

CO和H₂分子在Cu(111)面的吸附和溶剂化效应

左志军, 黄伟, 韩培德, 李志红

太原理工大学, 煤科学与技术教育部和山西省重点实验室, 太原 030024; 太原理工大学材料科学与工程学院, 太原 030024

摘要:

采用广义梯度近似(GGA)密度泛函理论(DFT)的PW91方法结合周期性模型, 在DNP基组下, 利用Dmol3模块研究了CO和H₂在真空和液体石蜡环境下在Cu(111)表面上不同位置的吸附. 计算结果表明, 溶剂化效应对H₂和CO的吸附结构参数和吸附能的影响非常显著. 在液体石蜡环境下, H₂平行吸附在Cu(111)表面是解离吸附, 而CO和H₂在两种环境下的垂直吸附都是非解离吸附. 相比真空环境吸附, 在液体石蜡环境中, Cu(111)吸附CO时, 溶剂化效应能够提高CO吸附的稳定性, 同时有利于CO的活化. 在真空中, H₂只能以垂直方式或接近垂直方式吸附在Cu(111)表面. 当Cu(111)顶位垂直吸附H₂, 相比真空环境吸附, 溶剂化效应能够提高H₂吸附的稳定性, 但对H₂的活化没有明显影响. Cu(111)表面的桥位或三重穴位(hcp和fcc)垂直吸附H₂时, 溶剂化效应能明显提高H₂的活化程度, 但降低H₂的吸附稳定性; 在液体石蜡中, 当H₂平行Cu(111)表面吸附时, 溶剂化效应使H—H键断裂, 一个H原子吸附在fcc位, 另一个吸附在hcp位.

关键词: 密度泛函理论 CO分子 H₂分子 Cu(111)表面 溶剂化效应 吸附

收稿日期 2009-05-19 修回日期 2009-07-28 网络版发布日期 2009-09-16

通讯作者: 黄伟 Email: huangwei@tyut.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_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. 阎云; 韩峰; 黄建滨; 李子臣; 马季铭. 规则溶液理论应用于bola/SDS混合体系的研究[J]. 物理化学学报, 2002, 18(09): 830-834
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. 邹受忠, 高劲松, 李春增, 田中群. 拓宽银电极上SERS活性的研究电位范围[J]. 物理化学学报, 1995, 11(11): 1020-1025
8. 王新平, 叶兴凯, 吴越. 杂多酸在活性炭表面含氧基团上的化学键合作用[J]. 物理化学学报, 1995, 11(12): 1105-1109
9. 戴闽光, 缪蕊平. 在不同覆盖度下二组分气体在硅胶上的吸附规律[J]. 物理化学学报, 1995, 11(11): 968-972
10. 董俊华; 宋光铃; 林海潮; 曹楚南. 酸性介质中硫脲及衍生物在纯铁上的吸附作用[J]. 物理化学学报, 1996, 12(01): 34-38
11. 缪蕊平; 戴闽光. 活性炭的Zeta电位对其吸附达旦黄规律的影响[J]. 物理化学学报, 1996, 12(02): 173-176
12. 曹荣; 侯震山; 赵洪; 贺迪经; 陈文海. Pt-Ga/HZSM-5催化剂上丙烷芳构化[J]. 物理化学学报, 1996, 12(02): 114-118
13. 李丽霞; 王继扬. 苯三偶氮衍生物吸附在银溶液上的SERRS谱[J]. 物理化学学报, 1996, 12(03): 259-263
14. 周振华; 武小满; 王毅; 林国栋; 张鸿斌. 氢气在碳纳米管基材料上的吸附-脱附特性[J]. 物理化学学报, 2002, 18(08): 692-698
15. 周志有; 孙世刚; 陈声培; 司迪; 贡辉. 电化学原位步进扫描时间分辨显微镜FTIR反射光谱[J]. 物理化学学报, 2002, 18(11): 989-993
16. 关莉莉; 段连运; 谢有畅. Ca²⁺交换的几种分子筛的氮氙分离性能[J]. 物理化学学报, 2002, 18(11): 998-1004

