

酸性橙插层锌铝水滑石的组装及其结构与性能

何书珩, 蒲敏, 李军男, 何静, EVANS David G.

北京化工大学化工资源有效利用国家重点实验室, 北京 100029

摘要:

采用共沉淀法合成酸性橙阴离子插层锌铝水滑石(Zn/Al-A07 LDHs), 研究不同pH值及原料金属离子配比对产物结构的影响, 利用X射线粉末衍射(XRD), 热分析(TG-DTA), 傅里叶变换红外(FT-IR)等表征手段, 对插层产物的结构进行表征, 确定了制备酸性橙插层锌铝水滑石的最适宜条件. 用量子化学(d,p)方法对Zn/Al-A07 LDHs模型分子的空间几何构型进行了优化, 通过结构组合得到的层间距为2.33 nm, 接近实验上XRD测试得到的层间距, 从而说明了酸性橙离子在水滑石层板间的排列方式. 进一步以甲酸酐为溶剂对水滑石层板进行剥离, 得到澄清溶液, 根据剥离产物的XRD谱可以确定剥离高

关键词: 密度泛函理论 锌铝水滑石 酸性橙 层板剥离 量子化学计算

收稿日期 2009-07-16 修回日期 2009-10-04 网络版发布日期 2009-11-27

通讯作者: 蒲敏 Email: pumin@mail.buct.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. 郭彩虹: 贾建峰; 郭玲; 武海顺. $\text{Ga}_3\text{P}_y(\text{x}+\text{y}=8)$ 及其阴离子簇的结构与性质的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-(1,2-二甲基)乙烯基-4'-(*N,N*-二甲基-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. 咪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; 王艳艳; 蒋刚; 朱正和. $\text{PuX}+(\text{X}=\text{H}, \text{O}, \text{N}, \text{C})$ 的结构与势能函数[J]. 物理化学学报, 2001, 17(07): 622-625
8. 周世涛; 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)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. $\text{NX}(\text{X}=\text{F}, \text{Cl}, \text{Br})$ 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 $\text{N}_3^- + \text{N}_3$ 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; 李俊钺. 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; 李俊钺. $\text{SnO}_2(110)$ 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; 韩世涛. 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. $\text{Au}^+(\text{}^1\text{S}, \text{}^3\text{D})$ 与 $\text{N}_2\text{O}(\text{}^1\text{X}^+)$ 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 $\text{X}_2\text{Ge}(\text{X}=\text{H}, \text{CH}_3, \text{F}, \text{Cl}, \text{Br})$ 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. 黄帆 ; 张家兴; 李锐; 申自强; 侯士敏; 赵兴钰; 薛增泉; 吴全德. Al_iP_8 - 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-单苯基咪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. 赵材荣; 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; 潘刚; 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. 和序; 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. 王艳艳; 邹建卫; 胡桂香; 邓何文; 俞庆森. 吡咯咪唑酮模型化合物与氟核加成的理论探讨[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; 杨宗斌; 危书义. 水分子和二氧化铈(111)表面相互作用的DFT- μ 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, 0, () : 0-0
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, 0, () : 0-0
41. 陈晓华; 樊永明; 曹春显; 胡红智. 酞型木素模型物的光学特性[J]. 物理化学学报, 0, () : 0-0
42. 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(I)[J]. 物理化学学报, 2005, 21(04): 383-387
43. 任彦亮; 万坚; 刘俊军; 万洪文. 吡啶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
44. 陈人杰; 袁锋. 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
45. 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
46. 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
47. 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
48. 邵晓红; 张仁仁; 汪文川. 密度泛函与分子模拟计算孔径分布比较[J]. 物理化学学报, 2003, 19(06): 538-542
49. 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
50. 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
51. 晋倩; 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
52. 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
53. 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
54. 孙慧卿; 丁少锋; 王雨田; 邓贝; 范广涌. 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
55. 罗世霞; 张笑一; 张思孝; 朱淮武; 胡继伟; 卫钢. 羧基偶氮苯分子电子传输的取代基效应[J]. 物理化学学报, 2008, 24(08): 1471-1476
56. 马文瑾; 张献明; 许小红; 王艳艳; 武海顺. C_nAl_2 ($n=1\sim 10$)团簇的结构特征与稳定性[J]. 物理化学学报, 2008, 24(08): 1477-1480
57. 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
58. 赵材荣; 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
59. 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
60. 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
61. 罗小艳; 贾文红; 张聪杰. In_nNa 和 In_nNa^+ ($n=2\sim 8$)的团簇结构和电子性质[J]. 物理化学学报, 2009, 25(02): 261-266
62. 洪功义; 黎乐民; 徐光宪; 林宪杰. 单羧基铜的键合异构现象[J]. 物理化学学报, 1995, 11(06): 481-483
63. 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
64. 张华; 陈小华; 张振华; 邱明. 接枝基对有限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;鄧二氮杂苯-水化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;赖超;郑康成;于逢存. 抗癌性咪唑哇唑啉衍生物的定位构效关系[J]. 物理化学学报, 2005,21(01): 28-32
68. 赵彦英;刘亚军;郑世均;黄明宝;孟令鹏;戎坤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;马文瑞;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EuS₂和Eu₂S的泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(05): 413-418
72. 王小川;郭丽. 多通道反应O²(P)+CH₂F₂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. C₂B₅⁺(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
74. 李中华;王锐;陈振宇;韦永德;周百斌. 用密度泛函方法研究G-(XMO_{1.5}O₄)₁₀¹⁰⁻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;李俊强;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
