

## 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

黄永丽; 刘志平

北京化工大学, 教育部纳米材料重点实验室, 分子与材料模拟研究室, 北京 100029

摘要:

用密度泛函理论研究了氢和硫原子在金属Pd、Au、Cu以及合金PdM<sub>3</sub>、Pd<sub>2</sub>M<sub>2</sub>和Pd<sub>3</sub>M(111)表面的吸附(M=Au, Cu), 得到了覆盖率为0.25时最稳定的吸附位、结合能以及吸附前后表面的弛豫情况. 结果表明, 氢和硫均与Pd形成最稳定的吸附, Cu次之, Au的吸附最弱, 其在三种纯金属(111)表面的最稳定吸附位均为fcc位. 由于PdAu合金具有较大的晶格常数, Pd<sub>3</sub>Au合金吸附氢的结合能甚至较纯Pd更大, 除此之外, 氢和硫在PdM合金表面的吸附基本随M组分的增加而减弱, 而最稳定的吸附位随金属种类和组成变化而变化. 根据计算得到的吸附结合能, 发现与PdCu合金相比, PdAu合金在Au含量较低(约25%, 摩尔分数)时, 氢和硫吸附的结合能下降较慢, 而Au含量较高(跃50%)时, 结合能迅速下降, 这表明含金量为25%-50%的PdAu合金有可能在保持相近透氧性能的同时, 比PdCu合金具有更好的抗硫毒性.

关键词: 密度泛函理论 金属表面吸附 氢原子 硫原子 钯合金膜 抗硫毒性

收稿日期 2008-03-10 修回日期 2008-05-26 网络版发布日期 2008-08-07

通讯作者: 刘志平 Email: liuzhp@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
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)<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<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. (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
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. 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. 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):

扩展功能

本文信息

PDF(865KB)

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

▶ 金属表面吸附

▶ 氢原子

▶ 硫原子

▶ 钯合金膜

▶ 抗硫毒性

本文作者相关文章

▶ 黄永丽

▶ 刘志平

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 $\text{X}_2\text{Ge}$  ( $\text{X}=\text{H}, \text{CH}_3, \text{F}, \text{Cl}, \text{Br}$ )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. 黄飙;张家兴;李锐;申自勇;侯士敏;赵兴钰;薛增泉;吴全德.  $\text{Al-C}_{60}$ -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.  $\text{AlmN}_2^-$  ( $m=1\sim 8$ )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 $\text{Sc}^+$ 和 $\text{Ti}^+$ 与 $\text{CS}_2$ 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
28. 方冉;耿志远;王永成;张兴辉;王冬梅;高立国;陈晓霞. 锗烯 $\text{X}_2\text{Ge}$ 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.  $\text{Al}_8\text{P}_8$ 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 $\text{Zn}^{2+}$ 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.  $\text{N}_2$ 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 $\text{trans-2-丁烯}$ 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. 吡咯喹啉醌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. 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, 杨宗猷, 危书义. 水分子和二氧化铈(111)表面相互作用的DFT+ $U$ 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, 2010,26(01): 155-162
40. 任雪峰, 任爱民, 王钦, 封继康.  $\text{meso}$ 取代卟啉衍生物的结构和光学性质[J]. 物理化学学报, 2010,26(01): 110-114
41. 陈晓华, 樊永明, 曹春昱, 胡红智. 醌型木素模型物的光学特性[J]. 物理化学学报, 2010,26(01): 125-130
42. 刘海波, 仇永清, 孙世玲, 孙晓娜, 苏忠民. 双咪唑苯和双三唑苯及其衍生物非线性光学性质的密度泛函研究[J]. 物理化学学报, 2010,26(01): 120-124
43. 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
44. 任彦亮;万坚;刘俊军;万洪文. 卟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
45. 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
46. 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
47. 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
48. 徐艺军;李俊钺;章非凡;陈文凯.  $\text{O}_2$ 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
49. 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

