

## Cu-[M']MOR和Ag-[M']MOR (M'=B, Al, Ga, Fe)的酸性

刘洁翔, 魏贤, 张晓光, 韩恩山

河北工业大学化工学院, 天津 300130|南开大学化学学院, 天津 300071

摘要:

采用Dmol3程序中基于密度泛函理论(DFT)的广义梯度方法(GGA)和BLYP方法以及DND基组, 研究了丝光沸石H-[M']MOR、Cu-[M']MOR和Ag-[M']MOR(M'=B, Al, Ga, Fe)结构及其对NH<sub>3</sub>分子的吸附, 获得了吸附平衡构型和吸附能. NH<sub>3</sub>分子在H-[M']MOR中的吸附主要是通过NH<sub>3</sub>分子中氮原子上的孤对电子与质子酸位作用, NH<sub>3</sub>分子在H-[Al]MOR、H-[Ga]MOR和H-[Fe]MOR上发生化学吸附, 而在H-[B]MOR上发生物理吸附, 这与文献结果相符. NH<sub>3</sub>分子与Cu-[M']MOR和Ag-[M']MOR分子筛之间主要通过氮上的孤对电子和平衡离子(Cu<sup>+</sup>和Ag<sup>+</sup>)的s空轨道间配位作用而发生化学吸附. 吸附能数据表明, 在H-[M']MOR、Cu-[M']MOR和Ag-[M']MOR中, Al原子进入骨架导致H-[Al]MOR、Cu-[Al]MOR和Ag-[Al]MOR的酸强度最强; 对于同一种原子取代的丝光沸石, 其酸强度次序为: Cu-[M']MOR > Ag-[M']MOR > H-[M']MOR. 此外, 还对吸附前后的沸石中平衡离子(H<sup>+</sup>、Cu<sup>+</sup>和Ag<sup>+</sup>)及NH<sub>3</sub>分子的Mulliken电荷集居数作了研究和分析.

关键词: 丝光沸石 杂原子 平衡离子 酸性 密度泛函理论

收稿日期 2009-04-13 修回日期 2009-07-03 网络版发布日期 2009-09-15

通讯作者: 刘洁翔, 张晓光 Email: jxliu@hebut.edu.cn; xgzhang@nankai.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. 祁晓岚; 王战; 李士杰; 李斌; 刘希尧; 林炳雄. 无胺法合成高硅丝光沸石的表征[J]. 物理化学学报, 2006, 22(02): 198-202
3. 郭彩红; 贾建峰; 郭玲; 武海顺. Ga<sub>x</sub>P<sub>y</sub> (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
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. 李雪辉; 张磊; 王乐夫; 唐应彪. N-羧基吡啶功能化离子液体的表征[J]. 物理化学学报, 2006, 22(04): 430-435
8. 陈锦灿; 李俊; 吴文娟; 郑康成. 系列异构配合物Ru(azpy)<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>的结构与抗癌活性[J]. 物理化学学报, 2006, 22(04): 391-396
9. 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
10. 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
11. 薛卫东; 张广丰; 朱正和; 汪小琳; 罗德礼; 邹乐西; 孙颖. CO<sub>2</sub>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
12. 武海顺; 许小红; 张聪杰; 张富强. (XN)<sub>4</sub>R<sub>4</sub>簇合物的结构与化学键 [J]. 物理化学学报, 2002, 18(02): 127-130
13. 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
14. 艾洪奇; 步宇翔. 黄金规则用于N<sub>3</sub><sup>-</sup>+N<sub>3</sub>体系电子转移的研究[J]. 物理化学学报, 2001, 17(03): 210-215
15. 王遵尧; 肖鹤鸣; 李金山. F+Cl<sub>2</sub>->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
16. 袁淑萍; 王建国; 李永旺; 彭少逸. B、Al、Ga同晶取代丝光沸石的从头计算 [J]. 物理化学学报, 2001, 17(09): 811-816

扩展功能

本文信息

PDF(1993KB)