扩展功能

本文信息

PDF(3028KB)

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

▶ CO分子

▶ H₂分子

▶ Cu(111)表面

▶ 溶剂化效应

▶ 吸附

本文作者相关文章

▶ 左志军

▶ 黄伟

▶ 韩培德

▶ 李志红

17. 毕只初; 廖文胜. CTAB在硅胶表面吸附引起的润湿性变化和模拟驱油[J]. 物理化学学报, 2002,18(11): 962-966
18. 木冠南; 刘光恒; 张瑾. 磷酸溶液中DDA在锌表面的吸附及其缓蚀作用[J]. 物理化学学报, 2002,18(11): 1023-1028
19. 王泽新; 陈守刚; 乔青安; 张文霞. 氧原子和羟基在Ni低指数表面的吸附动力学研究[J]. 物理化学学报, 2001,17(11): 1006-1012
20. 张现仁; 汪文川. 甲烷在中孔分子筛MCM-41中吸附的计算机模拟[J]. 物理化学学报, 2002,18(08): 680-685
21. 李勇慧; 黄建滨; 王传忠; 毛敏. 易水解类表面活性剂的表面与胶团性质[J]. 物理化学学报, 2001,17(11): 972-977
22. 吕鑫; 徐昕; 王南钦; 廖孟生; 张乾二. CO在Cu/ZnO上吸附的簇模型研究[J]. 物理化学学报, 1997,13(11): 1005-1009
23. 李惠娟; 蒋晓原; 郑小明. 钛铝载体的合成及负载CuO对NO催化性能研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(05): 584-589
24. 陈文斌; 陶向明; 赵新新; 谭明秋. 氢原子在Ti(0001)表面吸附的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(04): 445-450
25. 黄明强; 郝立庆; 周留柱; 顾学军; 王振亚; 方黎; 张为俊. 乙苯光氧化产生二次有机气溶胶的化学成分及反应机理分析[J]. 物理化学学报, 2006,22(05): 596-601
26. 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
27. 王周成; 黄龙门; 唐毅; 倪永金; 林昌健. 电化学方法在钛表面制备Co-YSZ/HAp纳米复合涂层[J]. 物理化学学报, 2006,22(05): 590-595
28. 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
29. 王升富; 牡丹; 邹其超. 磷钼钨杂多酸-L-半胱氨酸自组装膜电极的电化学性质 [J]. 物理化学学报, 2001,17(12): 1102-1106
30. 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
31. 王贵昌; 孙予罕; 钟炳. 金属态原子电负性的计算及应用(II)[J]. 物理化学学报, 1998,14(03): 204-209
32. 沈鹤柏; 周文骏; 杨海峰; 余沛涛. 寡聚脱氧核苷酸吸附状态随电位的变化[J]. 物理化学学报, 2002,18(06): 490-494
33. 赵震; 杨向光; 吴越. 含Cu复合氧化物对NO和CO吸附和活化的TPSR研究[J]. 物理化学学报, 1997,13(04): 344-350
34. 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
35. 魏无际; 付海涛; 李瑛; 朱一帆. AMT在青铜电极表面上吸附的SERS研究[J]. 物理化学学报, 2002,18(02): 152-155
36. 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
37. 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
38. 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
39. 周灵芝; 邓量; 寇元; 李宣文. 改性Y分子筛的酸碱性能及吸附性能的研究[J]. 物理化学学报, 2002,18(02): 142-146
40. 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
41. 贺绍光; 赵国玺. C₇FNa-Et₄NBr混合水溶液的表面吸附与胶团形成[J]. 物理化学学报, 1998,14(03): 261-266
42. 王贵昌; 孙予罕; 钟炳. 金属态原子电负性的计算及应用(I)[J]. 物理化学学报, 1998,14(01): 8-12
43. 林种玉; 傅锦坤; 吴剑鸣; 刘月英; 程琥. 贵金属离子非酶法生物还原机理初探 [J]. 物理化学学报, 2001,17(05): 477-480
44. 曹达鹏; 汪文川; 沈志刚; 陈建峰. 超临界甲烷在纳米材料中最适吸附压力的确定 [J]. 物理化学学报, 2001,17(10): 940-943
45. 吴德意. "中性"粘土矿物对非水溶液中有机碱的吸附[J]. 物理化学学报, 1997,13(11): 978-983
46. 朱建华; 徐杨; 王英; 周仕禄; 周春芳. 沸石分子筛吸附和催化降解亚硝胺[J]. 物理化学学报, 2004,20(08S): 946-952

