非线性光学性质[J]. 物理化学学报, 2009,25(09): 1895-1905

184. 詹卫伸, 潘石, 李源作, 陈茂筠. 二氢卟啉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

185. 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

186. 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

187. 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

188. 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

189. 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

190. 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

191. 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

192. 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

193. 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

194. 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

195. 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

196. 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

197. 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, 2010,26(02): 415-421

198. 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, 2010,26(02): 441-446

199. 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, 2010,26(02): 453-460

200. 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, 2010,26(02): 466-470

201. 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

202. 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, 2010,26(02): 461-465

203. 王会萍, 白福全, 郑清川, 赵增霞, 赵晓杰, 张红星. 咪唑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

204. 姜富灵, 翟高红, 丁黎, 岳可芬, 刘妮, 史启祯, 文振翼. NO_2 , OH和 OH^- 对环四甲撑四硝胺初始热解的影响[J]. 物理化学学报, 2010,26(02): 409-414

205. 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

206. 喻力, 郑广, 何开华, 曾中良, 陈琦丽, 王清波. 过渡金属掺杂 SnO_2 的电子结构与磁性[J]. 物理化学学报, 0, (): 0-0