76. 史福强;姜小明;徐志成;安静仪;俞稼维. 吡啶-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;吴皓;王从敏;郑世均. 烷基咪唑啉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;韩世均. 单重态二溴卡宾和甲醛加成反应的量化研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(11): 1339-1344
79. 田欣成;张富强;郑瑞娟;武海顺. B₂₀N₂₀笼的稳定性及笼中四元环键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. 孙科李;李微雪;冯光池;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
82. 唐智勇;胡云楚;赵莹;刘述斌. 氟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. 张晨光.A₃型Corralle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
84. 章家芳;陆春海;陈文凯;许莹;郑金德. 气相和水溶液中铂配合物UO₂L²⁻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
85. 倪哲明;毛江洪;潘国祥;胥倩;李小平.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. 苏秦;薛卫东;冯勇;王建华;易丹. 8-羟基咪唑啉铁配合物对锐钛型TiO₂(101)表面的催化机理[J]. 物理化学学报, 2009,25(05): 947-952
87. 齐齐;孙岳明;哈涌泉. 1,8-萘啉酰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. 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
90. 宋建民;刘东州;王云明;刘立芳;康艳磊;王保柱;朱玲欣;刘书华. 平行板间超支化聚合物流体的密度分布和溶剂化力[J]. 物理化学学报, 0(0): 0-0
91. 姚萍;倪哲明;胥倩;毛江洪;刘晓明;王巧巧. 镁离子在水滑石中的超分子作用[J]. 物理化学学报, 0(0): 0-0
92. 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
93. 刘洁翔;魏贤;张曙光;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
94. 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
95. 张富春;张志勇;张威武;阎军峰;江妮. Pb₂Sr_{1-x}TiO₃的电子结构[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 61-66
96. 于艳春;肖鹤鸣;琥珀酸二脂脂磺酸钠的合成、结构及水合作用[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 30-34
97. 赵新新;陶向明;廖一鸣. 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
98. 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
99. 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
100. 蒋仕宇;滕波涛;鲁维青;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
101. 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
102. 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
103. 魏洪源;罗顺忠;刘国平;熊晓玲;宋宏涛. H原子在完美δ-Pu金属相中的扩散行为[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 1964-1968
104. 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
105. 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
106. 陈新;李奕;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
107. 李宗宝;姚凯伦;刘祖黎. 有机-无机杂化化合物[Cu(μ-cbdca)(H₂O)_n]_n的电子结构及铁磁性[J]. 物理化学学报, 2008,24(09): 1681-1684
108. 黄水丽;刘志平;氮和硫原子在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
109. 张士国;张立超;杨颖. 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
110. 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
111. 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
112. 林英武;王中华;聂长明;倪峰云. 取代基对吡啶结构和性质的影响[J]. 物理化学学报, 2007,23(10): 1594-1598
113. 梁云雷;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
114. 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动的理论研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(11): 1733-1737
115. 王罗新;刘勇;黄新林;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
116. 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
117. 姜勇;储伟;江志成;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
118. 潘国祥;倪哲明;李小平. 类水滑石主体层板与客体CO₂²⁻、H₂O间的超分子作用[J]. 物理化学学报, 2007,23(08): 1195-1200
119. 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
120. 王艳杰;马文瑞;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
121. 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
122. 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
123. 李磊;桑萃;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
124. 徐伯华;李来才;王欣;田安民. N₂H₄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
125. 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
126. 王溢磊;吴国是. ESIPIT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
127. 贝逸超;主沉浮;刘庆阳;戚桂斌. 卤代硅烷(R₃SiX)与NR₃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
128. 纪水军;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
129. 王朝杰;蔡跃凯. 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
130. 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
131. 张静;王艳杰;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
132. 李思聪;郭巧凌;苗苗;任光明. 含平面配位碳的过渡金属配合物M_nH_nC密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(05): 743-745
133. 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
134. 谭金芝;肖鹤鸣;贾雪东;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
135. 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
136. 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
137. 张志强;屈一新. 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
138. 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
139. 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
140. 李权;刘晓亚;高涛;朱正和;傅依备;汪小琳;孙颖. PuO^{III}的势能函数的稳定性[J]. 物理化学学报, 2000,16(11): 987-991
141. 张晓清;贾建峰;武海顺;袁晓琴. 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
142. 贾雪东;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
143. 陈波珍;黄明宝;颜达子.(CH₂)₂N和(CH₂)₂NH⁺的密度泛函理论计算[J]. 物理化学学报, 1999,15(06): 495-499
144. 周立新;莽朝水;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