47. 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
48. 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
49. 魏君华;吴立新;吴英;李国文.双分子膜上染料的吸附性质及对膜结构的影响[J]. 物理化学学报, 1997,13(12): 1072-1078
50. 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
51. 施财辉;蔡雄伟;陈燕霞;田中群;毛秉伟.拓宽具有原子分辨率的ECSTM研究至多晶电极表面[J]. 物理化学学报, 1997,13(12): 1061-1064
52. 木冠南, 杨春芬.活性炭自溶液吸附锌(II)离子及其配合物[J]. 物理化学学报, 1995,11(02): 157-161
53. 周仁贤, 周烈华, 朱波, 郑小明, 吕光烈.掺杂对Pd/Al₂O₃催化剂物相结构及表面氧化性质的影响[J]. 物理化学学报, 1995,11(01): 20-25
54. 辛梅, 翟润生, 张林虎, 郭燮贤.气相存在下CO在Pd上非线性脱附动力学研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(01): 38-45
55. 朱王步瑶, 杨百勤.碳氟链与碳氢链表面活性剂在固液界面上的吸附[J]. 物理化学学报, 1995,11(01): 15-19
56. 孙世刚, 卢国强.甲酸解离吸附的动力学和时间分辨FTIR特征[J]. 物理化学学报, 1995,11(01): 56-60
57. 李新生;辛勤;张慧;李峻;周建路;陈耀强;陈豫.CO和NO在Rh-V/SiO₂上吸附的红外光谱研究[J]. 物理化学学报, 1994,10(11): 1009-1014
58. 覃奇贤;朱龙章;刘淑兰;郭鹤桐.镍-碳化钨微粒复合电沉积机理的研究[J]. 物理化学学报, 1994,10(10): 892-896
59. 王泽新;张积树;于晓安;郝策;陈宗淇.Ni(510)台阶面对氢分子解离吸附的影响[J]. 物理化学学报, 1994,10(10): 915-920
60. 余励勤;朱高忠;温瑞武;张昌军;李宣文;刘兴云.镓改性ZSM-5沸石中镓活性中心的形成与表征[J]. 物理化学学报, 1994,10(07): 628-634
61. 王新平;叶兴凯;吴越.杂多酸的固载化研究(II)[J]. 物理化学学报, 1994,10(04): 303-307
62. 余励勤;王多才;李宣文;刘兴云;韩明.锌在ZnZSM-5沸石中的形态及其催化作用[J]. 物理化学学报, 1994,10(03): 247-253
63. 王泽新;郝策;张峰;张文霞;陈宗淇.氢原子在Pd(997)台阶面上的吸附和扩散[J]. 物理化学学报, 1994,10(02): 121-125
64. 何张飞;顾仁敖;胡晓焜.RuO₂-TiO₂固溶体表面阴离子吸附能力的SERS研究[J]. 物理化学学报, 1994,10(02): 168-171
65. 邓凤;杜有如;叶朝辉;孔渝华.用²³Na和²⁷Al固体核磁共振研究Na⁺在γ-Al₂O₃上的吸附状态[J]. 物理化学学报, 1994,10(01): 1-5
66. 田中群;李五湖;高劲松;毛秉伟.SERS谱峰对电极电位阶跃的不同响应速率的证据[J]. 物理化学学报, 1993,9(06): 721-723
67. 张玉亭;戴仲善.EDTA对均匀胶体粒子形成的影响[J]. 物理化学学报, 1993,9(06): 728-734
68. 邓俊琢;王弘立.Fe(110)面上CO化学吸附状态的吸附历史依赖关系[J]. 物理化学学报, 1993,9(05): 589-593
69. 张莹;许海波.CO在无定二元合金表面上化学吸附研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(01): 68-72
70. 艾俊哲;郭兴蓬;屈钧娥;陈振宇.咪唑啉酰胺在电偶电极表面的吸附行为[J]. 物理化学学报, 2005,21(10): 1096-1101
71. 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
72. 朱孟强;潘纲;李贤良;刘涛;杨玉环.EXAFS研究不同酸度下Zn²⁺在水锰矿表面的吸附和沉淀[J]. 物理化学学报, 2005,21(10): 1169-1173
73. 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
74. 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
75. 胡学铮;Vignes-Adler M.界面振荡现象[J]. 物理化学学报, 1997,13(10): 873-878
76. 吕玲玲;王永成.Au⁺(¹S, ³D)与N₂O(¹Σ⁺)反应机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(03): 265-269
77. 周亚平;周理.超临界氢在活性炭上的吸附等温线研究[J]. 物理化学学报, 1997,13(02): 119-127
78. 张敬来;王连宾;吴文鹏;曹泽星.线性簇合物SC_{2n}S²⁻(n = 1~12)电子吸收光谱[J]. 物理化学学报, 2004,20(12): 1428-1433
79. 耿志远;王永成;汪汉卿.锗烯X₂Ge(X=H, CH₃, 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