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

▶ 丝光沸石

▶ 杂原子

▶ 平衡离子

▶ 酸性

▶ 密度泛函理论

本文作者相关文章

▶ 刘洁翔

▶ 魏贤

▶ 张晓光

▶ 韩恩山

17. 吴德意."中性"粘土矿物对非水溶液中有有机碱的吸附[J]. 物理化学学报, 1997,13(11): 978-983
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. 唐颐;华伟明;高滋.沸石的骨架结构与酸强度[J]. 物理化学学报, 1994,10(12): 1116-1120
22. 高滋;华伟明;陈建民;唐颐.正戊烷异构化反应表征固体超强酸性[J]. 物理化学学报, 1994,10(10): 897-902
23. 高滋;陈建民;唐颐;华伟明.用常温正丁烷异构化反应表征固体超强酸性[J]. 物理化学学报, 1994,10(08): 698-703
24. 唐颐;陆璐;高滋.丝光沸石孔口改性及对反应对位选择性的影响[J]. 物理化学学报, 1994,10(06): 514-520
25. 韩毓旺;沈俭一;陈懿.B-P-O系催化剂表面酸性的吸附量热研究[J]. 物理化学学报, 1997,13(10): 916-920
26. 鞠雅娜;沈志虹;赵佳;赵俊桥;王秀林.杂原子(B、Ti、Fe)进入Y型分子筛骨架的表征[J]. 物理化学学报, 2006,22(01): 28-32
27. 林伟;章永凡;李奕;陈勇;李俊箴.SnO<sub>2</sub>(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
28. 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
29. 吕玲玲;王永成.Au<sup>+</sup>(<sup>1</sup>S, <sup>3</sup>D)与N<sub>2</sub>O(<sup>1</sup>Σ<sup>+</sup>)反应机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(03): 265-269
30. 张敬来;王连宾;吴文鹏;曹泽星.线性簇合物SC<sub>2n</sub>S<sup>2-</sup>(n = 1~12)电子吸收光谱[J]. 物理化学学报, 2004,20(12): 1428-1433
31. 耿志远;王永成;汪汉卿.锗烯X<sub>2</sub>Ge(X=H、CH<sub>3</sub>、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
32. 徐灿;朱莉芳;高晨阳;曹娟.硅氧团簇(SiO<sub>2</sub>)<sub>n</sub>O<sub>2</sub>H<sub>4</sub>的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(02): 152-155
33. 黄飙;张家兴;李锐;申自勇;侯士敏;赵兴钰;薛增泉;吴全德.AI-C<sub>60</sub>-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. 金胜明;邱冠周;杨华明;邓震霞.海泡石制备HMS和AISBA介孔分子筛的研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(07): 796-799
35. 马文瑾;武海顺.AlmN<sub>2</sub><sup>-</sup>(m=1~8)团簇的结构与稳定性[J]. 物理化学学报, 2006,22(02): 178-182
36. 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
37. 耿卫国;李雪辉;王乐夫;段红丽;潘微平.多羧基咪唑离子液体的酸性表征[J]. 物理化学学报, 2006,22(02): 230-233
38. 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<sup>+</sup>和Ti<sup>+</sup>与CS<sub>2</sub>反应的计算研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(10): 1102-1107
39. 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
40. 方冉;耿志远;王永成;张兴辉;王冬梅;高立国;陈晓霞.锗烯X<sub>2</sub>Ge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
41. 张材荣;陈宏善;陈玉红;冯旺军;李维学;许广济;寇生中.Al<sub>8</sub>P<sub>8</sub>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
42. 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<sup>2+</sup>在水锰矿表面的吸附和沉淀[J]. 物理化学学报, 2005,21(12): 1378-1383
43. 朱瑜;蒋刚;于桂凤;朱正和;王和义;傅依备.N<sub>2</sub>在Pd金属表面的吸附行为[J]. 物理化学学报, 2005,21(12): 1343-1346
44. 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
45. 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
46. 华瑞茂.均相催化活化杂原子-碳(E-C)键及其与炔烃的加成反应[J]. 物理化学学报, 2004,20(08S): 989-994
47. 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
48. 王艳花;邹建卫;胡桂香;郑柯文;俞庆森.吡咯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

