

量子化学及计算化学

CpRu(PH₃)₂SH与HNCS的模型化反应机理

赵义, 董东栋, 毕思玮

山东理工大学化学工程学院, 山东 淄博 255049; 曲阜师范大学化学与化工学院, 山东 曲阜 273165

摘要:

应用密度泛函理论(DFT), 通过CpRu(PH₃)₂SH(Cp=环戊二烯基)与HNCS的模型化反应, 探讨了CpRu-(PPh₃)₂SH与RNCS(R=Ph, 1-naphthyl)反应生成CpRu(PPh₃)₂S₂CNHR的两种可能的反应机理. 一种可能的机理是, 一个PH₃配体先从反应物CpRu(PH₃)₂SH解离出来, 得到一个16e中间体, 然后经过一个氢转移反应, 得到产物; 另一种可能的机理是, 先经过一个氢转移反应, 然后一个PH₃配体再从金属中心解离出来, 得到产物. 通过分析两种机理的势能曲线发现, 反应的决速步骤为从硫原子到氮原子的氢迁移过程. 第一种反应机理中反应的最高活化能明显比第二种反应机理的最高活化能高. 因此, 我们预测反应倾向于先发生氢迁移, 然后配体PH₃再从金属中心上解离出来. 在该反应机理中, 尽管和产物相连的中间体稳定性稍高于产物, 由于焓效应致使最终产物仍然是实验中所得到的产物.

关键词: 密度泛函理论 PH₃解离 氢迁移 HNCS 反应机理

收稿日期 2009-11-02 修回日期 2009-12-31 网络版发布日期 2010-01-28

通讯作者: 毕思玮 Email: siweibi@126.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. 朱志昂; 黄小群; 陈荣梯. 铜(II)与四(间甲基)苯基卟啉(II)取代反应动力学[J]. 物理化学学报, 1993,9(05): 635-641
4. 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
5. 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
6. 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
7. 朱志昂, 延玺, 张智慧, 马刚, 林华宽, 陈荣梯. 钴(II)卟啉与咪唑类配体配位反应热力学、动力学[J]. 物理化学学报, 1996,12(04): 372-376
8. 石怀彬; 邵春林; 余增亮. 低能氮离子诱发丙酮与重水溶液的反应机理 [J]. 物理化学学报, 2001,17(11): 986-990
9. 陈迪钊; 梁逸曾; 徐承建. 动力学体系二维数据的秩分析及其应用[J]. 物理化学学报, 2002,18(10): 924-929
10. 黄明强; 郝立庆; 周留柱; 顾学军; 王振亚; 方黎; 张为俊. 乙苯光氧化产生二次有机气溶胶的化学成分及反应机理分析[J]. 物理化学学报, 2006,22(05): 596-601
11. 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
12. 王周成; 黄龙门; 唐毅; 倪永金; 林昌健. 电化学方法在钛表面制备Co-YSZ/HAp纳米复合涂层[J]. 物理化学学报, 2006,22(05): 590-595
13. 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
14. 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
15. 阮文娟; 朱志昂; 林华宽; 陈正华; 陈红卫; 杨秀檀; 邵迎; 陈荣梯. 锌、镉及汞卟啉生成反应动力学研究[J]. 物理化学学报, 1997,13(04): 335-343
16. 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
17. 刘够生; 宋兴福; 于建国; 钱旭红. 气相中H₂O₂与N₂O反应机理的探讨[J]. 物理化学学报, 2001,17(06): 491-

扩展功能

本文信息

PDF(2736KB)