80. 徐灿;朱莉芳;高晨阳;曹娟.硅氧团簇(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
81. 黄飙;张家兴;李锐;申自勇;侯士敏;赵兴钰;薛增泉;吴全德.AI-C₆₀-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
82. 林宝辉;高芒来.一种二价季铵盐在粘土矿物上的吸附[J]. 物理化学学报, 2005,21(07): 808-812
83. 王琳;张路;楚艳苹;赵濂;俞稼镛.多支链烷基苯磺酸钠水溶液的表面性质[J]. 物理化学学报, 2004,20(12): 1451-1454
84. 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
85. 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
86. 刁兆玉;董晨初;王泽新;韩玲利;郝策.氧原子在Pt(s)-[n(111) \times (100)]型台阶面上的吸附和振动[J]. 物理化学学报, 2004,20(12): 1445-1450
87. 姜小明;张路;安静仪;赵濂;俞稼镛.多烷基苯磺酸钠水溶液的表面性质[J]. 物理化学学报, 2005,21(12): 1426-1430
88. 顾仁敖;沈晓英;王梅.2,2'-联吡啶与锌电极作用的表面增强拉曼光谱研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(10): 1117-1121
89. 周小顺;徐晓蜜;钟慧萍;龙腊生;黄荣斌;谢兆雄;郑兰荪;毛秉伟.金属-有机配合物分子在Au(111)表面的吸附行为[J]. 物理化学学报, 2005,21(09): 949-951
90. 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CS₂反应的计算研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(10): 1102-1107
91. 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
92. 方冉;耿志远;王永成;张兴辉;王冬梅;高立国;陈晓霞.锆烯X₂Ge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
93. 陈文斌;陶向明;赵新新;蔡建秋;谭明秋.吸附O的Cu(110)c(2 \times 1)表面原子结构和电子态[J]. 物理化学学报, 2005,21(10): 1086-1090
94. 张材荣;陈宏善;陈玉红;冯旺军;李维学;许广济;寇生中.Al₈P₈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
95. 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Zn²⁺在水锰矿表面的吸附和沉淀[J]. 物理化学学报, 2005,21(12): 1378-1383
96. 朱瑜;蒋刚;于桂凤;朱正和;王和义;傅依备.N₂在Pd金属表面的吸附行为[J]. 物理化学学报, 2005,21(12): 1343-1346
97. 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
98. 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
99. 陈禹银;刘凡;刘永春.硅胶自环己烷溶液中吸附苯甲酸和苯的计量置换吸附模型[J]. 物理化学学报, 2005,21(11): 1211-1216
100. 刘梅堂;牟伯中.狭缝滞留吸附性质的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(03): 355-358
101. 叶青;徐柏庆.柠檬酸溶胶-凝胶法制备的纳米Ce_{1-x}Mn_xO₂: 结构与晶相结构[J]. 物理化学学报, 2006,22(03): 345-349
102. 武刚;李宁;王殿龙;周德瑞. α -Al₂O₃与Co-Ni合金电化学共沉积动力学模型[J]. 物理化学学报, 2003,19(11): 996-1000
103. 徐昕;吕鑫;王南钦;张乾二.金属氧化物表面化学吸附和反应的量子化学簇模型方法研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(08S): 1045-1054
104. 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
105. 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
106. 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
107. 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
108. 邓琳, 逯丹凤, 祁志美.光波导分光光谱技术研究染料分子在玻璃表面的吸附特性[J]. 物理化学学报, 2009,25(12): 2481-2487
109. 王清高, 杨宗献, 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

