

吡咯-HCN体系在气相及溶液中相互作用的理论研究

史福强;姜小明;徐志成;安静仪;俞稼镛

中国科学院理化技术研究所,北京 100101

摘要:

用量子化学B3LYP方法在6-311G(d, p)水平上优化了吡咯-HCN氢键复合物,通过振动频率分析确定了两个吡咯-HCN体系稳定构型.为了得到更加精确的氢键作用能,采用相关一致基组aug-cc-pVDZ以及Boys和Bernardi的CP(counterpoise)校正方法消除基组重叠误差后得到C-H...N和N-H...N型复合物的氢键相互作用能.为了确定B3LYP方法计算的相互作用能的可靠性,在MP2/aug-cc-pVDZ水平计算了复合物的氢键相互作用能,结果分别为-25.10和-19.30 kJ·mol⁻¹.采用自然键轨道(NBO)分析考察了吡咯与HCN分子间轨道相互作用.以自洽场理论(SCRF)中的Onsager模型研究了不同极性溶剂对吡咯-氰化氢体系N-H...N型氢键几何构型,频率位移,电荷分布以及相对能量的影响.研究发现,当溶液的介电常数在1.5~30.0范围时,溶液作用十分显著,而当介电常数超过30.0以后,溶液作用已经达到了极限.

关键词: 密度泛函理论 基组重叠误差 介电常数

收稿日期 2004-04-16 修回日期 2004-06-17 网络版发布日期 2004-11-15

通讯作者: 史福强 Email: shifq1976@sohu.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. 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Ru(azpy)₂Cl₂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=H,O,N,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. 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
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. 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
12. 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
13. 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
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. 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
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
19. 吕玲玲;王永成. Au⁺(¹S, ³D)与N₂O(¹Σ⁺)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SC_{2n}S²⁻ (n=1~12)电子吸收光谱[J]. 物理化学学报, 2004,20(12): 1428-1433

扩展功能

本文信息

PDF(788KB)

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

▶ 基组重叠误差

▶ 介电常数

本文作者相关文章

▶ 史福强

▶ 姜小明

▶ 徐志成

▶ 安静仪

▶ 俞稼镛

21. 耿志远;王永成;汪汉卿. 锗烯 $X_2Ge(X=H, CH_3, F, Cl, Br)$ 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
22. 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
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. $AlmN_2^{m-}$ ($m=1\sim 8$)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. 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
38. 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
39. 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
40. 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
41. 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
42. 徐艺军;李俊钺;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
43. 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
44. 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
45. 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
46. 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
47. 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
48. 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
49. 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
50. 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
51. 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
52. 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
53. 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
54. 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
55. 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

56. 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
57. 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
58. 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
59. 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
60. 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
61. 吴文娟; 赖榕; 郑康成; 云逢存. 抗癌性吡啶啉生物衍生物的定量构效关系[J]. 物理化学学报, 2005,21(01): 28-32
62. 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
63. 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
64. 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
65. 吕海港; 黎乐民. 表观价态异常分子 EuS_2 和 Eu_2S 的泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(05): 413-418
66. 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
67. 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
68. 李中华; 王锐; 陈振宁; 韦永德; 周百斌. 用密度泛函方法研究 $\alpha\text{-[XMo}_{12}\text{O}_{40}]^n$ 杂多阴离子的振动光谱[J]. 物理化学学报, 2004,20(11): 1329-1334
69. 徐艺军; 李俊钱; 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
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. $\text{B}_{28}\text{N}_{28}$ 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
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- 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
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_3 型Corrole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
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 $\text{UO}_2\text{L}^{2-n^*a}_n$ ($\text{L}=\text{F}^-, \text{CO}_3^{2-}, \text{NO}_3^-; n=0-6, a=1, 2$)的结构和振动光谱[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 655-660
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_2 (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_n ($n=1-8$)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): 0-0
85. 刘洁翔; 魏贤; 张晓光; 王桂香; 韩恩山; 王建国. NO_x 分子在 $[\text{Ag}]$ -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; 张威武; 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
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)- $p(2\times 2)$ -O表面吸附结构的总能计算[J]. 物理化学学报, 2009,25(03): 567-574
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;潘春祥;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
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.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
95. 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
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(CⁿN)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
99. 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
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C₂₀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⁺、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
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_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
110. 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
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_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
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. α -Al₂O₃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.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
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(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
120. 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
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[J]. 物理化学学报, 2007,23(06): 846-850
123. 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
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_nH_nC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
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