50. 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
51. 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
52. 胥倩;倪哲明;潘国祥;陈丽涛;刘婷. 水滑石限域空间中 $\text{Cl}^-$ 与 $\text{H}_2\text{O}$ 的超分子作用[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 601-606
53. 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
54. 李志伟;李香芝;许先芳;赵存元;陈六平. $\text{NaP}_4$ 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
55. 孙慧卿;丁少锋;王雨田;邓贝;范广涵. $\text{CdO}$ 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
56. 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
57. 马文瑾;张献明;许小红;王艳宾;武海顺. $\text{C}_n\text{Al}_2$  ( $n=1-10$ )团簇的结构特征与稳定性[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1477-1480
58. 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
59. 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- $\text{C}_{61}$ 丁酸甲酯的密度泛函研究[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1353-1358
60. 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
61. 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
62. 罗小艳;贾文红;张聪杰. $\text{In}_n\text{Na}$ 和 $\text{In}_n\text{Na}^+$  ( $n=2-8$ )的团簇结构和电子性质[J]. 物理化学学报, 2009,25(02): 261-266
63. 洪功义,黎乐民,徐光宪,林宪杰. 单碳基钼的键合异构现象[J]. 物理化学学报, 1995,11(06): 481-483
64. 孙宝珍;陈文凯;徐香兰. $\text{NO}$ 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
65. 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
66. 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
67. 吴文娟;赖榕;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
68. 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
69. 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
70. 蒲敏;刘坤辉;李会英;陈标华. DFT法研究离子液中 $\text{EMIM}^+$ 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 $\text{EuS}_2$ 和 $\text{Eu}_2\text{S}$ 的泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(05): 413-418
72. 曹小龙;郭丽. 多通道反应 $\text{O}(^3P)+\text{CH}_2\text{F}$ 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. $\text{C}_n\text{B}^\delta$  ( $\delta=0, \pm 1; n=1\sim 6$ )团簇的结构、稳定性和光谱[J]. 物理化学学报, 2005,21(03): 244-249
74. 李中华;王锐;陈振宁;韦永德;周百斌. 用密度泛函方法研究 $\alpha\text{-[XMo}_{12}\text{O}_{40}]^{n-}$ 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;李俊篔;章永凡. $\text{O}_2$ 在具有氧和镁缺陷 $\text{MgO}(001)$ 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
77. 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
78. 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
79. 田欣欣;张富强;冯瑞娟;武海顺. $\text{B}_{28}\text{N}_{28}$ 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
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 $\text{Co(II)Salen}$ 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. 孙科举 李微雪 冯兆池 李灿. Fe- $\text{AlPO}_4$ -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. 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
83. 刘海洋 冷科 胡军 应晓 徐志广 张启光.  $\text{A}_3$ 型Corrolle中位取代基对其 $\beta$ 位 $^1\text{H-NMR}$ 的影响[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 694-700
84. 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 $\text{UO}_2\text{L}^{2-n^*a}_n$  ( $\text{L}=\text{F}^-, \text{CO}_3^{2-}, \text{NO}_3^-$ ;  $n=0-6, a=1, 2$ )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
86. 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 $\text{TiO}_2(101)$ 表面的敏化机理[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
88. 葛桂贤 唐光辉 井群 罗有华. CO与 $\text{Pd}_n$  ( $n=1-8$ )团簇的相互作用[J]. 物理化学学报, 2009,25(06): 1195-1200
89. 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
90. 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
91. 宋建民 刘东州 王云明 刘立芳 康艳霜 王保柱 朱玲欣 刘书华. 平行板间超支化聚物流体的密度分布和溶剂化力[J]. 物理化学学报, 2010,26(01): 169-174
92. 姚萍 倪哲明 胥倩 毛江洪 刘晓明 王巧巧. 镁锡水滑石中的超分子作用[J]. 物理化学学报, 2010,26(01): 175-182
93. 倪碧莲 蔡亚萍 李奕 丁开宁 章永凡. 不同覆盖度下Li原子在 $\text{Si}(001)$ 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
94. 刘洁翔 魏贤 张晓光 王桂香 韩恩山 王建国.  $\text{NO}_x$ 分子在 $[\text{Ag}]-\text{AIMOR}$ 分子筛中的吸附[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 91-96
95. 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
96. 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
97. 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
98. 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
99. 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
100. 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
101. 蒋仕宇 滕波涛 鲁继青 刘雪松 杨培芳 杨飞勇 罗孟飞. 甲醛在 $\text{CeO}_2(111)$ 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
102. 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
103. 郑金德 陆春海 孙宝珍 陈文凯.  $\text{N}_2$ 分子在 $\text{UO}(100)$ 表面的吸附与解离[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 1995-1999
104. 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
105. 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
106. 干琴芳 倪碧莲 李奕 丁开宁 章永凡. CO分子在 $\text{TiC}(001)$ 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
107. 陈新 李瑛 蒋青. 几种 $(\text{C}^{\wedge}\text{N})\text{Pt}^{\text{II}}\text{Q}$ 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
108. 李宗宝 姚凯伦 刘祖黎. 有机-无机杂化化合物 $[\text{Cu}(\mu\text{-cbdca})(\text{H}_2\text{O})]_n$ 的电子结构及铁磁性[J]. 物理化学学报, 2008,24(09): 1681-1684
109. 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
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.取代基对吡吩结构和性质的影响[J]. 物理化学学报, 2007,23(10): 1594-1598
113. 梁云霄;水淼;李榕生.硼/氮掺杂富勒烯 $C_{20}$ 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荡的理论研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(11): 1733-1737
115. 王罗新;刘勇;庾新林;李松年;王晓工. $H^+$ 、 $NH_4^+$ 对HMX的N— $NO_2$ 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
118. 潘国祥;倪哲明;李小年.类水滑石主体层板与客体 $CO_3^{2-}$ 、 $H_2O$ 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
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;桑革;张鹏程;蒋刚. $\alpha-Al_2O_3$ 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. $N_5H_5$ 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. 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
126. 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
127. 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
128. 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
129. 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
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质[J]. 物理化学学报, 2007,23(06): 846-850
131. 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
132. 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
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;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
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;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
138. 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
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. $PuO^{n+}$ 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;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
142. 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

