

研究论文

14族杂环戊二烯分子(硅、锗、锡)的电子结构与光谱性质

邓春梅, 牛英利, 彭谦, 帅志刚

中国科学院化学研究所, 北京分子科学国家实验室, 有机固体院重点实验室, 北京 100190; 清华大学化学系, 北京 100084

摘要:

14族杂原子取代的杂环戊二烯分子具有独特的光谱性质, 成为发光材料的明星分子. 为了更深层次地理解硅、锗、锡杂环戊二烯分子的光谱性质, 本文从理论上计算了它们的电子结构及其吸收和发射光谱. 分别采用密度泛函理论(DFT)和含时密度泛函理论(TD-DFT), 优化了硅、锗、锡杂环戊二烯分子基态和第一激发态的平衡构型, 计算了电子结构和振动性质. 在此基础上, 运用振动关联函数公式计算了吸收光谱和发射光谱. 得到的吸收光谱和发射光谱, 特别是发射光谱的半峰宽与现有的实验值吻合很好. 通过分析结构和光谱性质的关系, 指出光谱的性质主要取决于苯环转动对应的低频振动模式和中心环C—C键的伸缩振动对应的高频振动模式.

关键词: 密度泛函理论 硅杂环戊二烯 振动关联函数 光吸收 光发射

收稿日期 2009-12-16 修回日期 2010-01-25 网络版发布日期 2010-02-25

通讯作者: 彭谦, 帅志刚 Email: qpeng@iccas.ac.cn; zgshuai@tsinghua.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. (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 ρ 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; 李俊箴. 苯在 $\text{Au}(100)$ 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
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):

扩展功能

本文信息

PDF(1305KB)

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

▶ 硅杂环戊二烯

▶ 振动关联函数

▶ 光吸收

▶ 光发射

本文作者相关文章

▶ 邓春梅

▶ 牛英利

▶ 彭谦

▶ 帅志刚

19. 吕玲玲;王永成. $\text{Au}^+(^1S, ^3D)$ 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
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
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
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;吴白玉;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
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
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
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
41. 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
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. 卟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
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. 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
52. 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
53. 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
54. 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
55. 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
56. 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
57. 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
58. 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
59. 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
60. 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
61. 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
62. 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
63. 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
64. 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
65. 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
66. 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
67. 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
68. 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
69. 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
70. 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
71. 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
72. 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
73. 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
74. 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
75. 徐艺军;李俊箴;章永凡. 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
76. 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
77. 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
78. 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
79. 田欣欣;张富强;冯瑞娟;武海顺. $\text{B}_{28}\text{N}_{28}$ 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
80. 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

81. 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
82. 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
83. 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 $^1\text{H-NMR}$ 的影响[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 694-700
84. 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 $\text{UO}_2\text{L}^{2-n^*a}_n$ ($\text{L}=\text{F}^-$, 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
85. 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
86. 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
87. 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
88. 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
89. 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
90. 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
91. 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
92. 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
93. 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
94. 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
95. 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
96. 张富春 张志勇 张威虎 阎军峰 江妮. $\text{Pb}_x\text{Sr}_{1-x}\text{TiO}_3$ 的电子结构[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 61-66
97. 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
98. 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
99. 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
100. 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
101. 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
102. 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
103. 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
104. 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
105. 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
106. 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
107. 陈新 李瑛 蒋青. 几种 $(\text{C}^{\wedge}\text{N})\text{Pt}^{\text{II}}\text{Q}$ 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
108. 李宗宝 姚凯伦 刘祖黎. 有机-无机杂化化合物 $[\text{Cu}(\mu\text{-cbdca})(\text{H}_2\text{O})]_n$ 的电子结构及铁磁性[J]. 物理化学学报, 2008,24(09): 1681-1684
109. 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
110. 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
111. 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

112. 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
113. 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
114. 梁云霄; 水淼; 李榕生. 硼/氮掺杂富勒烯 C_{20} 的结构和稳定性[J]. 物理化学学报, 2007,23(10): 1647-1651
115. 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
116. 王罗新; 刘勇; 虞新林; 李松年; 王晓工. H^+ 、 NH_4^+ 对HMX的N— NO_2 键解离能的影响[J]. 物理化学学报, 2007,23(10): 1560-1564
117. 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
118. 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
119. 潘国祥; 倪哲明; 李小年. 类水滑石主体层板与客体 CO_3^{2-} 、 H_2O 间的超分子作用[J]. 物理化学学报, 2007,23(08): 1195-1200
120. 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
121. 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
122. 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
123. 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
124. 李磊; 桑革; 张鹏程; 蒋刚. $\sigma-Al_2O_3$ 阻氢微观机制研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(12): 1912-1916
125. 徐伯华; 李来才; 王欣; 田安民. N_5H_5 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
126. 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
127. 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
128. 贝逸翎; 主沉浮; 刘庆阳; 戚桂斌. 卤代硅烷(R_3SiX)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
129. 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
130. 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
131. 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
132. 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
133. 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
134. 蒲敏; 王海霞; 冯雪; 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
135. 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
136. 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
137. 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
138. 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
139. 王利江; 张杰杰. $B_2C_n^+$ ($n=1\sim 9$)团簇的结构及其稳定性[J]. 物理化学学报, 2006,22(06): 726-731
140. 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
141. 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
142. 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
143. 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
144. 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
145. 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
146. 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
147. 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
148. 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
149. 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
150. 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
151. 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
152. 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
153. 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
154. 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
155. 杨振;徐志军;杨晓宁.基于密度泛函理论研究二元排斥Yukawa流体的表面结构性性质[J]. 物理化学学报, 2006,22(12): 1460-1465
156. 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
157. 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
158. 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
159. 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
160. 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
161. 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
162. 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
163. 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
164. 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
165. 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
166. 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
167. 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
168. 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
169. 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
170. 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
171. 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
172. 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

173. 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
174. 赵新新, 陶向明, 宓一鸣, 陈成, 谭明秋. Ni(110)- $p2mg(2\times 1)$ -CO表面的几何结构和电子态[J]. 物理化学学报, 2009,25(11): 2305-2311
175. 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
176. 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
177. 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
178. 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
179. 陈锦灿, 陈兰美, 廖思燕, 郑康成. 抗癌性钌配合物[HL][*trans*-Ru^{II}Cl₄L₂](L=2-NH₂-5-Me-STz)的水解机理[J]. 物理化学学报, 2009,25(12): 2543-2550
180. 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
181. 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
182. 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
183. 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
184. 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
185. 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
186. 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
187. 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
188. 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
189. 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
190. 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
191. 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
192. 赵义, 董东栋, 毕思玮. CpRu(PH₃)₂SH与HNCS的模型化反应机理[J]. 物理化学学报, 2010,26(03): 745-750
193. 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
194. 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
195. 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
196. 喻力, 郑广, 何开华, 曾中良, 陈琦丽, 王清波. 过渡金属掺杂SnO₂的电子结构与磁性[J]. 物理化学学报, 2010,26(03): 763-768
197. 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