49. 朴铃钰; 韩扬; 寇元. 二苯醚烷基化反应中酸性离子液体的循环使用[J]. 物理化学学报, 2004,20(09): 1083-1088
50. 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
51. 蒲敏; 陈标华; 李会英; 刘坤辉. DFT法研究离子液中EMIM<sup>+</sup>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
52. 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
53. 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
54. 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
55. 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
56. 徐艺军; 李俊篔; 章永凡; 陈文凯. O<sub>2</sub>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
57. 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
58. 郑均林; 张晔; 魏伟; 吴东; 孙予罕; 邓风; 罗晴; 岳勇. 具有强酸性位的高水热稳定介孔分子筛的合成[J]. 物理化学学报, 2003,19(10): 907-912
59. 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
60. 师希娥; 翟尚儒; 戴立益; 单永奎; 何鸣元; 魏伟; 吴东; 孙予罕. 纳米硅铝介孔分子筛的合成及其催化裂化性能[J]. 物理化学学报, 2004,20(03): 265-270
61. 苗月; 袁宏宽; 陈洪. 双钙钛矿Sr<sub>2-x</sub>La<sub>x</sub>CrReO<sub>6</sub>的电子结构和磁性[J]. 物理化学学报, 2008,24(03): 448-452
62. 胥倩; 倪哲明; 潘国祥; 陈丽涛; 刘婷. 水滑石限域空间中Cl<sup>-</sup>与H<sub>2</sub>O的超分子作用[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 601-606
63. 吴阳; 冯璐; 张向东. C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>-H...X分子间氢键的理论计算[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 653-658
64. 李菲菲; 桂兴华; 刘道胜; 宋丽娟; 孙兆林. 乙烯在丝光沸石和改性丝光沸石孔道内的吸附行为[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 659-664
65. 李志伟; 李香芝; 许先芳; 赵存元; 陈六平. NaP<sub>4</sub>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
66. 孙慧卿; 丁少锋; 王雨田; 邓贝; 范广涵. CdO及Cd<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>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
67. 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
68. 马文瑾; 张献明; 许小红; 王艳宾; 武海顺. C<sub>n</sub>Al<sub>2</sub> (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
69. 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
70. 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<sub>61</sub>丁酸甲酯的密度泛函研究[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1353-1358
71. 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
72. 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
73. 罗小艳; 贾文红; 张聪杰. In<sub>n</sub>Na和In<sub>n</sub>Na<sup>+</sup> (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
74. 洪功义; 黎乐民; 徐光宪; 林宪杰. 单碳基团的键合异构现象[J]. 物理化学学报, 1995,11(06): 481-483
75. 唐克; 宋丽娟; 段林海; 李秀奇; 桂建舟; 孙兆林. 杂原子Y分子筛的二次合成及其吸附脱硫性能[J]. 物理化学学报, 2006,22(09): 1116-1120
76. 孙宝珍; 陈文凯; 徐香兰. NO双分子在Cu<sub>2</sub>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
77. 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
78. 陈洪林; 申宝剑; 潘惠芳. 水热脱铝ZSM-5/Y复合分子筛的表征和催化裂化性能[J]. 物理化学学报, 2004,20(08): 854-859
79. 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

80. 吴文娟; 赖榕; 郑康成; 云逢存. 抗癌性咪唑啉衍生生物的定量构效关系[J]. 物理化学学报, 2005,21(01): 28-32
81. 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
82. 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
83. 蒲敏; 刘坤辉; 李会英; 陈标华. DFT法研究离子液中EMIM<sup>+</sup>催化丁烯双键异构反应机理[J]. 物理化学学报, 2004,20(08): 826-830
84. 卞国柱; 范立; 伏羲路; 滕元熏. K-Mo基催化剂的表面酸性与其合成醇选择性[J]. 物理化学学报, 1998,14(05): 401-406
85. 吕海港; 黎乐民. 表观价态异常分子EuS<sub>2</sub>和Eu<sub>2</sub>S的泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(05): 413-418
86. 曹小龙; 郭丽. 多通道反应O(<sup>3</sup>P)+CH<sub>2</sub>F的理论研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(06): 642-646
87. 王利江; 张聪杰; 武海顺. C<sub>n</sub>B<sup>δ</sup>(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
88. 李中华; 王锐; 陈振宁; 韦永德; 周百斌. 用密度泛函方法研究α-[XMo<sub>12</sub>O<sub>40</sub>]<sup>n-</sup>杂多阴离子的振动光谱[J]. 物理化学学报, 2004,20(11): 1329-1334
89. 郑均林; 翟尚儒; 杨东江; 张晔; 吴东; 孙子罕. MSU-S<sub>MFI</sub>和MCM-41的催化裂化及烷基化活性比较[J]. 物理化学学报, 2005,21(03): 324-327
90. 徐艺军; 李俊钱; 章永凡. O<sub>2</sub>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
91. 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
92. 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
93. 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
94. 王晓化; 陶国宏; 吴晓牧; 寇元. 离子液体酸性的红外光谱探针法研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(05): 528-533
95. 田欣欣; 张富强; 冯瑞娟; 武海顺. B<sub>28</sub>N<sub>28</sub>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
96. 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
97. 孙科举; 李微雪; 冯兆池; 李灿. Fe-AlPO<sub>4</sub>-5分子筛的共振拉曼光谱[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 606-610
98. 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
99. 刘海洋; 冷科; 胡军; 应晓; 徐志广; 张启光. A<sub>3</sub>型Corrole中位取代基对其β位<sup>1</sup>H-NMR的影响[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 694-700
100. 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UO<sub>2</sub>L<sub>n</sub><sup>2-n\*</sup> (L=F<sup>-</sup>, CO<sub>3</sub><sup>2-</sup>, NO<sub>3</sub><sup>-</sup>; 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
101. 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
102. 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<sub>2</sub>(101)表面的敏化机理[J]. 物理化学学报, 2009,25(05): 947-952
103. 齐齐; 孙岳明; 哈涌泉. 1,8-萘酰亚胺类衍生生物的结构及紫外-可见吸收光谱[J]. 物理化学学报, 2009,25(06): 1143-1148
104. 葛桂贤; 唐光辉; 井群; 罗有华. CO与Pd<sub>n</sub>(n=1-8)团簇的相互作用[J]. 物理化学学报, 2009,25(06): 1195-1200
105. 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
106. 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
107. 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
108. 刘洁翔; 魏贤; 张晓光; 王桂香; 韩恩山; 王建国. NO<sub>x</sub>分子在[Ag]-AIMOR分子筛中的吸附[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 91-96
109. 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



