

超临界CO₂-溶质二元系的密度及溶质的偏摩尔体积

钟明宏;柯杰;韩布兴;闫海科

中国科学院化学研究所, 北京 100080

摘要:

关键词: 密度 偏摩尔体积 CO₂ 乙醇 丙酮 正庚烷

收稿日期 1996-04-08 修回日期 1996-06-03 网络版发布日期 1996-09-15

通讯作者: 韩布兴 Email:

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. 刘奉岭. C₆₀分子间相互作用的Morse势函数及应用[J]. 物理化学学报, 2002,18(11): 967-972
7. 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
8. 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
9. 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
10. 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
11. 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
12. 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
13. 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
14. 刘幼成;蒋刚;朱正和. NX(X=F,Cl,Br)分子结构与极化函数f轨道的作用 [J]. 物理化学学报, 2002,18(02): 117-121
15. 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
16. 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
17. 曾锡瑞;张勇;游效曾. 过氧草酸酯结构和取代基对其化学发光的影响[J]. 物理化学学报, 2001,17(04): 361-363
18. 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
19. 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
20. 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
21. 江云宝;王秀娟. 核电胶束中分子内扭转电荷转移的醇效应[J]. 物理化学学报, 1994,10(09): 856-859
22. 李宝宗;徐文国;裘式纶;庞文琴;徐如人. 高硅沸石骨架结构及其稳定性的模拟计算(I)[J]. 物理化学学报, 1998,14(01): 45-50

扩展功能

本文信息

PDF(1343KB)

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

▶ 偏摩尔体积

▶ CO₂

▶ 乙醇

▶ 丙酮

▶ 正庚烷

本文作者相关文章

▶ 钟明宏

▶ 柯杰

▶ 韩布兴

▶ 闫海科

23. 佟静;张庆国;洪梅;杨家振. 铝基离子液体BMIAICl₄的热力学性质[J]. 物理化学学报, 2006,22(01): 71-75
24. 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
25. 王泽新;张文霞;刁兆玉. 广义簇合物在非均匀几率密度下的生长[J]. 物理化学学报, 1998,14(01): 39-44
26. 崔万秋;刘舒曼;刘维华.Sb₂Te₃及其固溶体的电子结构[J]. 物理化学学报, 1997,13(06): 510-514
27. 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
28. 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
29. 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
30. 耿志远;王永成;汪汉卿. 锆烯X₂Ge(X=H, CH₃, 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
31. 徐灿;朱莉芳;高晨阳;曹娟. 硅氧团簇(SiO₂)_nO₂H₄的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(02): 152-155
32. 刘文彬;李以圭;陆九芳;李春喜. 微扰理论状态方程预测高温高压电解质水溶液的密度[J]. 物理化学学报, 1997,13(08): 736-740
33. 黄飙;张家兴;李锐;申自勇;侯士敏;赵兴钰;薛增泉;吴全德. Al-C₆₀-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
34. 马文瑾;武海顺. Al_mN₂⁻(m=1~8)团簇的结构与稳定性[J]. 物理化学学报, 2006,22(02): 178-182
35. 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
36. 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CS₂反应的计算研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(10): 1102-1107
37. 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
38. 方冉;耿志远;王永成;张兴辉;王冬梅;高立国;陈晓霞. 锆烯X₂Ge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
39. 张材荣;陈宏善;陈玉红;冯旺军;李维学;许广济;寇生中. Al₈P₈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
40. 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Zn²⁺在水锰矿表面的吸附和沉淀[J]. 物理化学学报, 2005,21(12): 1378-1383
41. 朱瑜;蒋刚;于桂凤;朱正和;王和义;傅依备. N₂在Pd金属表面的吸附行为[J]. 物理化学学报, 2005,21(12): 1343-1346
42. 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
43. 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
44. 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
45. 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基核加成的理论探讨[J]. 物理化学学报, 2004,20(09): 1129-1133
46. 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
47. 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
48. 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
49. 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
50. 胡建明;李俊箴;李奕;章永凡;林伟. CN在Pt(100)表面吸附的密度泛函研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(01): 27-32
51. 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
52. 陆冬云;温浩;刘会洲;许志宏. 球形嵌段共聚物胶束的温度效应[J]. 物理化学学报, 2004,20(01): 38-42
53. 蔡卫权;李会泉;张懿. 低密度薄水铝石晶体的水热生长过程[J]. 物理化学学报, 2004,20(07): 717-721
54. 胡秀荣;吕光烈;顾建明;陈林深. 天然蒙脱石的结构与带电性[J]. 物理化学学报, 2003,19(12): 1171-1175
55. 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
56. 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
57. 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
58. 徐艺军;李俊箴;章永凡;陈文凯. O₂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
59. 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
60. 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
61. 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
62. 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
63. 马文瑾;武海顺. Al_mN_2 ($m=1\sim 8$)团簇结构与稳定性的DFT研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(03): 290-295
64. 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
65. 赵影;曾艳丽;孙政;郑世钧;孟令鹏. H_2CO 与双卤分子间卤键的电子密度分析[J]. 物理化学学报, 2008,24(03): 502-506
66. 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
67. 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
68. 梁晓琴;蒲雪梅;田安民.均三嗪含氮取代基衍生物的结构和性质[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 639-645
69. 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
70. 温青;刘智敏;陈野;李凯峰;朱宁正.空气阴极生物燃料电池电化学性能[J]. 物理化学学报, 2008,24(06): 1063-1067
71. 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
72. 许保恩;李晓艳;曾艳丽;孟令鹏;张萍;刘占荣. CH_3SH 与 $CN\cdot$ 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
73. 吕瑾;许小红;武海顺. $(CoCr)_n$ ($n=1-5$)合金团簇的结构和磁性[J]. 物理化学学报, 2008,24(07): 1252-1256
74. 毛荣荣;吕洋;周立川;李钦宁;李慎敏.分子动力学模拟纳米尺寸限制体系下氙溶液中 I_2 的振动能量弛豫[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1451-1458
75. 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
76. 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
77. 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
78. 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
79. 肖立志;杜有如;叶朝辉.岩石的核磁共振自旋密度微成像[J]. 物理化学学报, 1995,11(03): 196-198
80. 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
81. 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
82. 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
83. 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
84. 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
85. 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
86. 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
87. 吴文娟;赖璐;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
88. 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
89. 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
90. 马文瑾;武海顺. Al_mN ($m=2\sim 9$)团簇结构与稳定性的DFT研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(10): 927-932
91. 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
92. 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
93. 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
94. 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

