

NO双分子在Cu<sub>2</sub>O(111)面吸附与解离的理论研究

孙宝珍·陈文凯·徐香兰

(福州大学化学系, 福州 350002)

摘要:

采用广义梯度密度泛函理论结合周期平板模型方法, 在DNP基组下, 研究了NO双分子在三重态和单重态两种电子组态下在Cu<sub>2</sub>O(111)完整表面的吸附情况. 考虑了Cu+(NO)(NO)、Cu+(NO)(ON)及Cu+(ON)(ON)这三种构型, 计算了它们的吸附能和Mulliken电荷, 分析并预测了吸附后可能产生的物种. NO分子都以O端吸附在Cu<sub>2</sub>O(111)表面时即Cu+(ON)(ON)构型, N—O键长很短, 只有124.4 pm, 吸附的两个NO分子形成了二聚体形式, 这种吸附构型有利于进一步解离产生N<sub>2</sub>或N<sub>2</sub>O并形成Cu—O表面物种.

关键词: 密度泛函理论 周期平板模型 NO Cu<sub>2</sub>O(111) 吸附 二聚体 解离

收稿日期 2006-03-27 修回日期 2006-05-18 网络版发布日期 2006-09-04

通讯作者: 陈文凯 Email: qc2008@fzu.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.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
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. 陈锡灿;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
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.一个新的桥连范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<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
10. 武海顺;许小红;张聪杰;张富强.(XM)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
13. 王遵友;肖鹤鸣;李金山.F+Cl<sub>2</sub>->ClF+Cl和ClF+Cl->Cl<sup>+</sup>+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.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
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<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
20. 张敬来;王连实;吴文鹏;曹泽星.线性簇合物SC<sub>2n-1</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
21. 耿志远;王永成;汪汉卿.锗簇X<sub>2</sub>Ge(X=H, CH<sub>3</sub>, F, Cl, Br)与乙烷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;高昆阳;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
23. 黄麒 ;张家兴;李锐;申自勇;侯士敏;赵兴钰;薛增泉;吴全德.Al-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
24. 马文瑞;武海顺.AlmN<sub>m</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
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<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
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.锗簇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
29. 张材荣;陈宏善;陈玉红;冯旺军;李维学;许广济;寇生中.Al<sub>6</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
30. 朱孟强;潘刚;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<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
31. 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
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;邵建卫;胡桂香;郑柯文;俞庆森.吡咯咪唑啉模型化合物与氮杂核加成的理论探讨[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<sup>+</sup>催化丁烯双键异构反应机理(1)[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;徐文斌;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<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
43. 邵晓红;张现代;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<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
46. 胥倩;倪哲明;潘国群;陈丽涛;刘婷.水滑石层域空间中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
47. 吴阳;冯璐;张向东.C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>-H<sub>2</sub>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<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
49. 孙慧卿;丁少锋;王雨田;邓伟;范广涵.CdO及Cd<sub>2</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
50. 罗世强;张笑一笑;张恩亭;朱淮武;胡继伟;卫娟.疏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. 马文瑞;张献明;许小红;王艳花;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
52. 王云海;刘永东;罗云歌;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<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
54. 张旭 陆伟 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<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
57. 洪功义;黎乐民;徐光亮;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
58. 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
59. 李权;黄方千;邵二氮杂苯-水复合物的氢键结构与性质[J]. 物理化学学报, 2005,21(01): 52-56
60. 吴文娟;赖璐;郑康成.云连存.抗癌性咪唑啉啉衍生物的量构效关系[J]. 物理化学学报, 2005,21(01): 28-32
61. 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
62. 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
63. 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
64. 吕海港;黎乐民.表现价态异常离子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
65. 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
66. 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
67. 李中华;王锐;陈振宇;韦永德;周百斌.用密度泛函方法研究α-[XMo<sub>2</sub>O<sub>4</sub>]P<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