110. 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
111. 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
112. 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
113. 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
114. 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
115. 蒋仕宇; 滕波涛; 鲁继青; 刘雪松; 杨培芳; 杨飞勇; 罗孟飞. 甲醛在CeO<sub>2</sub>(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
116. 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
117. 郑金德; 陆春海; 孙宝珍; 陈文凯. N<sub>2</sub>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
118. 魏洪源; 罗顺忠; 刘国平; 熊晓玲; 宋宏涛. H原子在完美 $\delta$ -Pu金属体相中的扩散行为[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 1964-1968
119. 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
120. 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
121. 陈新; 李瑛; 蒋青. 几种(C<sup>^</sup>N)Pt<sup>II</sup>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
122. 李宗宝; 姚凯伦; 刘祖黎. 有机-无机杂化化合物[Cu( $\mu$ -cbdca)(H<sub>2</sub>O)]<sub>n</sub>的电子结构及铁磁性[J]. 物理化学学报, 2008,24(09): 1681-1684
123. 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
124. 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
125. 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
126. 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
127. 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
128. 梁云霄; 水淼; 李榕生. 硼/氮掺杂富勒烯C<sub>20</sub>的结构和稳定性[J]. 物理化学学报, 2007,23(10): 1647-1651
129. 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
130. 王罗新; 刘勇; 庾新林; 李松年; 王晓工. H<sup>+</sup>、NH<sub>4</sub><sup>+</sup>对HMX的N-NO<sub>2</sub>键解离能的影响[J]. 物理化学学报, 2007,23(10): 1560-1564
131. 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
132. 姜勇; 储伟; 江成发; 王耀红. Pd<sub>n</sub>(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
133. 潘国祥; 倪哲明; 李小年. 类水滑石主体层板与客体CO<sub>3</sub><sup>2-</sup>、H<sub>2</sub>O间的超分子作用[J]. 物理化学学报, 2007,23(08): 1195-1200
134. 李静谊; 马俊华; 白图雅; 苏优乐玛. 氟离子对TiO<sub>2</sub>/膨润土光催化降解酸性桃红的影响[J]. 物理化学学报, 2007,23(08): 1213-1218
135. 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
136. 王艳宾; 马文瑾; 张静 武海顺. C<sub>n</sub>Al (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
137. 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
138. 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
139. 李磊; 桑革; 张鹏程; 蒋刚.  $\sigma$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>阻氢微观机制研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(12): 1912-1916
140. 徐伯华; 李来才; 王欣; 田安民. N<sub>5</sub>H<sub>5</sub>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