95. 刘跃;刘佳雯;杨小震.新型镍催化剂催化乙烯聚合的阳离子机理[J].物理化学学报,2002,18(12):1068-1070
96. 何香红;汤正谔;程兆年.液态RbCl的态密度[J].物理化学学报,2004,20(05):494-497
97. 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
98. 武海顺;张竹霞.内含式化合物X@B₁₂P₁₂的结构与稳定性研究[J].物理化学学报,2005,21(05):479-484
99. 张军;王献钊;夏树屏;高世扬.RbNO₃-C₂H₅OH-H₂O三元体系的液-固相平衡及其性质[J].物理化学学报,2005,21(09):1046-1049
100. 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
101. 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
102. 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
103. 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
104. 李鹏;安学勤;沈伟国.AOT/H₂O/油微乳液体系的浊度、密度和微观结构[J].物理化学学报,2001,17(02):144-149
105. 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
106. 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
107. 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
108. 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
109. 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
110. 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
111. 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
112. 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
113. 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
114. 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
115. 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
116. 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
117. 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
118. 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
119. 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
120. 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
121. 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
122. 刘以良 杨缤维 蒋刚.Ni(111)表面上N原子对C原子电子结构的影响[J].物理化学学报,2009,25(03):435-440
123. 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
124. 张建坡 周欣 白福全 张红星.一类[Os^(II)(CO)₃(tfa)(L)](L=O[^]O, O[^]N, N[^]N)配合物的结构和光谱特征[J].物理化学学报,2008,24(12):2243-2248
125. 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
126. 李晓艳;曾艳丽;孟令鹏;郑世钧.HCHO+X(X=F、Cl、Br)的反应机理[J].物理化学学报,2008,24(11):2053-2058
127. 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
128. 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
129. 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

130. 倪杰;黎安勇;闫秀花.HNO₃与(HF)_{1≤n≤3}分子间的蓝移与红移氢键[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 2000-2006
131. 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
132. 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
133. 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
134. 干琴芳;倪碧莲;李奕;丁开宇;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
135. 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
136. 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
137. 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
138. 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
139. 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
140. 王海燕;曾艳丽;郑世钧;孟令鹏.吡咯与一系列小分子之间的双氢键[J]. 物理化学学报, 2007,23(07): 1131-1135
141. 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
142. 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
143. 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
144. 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
145. 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
146. 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
147. 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
148. 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
149. 阴育新;靳正国;侯峰.甘油-DMSO-H₂O中阳极氧化TiO₂纳米管阵列的生长与性能[J]. 物理化学学报, 2007,23(11): 1797-1802
150. 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
151. 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
152. 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
153. 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
154. 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
155. 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
156. 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
157. 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
158. 赵新新;宓一鸣.Cu(001)表面CO吸附单层结构和电子态的第一性原理研究[J]. 物理化学学报, 2008,24(01): 127-132
159. 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
160. 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
161. 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
162. 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
163. 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