110. 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
111. 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
112. 陈晓华, 樊永明, 曹春昱, 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
113. 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
114. 刁兆玉;董晨初;王泽新. 氧原子在Pt低指数面上的吸附和振动[J]. 物理化学学报, 2004,20(09): 1123-1128
115. 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
116. 钟起玲;张兵;章磊;杨熊元;黄芑. 乙醇在粗糙铂电极上解离吸附与氧化的原位SERS研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(09): 1163-1166
117. 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
118. 胡建明;李俊箴;李奕;章永凡;林伟. CN在 Pt(100)表面吸附的密度泛函研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(01): 27-32
119. 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
120. 贾红英;王泽新. CO吸附在过渡金属铂表面的微观动力学研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(02): 144-148
121. 曹江林;冷文华;张鉴清;曹楚南. 氢氧根离子在TiO₂薄膜电极上的吸附行为和光氧化动力学[J]. 物理化学学报, 2004,20(07): 735-739
122. 关莉莉;段连运;谢有畅. Li⁺交换的几种分子筛的氮氟分离性能[J]. 物理化学学报, 2004,20(07): 684-689
123. 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
124. 江凌;王贵昌;关乃佳;吴杨;蔡遵生;潘荫明;赵学庄;黄伟;李永旺;孙予罕;钟炳. CO在某些过渡金属表面吸附活化的DFT研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(05): 393-397
125. 赵世民;胡岳华;王淀佐;徐竞. N-(2-氨基乙基)-月桂酰胺浮选铝硅酸盐矿物的研究 [J]. 物理化学学报, 2003,19(06): 573-576
126. 徐艺军;李俊箴;章永凡;陈文凯. O₂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
127. 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
128. 刘洁翔;董梅;秦张峰;王建国. AIPO₄-5分子筛中二氯苯吸附的分子模拟[J]. 物理化学学报, 2004,20(07): 696-700
129. 赵立艳;王学恺;郭玉国;吴念祖;谢有畅. 亚甲基蓝在云母表面吸附状态的研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(10): 896-901
130. 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
131. 张占军;李建建;吴锡尊;张文智;蔡生民. 肾上腺素电氧化过程的快速扫描循环伏安研究 [J]. 物理化学学报, 2001,17(06): 542-546
132. 彭程;程璇;张颖;陈玲;范钦柏. 碳载Pt和PtRu催化剂的甲醇电氧化比较[J]. 物理化学学报, 2004,20(04): 436-439
133. 樊友军;范纯洁;甄春花;陈声培;孙世刚. Pt(111)单晶电极上乙二醇解离吸附反应动力学[J]. 物理化学学报, 2004,20(04): 382-385
134. 张彤;吴强;胡安;毛福明;杨学谦. 电子诱导脱附研究钨表面O₂对N₂的置换吸附[J]. 物理化学学报, 2003,19(08): 686-688
135. 邓国扬;Jes Henningsen. 光声法定量测定甲醇在常规材料表面上的吸附[J]. 物理化学学报, 1999,15(08): 764-768
136. 刁兆玉;巫洪章;王泽新;张学娜;张燕. 氧原子在Al(100)、(110)、(111)面上的吸附与振动[J]. 物理化学学报, 2008,24(03): 437-442
137. 苗月;袁宏宽;陈洪. 双钙钛矿Sr_{2-x}La_xCrReO₆的电子结构和磁性[J]. 物理化学学报, 2008,24(03): 448-452
138. 李元朴;蒋新. 反应物的相间分配对吸附相技术制备纳米CuO过程的影响[J]. 物理化学学报, 2008,24(03): 465-470
139. 胥倩;倪哲明;潘国祥;陈丽涛;刘婷. 水滑石限域空间中Cl⁻与H₂O的超分子作用[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 601-606
140. 吴阳;冯璐;张向东. C₆H₅-H...X分子间氢键的理论计算[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 653-658
141. 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