143. 陈波珍; 黄明宝; 颜达予.  $(\text{CH}_2)_2\text{N}$ 和 $(\text{CH}_3)_2\text{NH}^+$ 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
145. 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
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.  $\text{PuH}_2$ 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
148. 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
149. 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
150. 张远; 曹爱年; 孙岳明; 刘举正; 顾璠. NO双分子和二聚体与 $\text{Cu}_2$ 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. 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
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
156. 李权; 李德华; 盛勇; 朱正和.  $\text{PdY}^{n\pm}$  ( $n=0, 1, 2, 3$ )分子离子的结构与稳定性[J]. 物理化学学报, 2006,22(12): 1516-1519
157. 马文瑾; 王艳宾; 张静; 武海顺.  $\text{BmN}$  ( $m=2\sim 9$ )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 $\text{K}_4\text{Ce}_2\text{Ta}_{10}\text{O}_{30}$ 、 $\text{K}_4\text{Ce}_2\text{Nb}_{10}\text{O}_{30}$ 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 $\text{CeO}_2$ (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.  $\text{BaTiO}_3$ 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; 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
166. 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
167. 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
168. 张美一; 何广智; 丁程程; 陈灏; 潘纲. As(V)在 $\text{TiO}_2$ 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)表面的吸附和分解[J]. 物理化学学报, 2009,25(09): 1883-1889
171. 詹卫仲; 潘石; 李源作; 陈茂筠. 二氢卟啉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光致顺反异构化机理[J]. 物理化学学报, 2009,25(11): 2296-2304
173. 赵新新; 陶向明; 宓一鸣; 陈成; 谭明秋. Ni(110)- $p2mg(2\times 1)$ -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Pt<sub>3</sub>Ni(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Mg<sub>3</sub>Al-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.甲胺在清洁及磷改性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<sup>III</sup>Cl<sub>4</sub>L<sub>2</sub>](L=2-NH<sub>2</sub>-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H<sub>2</sub>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.生色团连接的苯并三氮唑衍生物的激发态分子内质子转移[J]. 物理化学学报, 2010,26(01): 131-140
182. 何书珩, 蒲敏, 李军男, 何静, EVANS David G..酸性橙插层铝水滑石的组装及其结构与性能[J]. 物理化学学报, 2010,26(01): 259-264
183. 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
184. 陈秀敏, 杨斌, 陶东平, 戴永年.AICI歧化反应分解法制备金属铝过程中[AICI]<sub>n</sub>的形成机理[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
185. 刘玲玲, 王永成.气相中W<sup>+</sup>活化CO<sub>2</sub>分解的自旋禁阻反应机理[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
186. 唐典勇, 黄雪娜, 邹婷, 金诚, 胡建平, 伏秦超.金钼二元小团簇的几何结构与电子性质[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
187. 李敏杰, 李亚军, 彭淳容, 陆文聪.一种新型细梗胡枝子黄酮类提取物的结构和抗氧化活性[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
188. 雷永林, 霍冀川.烷基取代对罗丹明的电子结构与光谱的理论研究[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
189. 张诚, 严妍, 陈丽涛, 马淳安.9,9'-螺双茛的光电性能[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
190. 曹青松, 邓开明.C<sub>56</sub>X<sub>10</sub>(X=F, Cl, Br, I)的结构稳定性和电子性质[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
191. 王会萍, 白福全, 郑清川, 赵增霞, 赵晓杰, 张红星.吡啶咪唑异构体的电子结构和光学性质[J]. 物理化学学报, 2010,26(01): 115-119
192. 姜富灵, 翟高红, 丁黎, 岳可芬, 刘妮, 史启祯, 文振翼.NO<sub>2</sub>、OH、OH<sup>-</sup>对HMX初始热解的影响[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
193. 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, 2010,26(01): 141-148