164. 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
165. 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
166. 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
167. 高新秀;陈飞武.两种约化密度矩阵重构方法的理论分析[J]. 物理化学学报, 2007,23(04): 543-548
168. 蒲敏;王海霞;冯霄;吴东;孙子罕.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
169. 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
170. 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
171. 刘建军;封继康;付伟;任爱民;刘桂霞. $^1CH_2 + N_2O$ 反应的势能面[J]. 物理化学学报, 2001,17(07): 586-593
172. 刘奉岭.不饱和类卡宾 $H_2C=CLiF$ 的密度泛函研究 [J]. 物理化学学报, 2002,18(03): 228-231
173. 孙祉伟;乔润龙.重力对异向聚集过程影响的探讨[J]. 物理化学学报, 2000,16(03): 193-195
174. 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
175. 郑康成;匡代彬;沈勇;王菊平.钉联吡啶单配体双取代基效应 [J]. 物理化学学报, 2001,17(01): 43-47
176. 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
177. 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
178. 岑晓东;王文娟;赵新生;汪玄;沈悌;谭涛超;毕群;朱圣庚.高密度噬菌体抗体芯片对细胞表面蛋白的识别[J]. 物理化学学报, 2006,22(07): 777-779
179. 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
180. 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
181. 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
182. 默丽欣;曾艳丽;郑世钧;孟令鹏. BH_2^+ 与 H_2O 反应机理的量子拓扑研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(06): 706-711
183. 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
184. 蔡小萍;方德彩;傅孝愿. $ClONO_2$ 与 $O(^3P)$ 的反应机理[J]. 物理化学学报, 2000,16(08): 689-693
185. 郑康成;匡代彬;王菊平;沈勇. $M(bpy)_3^{2+}$ ($M=Fe,Ru,Os$)电子结构与相关性质[J]. 物理化学学报, 2000,16(07): 608-612
186. 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
187. 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
188. 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
189. 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
190. 朱梓华;朱涛;王健;刘忠范.金纳米粒子组装体系粒子密度与SERS强度的关系[J]. 物理化学学报, 2000,16(02): 138-144
191. 颜振宁;成庆堂;王键吉;刘大壮. α -氨基酸在丁酸钠水溶液中的体积性质(308.15K)[J]. 物理化学学报, 1999,15(07): 662-667
192. 刘红斌;任延;王宇新;王世昌;安英丽;左渠.动态凝胶网络中的溶质扩散[J]. 物理化学学报, 1999,15(03): 210-215
193. 石磊;张小岗;张喜丰;杨冠英;韩布兴;闫海科.混合超临界流体的密度及分子间相互作用[J]. 物理化学学报, 2000,16(01): 31-35
194. 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
195. 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
196. 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
197. 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
198. 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
199. 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
200. 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

201. 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
202. 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
203. 张昭;张鉴清;李劲风;王建明;曹楚南.因次分析法在电化学噪声分析中的应用[J]. 物理化学学报, 2001,17(07): 651-654
204. 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
205. 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
206. 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
207. 王云海;刘永东;罗云敬;张伟;钟儒刚.过氧化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
208. 朱宏耀;江元生.简单晶格的簇—Bethe格模型[J]. 物理化学学报, 1993,9(04): 473-477
209. 李丽;吴锋;陈实;陈人杰. LaNi_{5-x}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
210. 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
211. 鲁化一;郭春泰;赵连山;唐定骧;汪玢.NaCl-NaF-RE₂O₃体系的表面张力和密度[J]. 物理化学学报, 1992,8(05): 694-696
212. 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
213. 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
214. 赵影;曾艳丽;张雪英;郑世钧;孟令鹏.乙烯、乙炔与双卤分子间*n*型卤键的电子密度拓扑研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(12): 1526-1531
215. 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
216. 默丽欣;曾艳丽;张雪英;郑世钧;孟令鹏.BH₄中性分子和离子结构的量子拓扑研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(01): 120-123
217. 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
218. 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
219. 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
220. 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, 0,(): 0-0
221. 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, 0,(): 0-0
222. 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
223. 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, 0,(): 0-0
224. 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
225. 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
226. 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
227. 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