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

▶ PH₃解离

▶ 氢迁移

▶ HNCS

▶ 反应机理

本文作者相关文章

▶ 赵义

▶ 董东栋

▶ 毕思玮

- 495
18. 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
 19. 刘幼成;蒋刚;朱正和.NX(X=F,Cl,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
 20. 艾洪奇;步宇翔.黄金规则用于 $N_3^- + N_3$ 体系电子转移的研究[J]. 物理化学学报, 2001,17(03): 210-215
 21. 王遵尧;肖鹤鸣;李金山. $F + Cl_2 \rightarrow ClF + Cl$ 和 $Cl'F + Cl \rightarrow Cl' + ClF$ 的反应机理[J]. 物理化学学报, 2001,17(02): 107-110
 22. 胡海泉;刘成卜.二氟硅杂环丙烯异构化反应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(04): 349-352
 23. 李小平;刘志宏;高世扬;胡满成;夏树屏.氯柱硼镁石在87 °C水中的溶解及相转化动力学[J]. 物理化学学报, 2003,19(02): 181-184
 24. 丁万见;方维海;刘若庄.基态丙酮酸单分子反应的机理[J]. 物理化学学报, 2004,20(08S): 911-916
 25. 徐四川;赵新生.在冰表面上硝酸氯和氯化氢反应的机理[J]. 物理化学学报, 1998,14(01): 5-7
 26. 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
 27. 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
 28. 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
 29. 阮文娟;朱志昂;黄小群;陈荣悌;江冬青.铁(III)卟啉催化 β -胡萝卜素分解动力学研究[J]. 物理化学学报, 1994,10(04): 312-318
 30. 应立明;韩德刚;杨惠星.异丁烷高温热解反应动力学和机理[J]. 物理化学学报, 1994,10(03): 223-229
 31. 袁丽霞;杨郭英;孙德升;王遵尧;池清清. $Br_2 + Cl_2 = 2BrCl$ 反应机理的理论和实验研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(10): 1191-1195
 32. 刘红艳;王遵尧;刘树深. $Cl_2 + 2HI = 2HCl + I_2$ 反应机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(09): 961-966
 33. 宋维平;傅孝愿;何绍仁.氯代酸气相热消除反应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1997,13(10): 908-915
 34. 林伟;章永凡;李奕;陈勇;李俊箴. $SnO_2(110)$ 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
 35. 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
 36. 钱英;王艳;冯文林;刘若庄.环己二烯与丙烯加成反应的正则速率常数[J]. 物理化学学报, 1997,13(12): 1084-1089
 37. 吕玲玲;王永成. $Au^+(^1S, ^3D)$ 与 $N_2O(^1\Sigma^+)$ 反应机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(03): 265-269
 38. 张敬来;王连宾;吴文鹏;曹泽星.线性簇合物 $SC_{2n}S^{2-}$ ($n = 1 \sim 12$)电子吸收光谱[J]. 物理化学学报, 2004,20(12): 1428-1433
 39. 耿志远;王永成;汪汉卿.锆烯 X_2Ge ($X = H, CH_3, F, Cl, Br$)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
 40. 徐灿;朱莉芳;高晨阳;曹娟.硅氧团簇 $(SiO_2)_nO_2H_4$ 的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(02): 152-155
 41. 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
 42. 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
 43. 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
 44. 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
 45. 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
 46. 方冉;耿志远;王永成;张兴辉;王冬梅;高立国;陈晓霞.锆烯 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
 47. 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
 48. 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
 49. 汪志祥;刘若庄;黄明宝.CH自由基与 O_2 反应得从头算研究[J]. 物理化学学报, 1997,13(05): 385-388

50. 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
51. 陈文凯; 曹梅娟; 刘书红; 许莹; 李奕; 李俊钺. 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
52. 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
53. 常杰; 滕波涛; 相宏伟; 李永旺; 孙予罕. 用UBI-QEP方法分析钴系Fischer-Tropsch合成催化反应机理[J]. 物理化学学报, 2005,21(11): 1223-1228
54. 赵新生. 大气臭氧层破坏中冰晶表面反应的机理[J]. 物理化学学报, 2004,20(08S): 936-938
55. 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
56. 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
57. 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
58. 张东东, 周立新. 含平面胺配体的反式二价钨配合物与DNA碱基的作用[J]. 物理化学学报, 2009,25(12): 2551-2557
59. 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
60. 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
61. 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
62. 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
63. 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
64. 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
65. 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
66. 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
67. 薛可轶; 高庆宇; 刘兵; 徐良芹. H_2O_2 - $Na_2S_2O_3$ 反应对pH和反应物起始浓度比的依赖性[J]. 物理化学学报, 2004,20(07): 772-775
68. 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
69. 钟起玲; 张小红; 粟晓琼; 章磊; 刘跃龙; 任斌; 田中群. 异黄樟油素在铂电极上电氧化及原位拉曼光谱[J]. 物理化学学报, 2004,20(01): 94-97
70. 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
71. 徐艺军; 李俊钺; 章非凡; 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
72. 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
73. 廖川平; 顾明元. 苯胺聚合反应中重铬酸盐的还原机理[J]. 物理化学学报, 2003,19(07): 580-583
74. 苏育志; 郭仕恒; 萧翼之; 肖敏; 杨绮琴. 2,2'-二氨基苯氧基二硫化物的电极过程动力学研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(05): 518-523
75. 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
76. 云虹; 张慧; 陈建华; 陈鸿博; 林昌健. CuO-ZnO-ZrO₂ 催化甲醇水蒸汽重整反应机理和中间态[J]. 物理化学学报, 2004,20(05): 524-528
77. 韩世同; 习海玲; 付贤智; 王绪绪; 丁正新; 林志聪; 苏文悦. 芥子气模拟剂2-氯乙基乙基硫醚的光催化降解[J]. 物理化学学报, 2004,20(03): 296-301
78. 翟志才; 柏云杉; 王遵尧; 王连生. $Br_2 + 2HI = 2HBr + I_2$ 应机理的密度泛函理论[J]. 物理化学学报, 2004,20(04): 400-404
79. 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
80. 田燕; 何天敬; 陈东明; 刘凡镇. $\cdot OH$ 自由基与 CH_3CN 反应机理及动力学[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 587-594