141. 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
142. 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
143. 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
144. 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
145. 王朝杰; 蔡跃甄. 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
146. 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
147. 何益明; 伊晓东; 黄传敬; 应方; 章小兵; 翁维正; 万惠霖. 丙烷选择氧化制丙烯醛 $MoBiTeO/SiO_2$ 催化剂中Te组分的作用[J]. 物理化学学报, 2007,23(06): 851-855
148. 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
149. 李思殿; 郭巧凌; 苗常青; 任光明. 含平面配位碳的过渡金属羧配合物 $M_nH_nC$ 密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(05): 743-745
150. 刘百军; 曾贤君; 王辉; 黄永; 汪梅. ZSM-5、ZSM-57分子筛和丝光沸石间的转晶规律[J]. 物理化学学报, 2007,23(04): 503-507
151. 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
152. 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
153. 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
154. 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
155. 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
156. 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
157. 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
158. 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
159. 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
160. 伏再辉; 陈君华; 陈远道; 向延海; 张鲁西; 尹笃林. 含过渡金属HMS的合成和催化性能[J]. 物理化学学报, 2000,16(05): 410-415
161. 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
162. 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
163. 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
164. 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
165. 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
166. 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
167. 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
168. 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
169. 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
170. 汪哲明; 阎子峰. 杂原子取代型磷酸铝分子筛上丁烯异构化反应[J]. 物理化学学报, 2003,19(03): 216-220
171. 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
172. 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):

173. 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
174. 赵东源;杨亚书;郭燮贤;陈恒荣;辛勤;王国甲.铁铝复合柱撑粘土的制备、酸性与表征(II)[J]. 物理化学学报, 1993,9(03): 336-344
175. 牛国兴;朱崇业;李全芝;薛志元;赵琰;侯运铎;李明时.不同脱铝深度稀土超稳Y沸石的酸性质[J]. 物理化学学报, 1993,9(03): 374-381
176. 王秋莹;菅盘铭;朱超;翟应离.IR. MAS NMR法研究富硅超稳镧氢Y沸石[J]. 物理化学学报, 1993,9(01): 50-55
177. 李邦银;高滋.脱铝方法对富硅丝光沸石性质的影响[J]. 物理化学学报, 1991,7(01): 1-9
178. 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
179. 张钺伟;沈美庆;吴晓东;翁端;张志华;田然;迟克彬.稀土对SAPO-11分子筛结构与性能的影响[J]. 物理化学学报, 2006,22(12): 1495-1500
180. 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
181. 李权;李德华;盛勇;朱正和.PdY<sup>n±</sup>(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
182. 汪鹏飞;吴世康.对-羟基苯叉丙二腈溶液在不同pH条件下吸收光谱的变化[J]. 物理化学学报, 1991,7(05): 582-585
183. 焦庆祝;庞文琴.杂原子ZSM-48型分子筛研究 III. 杂原子存在状态[J]. 物理化学学报, 1991,7(06): 662-665
184. 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
185. 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
186. 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<sub>4</sub>Ce<sub>2</sub>Ta<sub>10</sub>O<sub>30</sub>、K<sub>4</sub>Ce<sub>2</sub>Nb<sub>10</sub>O<sub>30</sub>及其固溶体的电子结构[J]. 物理化学学报, 2007,23(04): 466-472
187. 蒋仕宇;滕波涛;袁金焕;郭晓伟;罗孟飞.CO在CeO<sub>2</sub>(111)表面的吸附与氧化[J]. 物理化学学报, 2009,25(08): 1629-1634
188. 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
189. 张子英;杨德林;刘云虎;曹海滨;邵建新;井群.BaTiO<sub>3</sub>的电子结构和光学性质[J]. 物理化学学报, 2009,25(09): 1731-1736
190. 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
191. 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
192. 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
193. 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
194. 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
195. 张美一;何广智;丁程程;陈灏;潘纲.As(V)在TiO<sub>2</sub>表面的吸附机理[J]. 物理化学学报, 2009,25(10): 2034-2038
196. 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
197. 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
198. 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
199. 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
200. 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
201. 杨宗献;于小虎;马东伟.氧原子在具有Pt皮肤的Pt<sub>3</sub>Ni(111)表面的吸附和扩散[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
202. 倪哲明;胥倩;姚萍;毛江洪;刘晓明.层间水含量对Mg<sub>3</sub>Al-LDHs-Cl力学特性的影响[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0

203. 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
204. 陈锦灿, 陈兰美, 廖思燕, 郑康成. 抗癌性钌配合物[HL][ $trans\text{-Ru}^{\text{II}}\text{Cl}_4\text{L}_2$ ](L=2-NH<sub>2</sub>-5-Me-STz)的水解机理[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
205. 左志军, 黄伟, 韩培德, 李志红. CO和H<sub>2</sub>在Cu(111)面的吸附和溶剂化效应[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
206. 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
-