

包含平面四配位和五配位碳原子的特殊硼碳化合物

梁锦霞, 贾文红, 张聪杰, 曹泽星

陕西师范大学化学与材料科学学院, 陕西省大分子科学重点实验室, 西安 710062|厦门大学化学系, 固体表面物理化学国家重点实验室, 福建 厦门 361005

摘要:

采用密度泛函理论(DFT), 在B3LYP/6-311+G**水平上, 研究了三类包含平面四配位碳原子(ptC)和平面五配位碳原子(ppC)的硼碳化合物. 这三类新型化合物是由C₃B₂H₄(包含ptC)、CB₄H₂(包含ptC)和CB₅H₂(包含ppC)三种稳定结构和—CHCH—单元连接起来而得到的. 在理论上探讨了这些新型的硼碳化合物的成键特征, 光谱性质以及芳香性. 研究表明: 包含ptC和ppC原子的能量最低的结构, 在不受对称面限制的条件下, 具有C_{2v}对称性的顺式立体构型比具有反式平面构型的化合物稳定. 计算的核独立化学位移(NICS)显示, 这些新型化合物的三元环中心有强的芳香性. 计算最稳定硼碳化合物的ptC和ppC原子的Wiberg键指数(WBIs)表明ptC和ppC的成键遵循八隅规则.

关键词: 密度泛函理论 平面四配位碳 平面五配位碳 芳香性

收稿日期 2009-04-15 修回日期 2009-05-20 网络版发布日期 2009-07-14

通讯作者: 张聪杰 Email: zcjwh@snnu.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):

扩展功能

本文信息

PDF(1808KB)

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

▶ 平面四配位碳

▶ 平面五配位碳

▶ 芳香性

本文作者相关文章

▶ 梁锦霞

▶ 贾文红

▶ 张聪杰

▶ 曹泽星

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. 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 $\text{Sr}_{2-x}\text{La}_x\text{CrReO}_6$ 的电子结构和磁性[J]. 物理化学学报, 2008,24(03): 448-452
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. $\text{C}_6\text{H}_5-\text{H}\cdots\text{X}$ 分子间氢键的理论计算[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 653-658
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. 李志伟;赵存元;陈六平. As_5^- 、 $[\text{As}_5\text{M}]^-$ 、 $[\text{As}_5\text{MAS}_5]^{2-}$ ($\text{M}=\text{Ti}, \text{Zr}, \text{Hf}$)的结构和芳香性[J]. 物理化学学报, 2008,24(05): 755-759

50. 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
51. 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
52. 马文瑾;张献明;许小红;王艳宾;武海顺.C_nAl₂ (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
53. 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
54. 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-C₆₁丁酸甲酯的密度泛函研究[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1353-1358
55. 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
56. 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
57. 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
58. 洪功义;黎乐民;徐光宪;林宪杰. 单羰基铜的键合异构现象[J]. 物理化学学报, 1995,11(06): 481-483
59. 孙宝珍;陈文凯;徐香兰.NO双分子在Cu₂O(111)面吸附与解离的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(09): 1126-1131
60. 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
61. 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
62. 吴文娟;赖瑛;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
63. 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
64. 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
65. 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
66. 吕海港;黎乐民. 表现价态异常分子EuS₂和Eu₂S的泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(05): 413-418
67. 曹小龙;郭丽. 多通道反应O(³P)+CH₂F的理论研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(06): 642-646
68. 王利江;张聪杰;武海顺.C_nB^δ(δ=0, ±1; n=1~6)团簇的结构、稳定性和光谱[J]. 物理化学学报, 2005,21(03): 244-249
69. 李中华;王锐;陈振宁;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
70. 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
71. 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
72. 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
73. 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
74. 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
75. 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
76. 孙科举 李微雪 冯兆池 李灿.Fe-AIPO₄-5分子筛的共振拉曼光谱[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 606-610
77. 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
78. 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
79. 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} (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
80. 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

81. 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
82. 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
83. 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
84. 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
85. 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
86. 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
87. 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
88. 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
89. 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
90. 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
91. 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
92. 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
93. 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
94. 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
95. 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
96. 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
97. 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
98. 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
99. 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
100. 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
101. 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
102. 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
103. 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
104. 王维 邵世群 周慧 滕启文. 环双(对-萘基-对草快)的分子识别与谱学性质[J]. 物理化学学报, 2008,24(09): 1631-1636
105. 邱玮玮; 林梦海. 过渡金属团簇Nb_n、Co_n(n≤4)和Nb_xCo_y(x+y≤8)的芳香性[J]. 物理化学学报, 2008,24(09): 1573-1578
106. 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
107. 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
108. 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
109. 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
110. 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
111. 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

112. 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
113. 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
114. 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
115. 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
116. 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
117. 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
118. 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
119. 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
120. 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
121. 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
122. 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
123. 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
124. 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
125. 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
126. 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
127. 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
128. 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
129. 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
130. 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
131. 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
132. 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
133. 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
134. 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
135. 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
136. 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
137. 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
138. 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
139. 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
140. 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
141. 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
142. 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

143. 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
144. 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
145. 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
146. 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
147. 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
148. 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
149. 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
150. 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
151. 黄荣彬;张鹏;朱永宝;郑兰荪.铈硫簇离子的激光产生与质谱分析[J]. 物理化学学报, 1992,8(01): 8-9
152. 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
153. 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
154. 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
155. 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
156. 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
157. 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
158. 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
159. 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
160. 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
161. 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
162. 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
163. 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
164. 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
165. 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
166. 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
167. 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
168. 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
169. 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, 0,(): 0-0
170. 赵新新;陶向明;宓一鸣;谭明秋.Ni(110)-p2mg(2×1)-CO表面的原子结构和电子态[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
171. 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, 0,(): 0-0
172. 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, 0,(): 0-0
173. 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, 0,(): 0-0

174. 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
175. 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, 0,(): 0-0
176. 左志军, 黄伟, 韩培德, 李志红. CO和H₂在Cu(111)面的吸附和溶剂化效应[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
177. 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, 0,(): 0-0
178. 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, 0,(): 0-0
-