81. 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
82. 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
83. 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
84. 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
85. 许保恩;李晓艳;曾艳丽;孟令鹏;张萍;刘占荣. CH_3SH 与 CN^- 自由基的反应机理及电子密度拓扑分析[J]. 物理化学学报, 2008,24(07): 1245-1251
86. 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
87. 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
88. 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
89. 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
90. 王俊霞;于锋;刘静;刘世林;周晓国. 羟基负离子与苯分子的反应机理[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1399-1399
91. 徐志瑾,严继民. $\text{He}+\text{C}_{60}\leftrightarrow(\text{He}@\text{C}_{60})$ 的反应势垒研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(04): 346-350
92. 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
93. 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
94. 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
95. 张临阳;张家穆;W.Fuss. 光引发 $\text{BrC}_2\text{F}_4\text{Br}+\text{C}_2\text{F}_4$ 调聚反应的光强影响[J]. 物理化学学报, 1995,11(04): 308-314
96. 李庆水, 林玉琴, 廖远琰. 甲醇催化脱氢反应的研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(05): 442-446
97. 康庆华,钟顺和. 激光促进乙醇氧化偶联表面反应机理[J]. 物理化学学报, 1995,11(06): 498-503
98. 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
99. 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
100. 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
101. 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
102. 吴文娟;赖璐;郑康成;云逢存. 抗癌性吡啶啉类生物碱的定量构效关系[J]. 物理化学学报, 2005,21(01): 28-32
103. 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
104. 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
105. 张国栋.Ni-P化学镀反应速率及机理研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(05): 429-434
106. 李来才;田安民. $\text{CH}_3(^2A')$ 自由基与臭氧反应机理的量子化学研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(07): 626-629
107. 王进;陈鸿博;云虹;林敬东;易军;张鸿斌;廖代伟. 合成甲醇的催化剂Rh-ZnO/MWNTs的研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(01): 65-69
108. 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
109. 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
110. 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
111. 徐四川;赵新生. 硝酸氯在冰表面上反应的研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(11): 988-994
112. 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

113. 李中华;王锐;陈振宇;韦永德;周百斌.用密度泛函方法研究 α -[XMo₁₂O₄₀]ⁿ⁻杂多阴离子的振动光谱[J]. 物理化学学报, 2004,20(11): 1329-1334
114. 徐艺军;李俊箴;章永凡.O₂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
115. 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
116. 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
117. 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
118. 刘俊伶;尚静;王佩怡;李来才;田安民.CH₃CHF自由基与HNCO反应机理的理论[J]. 物理化学学报, 2006,22(08): 921-925
119. 田欣欣;张富强;冯瑞娟;武海顺.B₂₈N₂₈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
120. 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
121. 庞先勇;冯文林;王艳;张绍文.CH₃与NO在单、三态势能面上的反应机理[J]. 物理化学学报, 1996,12(05): 391-395
122. 孙科举 李微雪 冯兆池 李灿.Fe-AlPO₄-5分子筛的共振拉曼光谱[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 606-610
123. 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
124. 刘海洋 冷科 胡军 应晓 徐志广 张启光.A₃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
125. 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UO₂L_{2-n*}a_n (L=F⁻, CO₃²⁻, NO₃⁻; 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
126. 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
127. 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
128. 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
129. 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
130. 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
131. 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
132. 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
133. 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
134. 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
135. 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
136. 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
137. 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
138. 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
139. 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
140. 陈新 李瑛.二氯乙烯锗烯与甲硫醛环加成的反应机理[J]. 物理化学学报, 2008,24(12): 2229-2235
141. 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
142. 高立国;宋小利;陈晓霞;王永成.气相中Y⁺活化CS₂中的C—S键[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 2083-2088