145. 喻典;陈志达;王黎;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
146. 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
147. 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
148. 陈文凯;许娇;章永凡;周立新;李俊钊.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
149. 李凤仪;徐文斌;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
150. 张远;曹彦年;孙岳明;刘举正;顾瑾.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
151. 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
152. 蔡建秋;陶向明;谭明秋.氮原子吸附的Cu(100)表面原子结构和电子态[J].物理化学学报, 2007,23(03): 355-360
153. 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
154. 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
155. 张树强;王雅琼;郑旭明.硝基羟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
156. 李权;李德华;盛勇;朱正和;PdYⁿ⁺(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
157. 马文璠;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
158. 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
159. 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
160. 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
161. 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
162. 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
163. 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
164. 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
165. 陈毓敏;邓珂;裴晓辉;王琛.一氧化碳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
166. 原现瑞;黄振华;李润岩;刘英华;陈晓霞;张慧丽;修勇.N-平基酰胺分子的氮-氢键旋转位阻及分子构象[J].物理化学学报, 2009,25(09): 1785-1790
167. 罗姗姗;仇永清;刘晓东;刘春光;苏忠民.含有咪唑生色团的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
168. 张美一;何广智;丁程程;陈瀚;潘俐.As(V)在TiO₂表面的吸附机理[J].物理化学学报, 2009,25(10): 2034-2038
169. 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
170. 张福兰;李来才;田安民.乙烷在Ni(111)表面的吸附和解离[J].物理化学学报, 2009,25(09): 1883-1889
171. 詹卫伸;潘石;李源作;陈茂笃.二氮咪唑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
172. 朱玥;蒲敏;何静;EVANS David G.偶氮苯磺酸衍生物的致顺反异构化机理[J].物理化学学报, 2009,25(11): 2296-2304
173. 赵新新;陶向明;宓一鸣;陈戎;谭明秋.Ni(110)-p2mg(2×1)-CO表面的几何结构和电子态[J].物理化学学报, 2009,25(11): 2305-2311
174. 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
175. 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
176. 吕存琴;凌开成;王贵昌.甲酸在清洁及磷改性Mo(100)表面的解离[J].物理化学学报, 2009,25(11): 2336-2342
177. 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
178. 陈锦灿;陈兰美;廖思燕;郑康成.抗癌性钌配合物[HL][trans-Ru^{III}Cl₂L₂](L=2-NH₂-5-Me-STz)的水解机理[J].物理化学学报, 2009,25(12): 2543-2550
179. 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
180. 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
181. 徐晓芳;高放;李红茹;张胜涛.生色团连接的苯硼三氮唑衍生物的激发态分子内质子转移[J].物理化学学报, 0,(0): 0-0
182. 赵亚华.含有一个非平面杂环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
183. 王会萍;白福全;郑清川;赵增霞;赵晓杰;张红星.咪唑吡啶异构体的电子结构和光学性质[J].物理化学学报, 0,(0): 0-0
184. 姜富灵;翟高红;丁黎;岳可芬;刘妮;史启祯;文振翼.NO₂、OH、OH⁻对HMX初始热解的影响[J].物理化学学报, 0,(0): 0-0
185. 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, 0,(0): 0-0