60. 徐艺军;李俊强;章永凡. O<sub>2</sub>在有氧和镁缺陷MgO(001)表面的吸附[J]. 物理化学学报, 2003,19(09): 815-818
69. 史福强;姜小明;徐志成;安静仪;俞穆耀. 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
70. 王勇;李浩然;姚娟;王从敏;韩世钧. 烷基咪唑啉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. 田欣欧;张富强;冯瑞娟;武海顺. C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>N<sub>2</sub>O<sub>8</sub>的稳定性及笼中四元环间键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;马静虹;李瑞平.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. 孙科萃 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
75. 唐智勇 胡云楚 赵莹 刘述斌. 氧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 冷广 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
77. 章芳芳 陆春海 陈文凯 许莹 郑金德. 气相和水溶液中铂酰配合物UO<sub>2</sub>L<sub>2</sub><sup>2-</sup>·n\*<sup>n</sup> (L=F, CO<sub>2</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
78. 倪哲明 毛江洪 潘国祥 胥倩 李幼年.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-羟基咪唑铁配合物对锐钛型TiO<sub>2</sub>(101)表面的敏化机理[J]. 物理化学学报, 2009,25(05): 947-952
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<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
82. 孙秀良,黄崇品,张傑,陈中华.Beta分子筛中Al的分布和Brønsted酸酸性强度[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.牛视紫红蛋白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. 刘洁琼;魏霞;张晓光;王桂香;韩思山;王建国.NO<sub>2</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
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;简军峰;江妮.Pb<sub>3</sub>Sr<sub>1-x</sub>TiO<sub>3</sub>的电子结构[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 61-66
88. 于艳春;肖鹤鸣.琥珀酸二油酯磺酸盐的合成、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 恽一鸣 谭明秋.Pt/Cu(001)-p(2x2)-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
92. 蒋仕宇;滕波涛;鲁雅青;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
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.N<sub>2</sub>分子在UO<sub>2</sub>(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;李璜;蒋晋.几种C(πN)Pt<sup>II</sup>O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. 李宗志;姚凯伦;刘祖黎.有机-无机杂化化合物[Cu(μ-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
100. 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
101. 张士国;张立超;杨频.吡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.蒾萘.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.三氟化氮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.取代基对吡啶结构和性质的影响[J]. 物理化学学报, 2007,23(10): 1594-1598
105. 梁云霄;水森;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
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偶极振荡的理论研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(11): 1733-1737
107. 王罗勇;刘勇;庚新林;李松平;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
108. 李会学;郑惠安;陈声;蒾萘.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<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
110. 潘国祥;倪哲明;李幼年.类水滑石主体层板与客体CO<sub>2</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
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;马文瑞;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
113. 杨作银;周宏伟;张敬伟;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-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>阻氢微观机理研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(12): 1912-1916
116. 徐伯华;李来才;王欣;田安民.N<sub>6</sub>H<sub>6</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
117. 陈璐;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. 贝逸翔;王沉浮;刘庆阳;戚桂斌.卤代硅烷(R<sub>3</sub>SiX)与NR<sub>3</sub>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)<sub>n</sub>H<sub>m</sub>(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. 蔡跃凯.铁原子与氯分子间的相互作用——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)<sub>n</sub><sup>+</sup>(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络合物M<sub>n</sub>H<sub>6</sub>C密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(05): 743-745
125. 谭敏;王海霞;冯霄;吴东;孙宇罕.DFT研究3-羟基丙烯酸的双键旋转反应机理[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.硝酞甲酸分子间相互作用的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<sub>2</sub>C<sub>n</sub><sup>+</sup>(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
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;傅依春;汪小琳;孙颖.PuO<sup>II</sup>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.羰基化合物(BCO)<sub>n</sub>(n=1~12)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;颜达子.(CH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>N和(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>NH<sup>+</sup>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;蒋朝水;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
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<sub>2</sub>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;李俊强.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
141. 李凤仪;徐文媛;余军文.二氯甲基硅醇解的量化计算[J]. 物理化学学报, 2003,19(04): 338-341
142. 张远;曹爱年;孙岳明;刘举正;顾瑾.NO双分子和二聚体与Cu<sub>2</sub>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;魏运萍;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;罗云敏;张伟;钟佩刚.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;张峭宇.基于密度泛函理论研究二烯并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.硝基羟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<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
149. 马文瑞;王艳宾;张静;武海顺. B<sub>m</sub>N (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
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;蒋雨;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
152. 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, 0.0: 0-0
153. 梁晓静,崔刚,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: 0-0

154. 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, 0, 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: 0-0
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: 0-0
157. 陈毓敏, 邓珂, 袁晓辉, 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: 0-0
158. 原现瑞, 尚振华, 李润岩, 刘英华, 陈晓霞, 张慧丽, 修勇. *N*-苯基酰胺分子的氮-氢键旋转位阻及分子构象[J]. 物理化学学报, 0, 0: 0-0