143. 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
144. 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
145. 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
146. 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
147. 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
148. 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
149. 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
150. 陈新;李瑛;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
151. 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
152. 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
153. 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
154. 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
155. 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
156. 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
157. 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
158. 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
159. 王罗新;刘勇;虞新林;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
160. 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
161. 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
162. 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
163. 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
164. 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
165. 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
166. 胡启山;刘俊伶;李来才;田安民.钴原子催化活化乙烷的反应机理[J]. 物理化学学报, 2007,23(06): 916-920
167. 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
168. 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
169. 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
170. 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
171. 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
172. 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
173. 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

174. 侯若冰;李伟伟;沈星灿.8-羟基鸟嘌呤自由基的开环反应机理[J]. 物理化学学报, 2008,24(02): 269-274
175. 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
176. 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
177. 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
178. 李思殿;郭巧凌;苗常青;任光明.含平面配位碳的过渡金属烃配合物M_nH_nC密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(05): 743-745
179. 黄可龙;刘人生;杨幼平;刘素琴;王丽平.形貌可控的四氧化三钴溶剂热合成及反应机理[J]. 物理化学学报, 2007,23(05): 655-658
180. 吴芄;何绍仁.乙烯亚胺与亚胺[2+2]环加成反应的理论研究[J]. 物理化学学报, 2000,16(03): 243-247
181. 席靖宇;王志飞;王卫平;吕功煊.Cu-Ni/Zn催化剂甲醇裂解机理原位XPS研究 [J]. 物理化学学报, 2002,18(01): 82-86
182. 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
183. 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
184. 刘赵穹;马骏;张昭良;杨锡尧.Sn_{0.5}Ti_{0.5}O₂催化剂上SO₂、NO和CO反应的机理[J]. 物理化学学报, 2002,18(03): 193-196
185. 刘治建;蔡遵生;宁宇;李艳妮;王贵昌;赵学庄.BrO₃⁻-SO₃²⁻-H⁺-KMnO₄系pH振荡反应[J]. 物理化学学报, 2001,17(08): 676-681
186. 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
187. 王岩;方德彩;傅孝愿.硫代双烯酮二聚反应机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 1999,15(01): 35-39
188. 冯海霞;朱志昂;王传忠;阮文娟;李瑛;陈荣梯.钴(II)酞菁与巯基乙醇轴向配位反应的动力学[J]. 物理化学学报, 1999,15(02): 167-172
189. 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
190. 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
191. 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
192. 陈铜;李文钊;于春英.氧化镍与载体相互作用对乙烷氧化脱氢的影响[J]. 物理化学学报, 1999,15(07): 613-618
193. 陈波珍;黄明宝;苏红梅;孔繁敖.CH₂+O₂反应的反应机理[J]. 物理化学学报, 2000,16(10): 869-872
194. 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
195. 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
196. 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
197. 蔡小萍;方德彩;傅孝愿.ClONO₂与O(³P)的反应机理[J]. 物理化学学报, 2000,16(08): 689-693
198. 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
199. 赵振波;孙闻东;杨向光;叶兴凯;吴越.异丁烷-丁烷烷基化杂多酸-醋酸催化机理[J]. 物理化学学报, 2000,16(07): 613-620
200. 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
201. 邝平先;陈波珍;黄明宝.C(³P)与H₂S反应的反应机理[J]. 物理化学学报, 2000,16(05): 389-392
202. 孟令鹏;郑世钧;蔡新华.氧原子与二硫化碳反应的机理[J]. 物理化学学报, 1999,15(11): 990-996
203. 陈波珍;黄明宝;颜达予.(CH₂)₂N和(CH₃)₂NH⁺的密度泛函理论计算[J]. 物理化学学报, 1999,15(06): 495-499
204. 周志刚;戴乾圆.烯炔亲电加成反应机理的理论探讨[J]. 物理化学学报, 1999,15(06): 500-505
205. 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
206. 石土金;李宗和;刘若庄.HNCO+OH->H₂O+NCO的反应机理[J]. 物理化学学报, 1999,15(03): 247-252

207. 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
208. 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
209. 李权;徐成刚;王红艳;朱正和.PuH₂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
210. 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
211. 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
212. 张远;曹爱年;孙岳明;刘举正;顾璠.NO双分子和二聚体与Cu₂作用的理论计算[J]. 物理化学学报, 2003,19(03): 193-197
213. 胡海泉;刘成卜.双自由基CF₂与O₃的反应机理[J]. 物理化学学报, 1998,14(12): 1104-1107
214. 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
215. 杨丽娟;孟令鹏;曾艳丽;郑世钧.CH₂NH与O(³P)反应的量子化学及电子密度拓扑研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(03): 311-316
216. 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
217. 盛颖宏;方德彩;傅孝愿.亚甲基烯酮与5-亚甲基-1, 3-二噁烷-4, 6-二酮反应机理的研究[J]. 物理化学学报, 1996,12(06): 496-501
218. 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
219. 蒋雄.钴(II)离子阴极还原的研究[J]. 物理化学学报, 1993,9(01): 129-133
220. 戴建波;白令君;张一宝;臧雅茹;江冬青;顾卓英;赵学庄.肾上腺素氧化反应的研究——氧化反应动力学和机理以及自由及中间体[J]. 物理化学学报, 1991,7(03): 260-269
221. 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
222. 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
223. 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
224. 杨松青;蒋汉瀛.黄铁矿的电化学研究[J]. 物理化学学报, 1991,7(06): 735-739
225. 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
226. 刘乐燕;耿志远;赵存元;王永成;李朝晖.气相中烯丙基负离子与N₂O反应机理[J]. 物理化学学报, 2007,23(02): 217-222
227. 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
228. 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
229. 赵英国;周晓国;于锋;戴静华;刘世林.氧负离子自由基与苯的反应机理研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(09): 1095-1100
230. 魏青;许保恩;孙翠红;李晓艳;孟令鹏;任蕾.HNCS与Cl原子的反应机理及电子密度拓扑分析[J]. 物理化学学报, 2009,25(08): 1623-1628
231. 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
232. 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
233. 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
234. 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
235. 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
236. 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
237. 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

238. 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
239. 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
240. 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
241. 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
242. 蔡皖飞, 汪晓慧, 李来才, 田安民. *N*-(邻氯苯基)苯甲酰胺在CuX(X=I, Br)催化下的分子内*O*-芳基化反应机理[J]. 物理化学学报, 2009,25(10): 2101-2106
243. 詹卫伸, 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
244. 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
245. 赵新新, 陶向明, 宓一鸣, 陈成, 谭明秋. Ni(110)-*p*2mg(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
246. 王艳坤, 张建民, 兰梦. 温度对ZnO薄膜电沉积的影响[J]. 物理化学学报, 2009,25(10): 1998-2004
247. 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
248. 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
249. 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
250. 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
251. 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
252. 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
253. 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
254. 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
255. 何书珩, 蒲敏, 李军男, 何静, EVANS David G. 酸性橙插层锌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
256. 赵亚华. 含有一个非平面杂环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
257. 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
258. 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
259. 王欢, 赵淑凤, 兰阳春, 刘晓, 陆嘉星. 肉桂腈电化学还原反应机理[J]. 物理化学学报, 2010,26(02): 277-282
260. 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
261. 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
262. 雷永林, 霍冀川. 烷基取代对罗丹明的电子结构与光谱的影响[J]. 物理化学学报, 2010,26(02): 447-452
263. 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
264. 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
265. 王会萍, 白福全, 郑清川, 赵增霞, 赵晓杰, 张红星. 吡啶咪唑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
266. 姜富灵, 翟高红, 丁黎, 岳可芬, 刘妮, 史启祯, 文振翼. NO₂, 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
267. 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

268. 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, 2010, 26(03): 763-768

269. 邓春梅, 牛英利, 彭谦, 帅志刚. 14族杂环戊二烯分子(硅、锗、锡)的电子结构与光谱性质[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0

270. 蔡雪, 齐冬冬, 张跃兴, 边永忠, 姜建壮. 二萘嵌苯二酰亚胺衍生物的半导体性质[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