142. 李志伟;李香芝;许先芳;赵存元;陈六平.NaP₄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
143. 吕存琴;凌开成;尚贞锋;王贵昌.甲基、氨基和甲胺在清洁及C(N, O)改性的Mo(100)表面的吸附[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1366-1370
144. 郭亮;吴占松.超临界条件下甲烷在纳米活性炭表面的吸附机理[J]. 物理化学学报, 2008,24(05): 737-742
145. 王挺;蒋新;吴艳香.吸附相反应技术制备TiO₂的结晶过程以及光降解气相甲苯[J]. 物理化学学报, 2008,24(05): 817-822
146. 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
147. 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
148. 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
149. 曾余瑶;张秉坚.金属-有机骨架材料MOF-5的改进与吸附甲烷的巨正则蒙特卡罗模拟[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1493-1497
150. 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
151. 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
152. 陈志萍;高保娇;杨晓峰.胺基化PGMA交联微球对胆红素的吸附机理[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1417-1424
153. 杜晓明 吴尔冬.氢在沸石上的吸附行为[J]. 物理化学学报, 2009,25(03): 549-554
154. 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
155. 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
156. 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
157. 段玉华, 张开明, 伏义路.CO和NO在CuO及Cu₂O(110)表面吸附选择规律研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(05): 407-413
158. 李峻, 李新生, 周建略, 辛勤, 张慧, 陈耀强, 陈豫.CO和NO在Rh₂-V/SiO₂催化剂上共吸附的红外光谱[J]. 物理化学学报, 1995,11(05): 401-406
159. 洪功义, 黎乐民, 徐光宪, 林宏杰.单羰基钨的键合异构现象[J]. 物理化学学报, 1995,11(06): 481-483
160. 戴闽光, 缪蕊平.二组分气体在固体上吸附的研究(IV)[J]. 物理化学学报, 1995,11(07): 596-600
161. 李新生, 盛世善, 陈恒荣, 纪纯新, 张耀军, 辛勤.用XPS和H₂化学吸附研究钝化Mo₂N的还原作用[J]. 物理化学学报, 1995,11(08): 678-680
162. 姬泓巍, 张正斌, 刘莲生, 辛惠蓁.微量元素铜与伊利石界面相互作用的离子强度效应[J]. 物理化学学报, 1995,11(08): 694-698
163. 杨向光, 刘社田, 叶兴凯, 吴越, 盛世善, 熊国兴.复合氧化物LaMn_{1-x}Fe_xO₃ (x=0-1)的XPS研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(08): 681-687
164. 吕鑫, 徐昕, 王南钦, 张乾二.NO在NiO(100)面吸附的DV-X_a簇模型研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(09): 796-800
165. 张德恒.射频溅射制备的多晶ZnO膜表面氧的吸附和脱附[J]. 物理化学学报, 1995,11(09): 791-795
166. 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
167. 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
168. 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
169. 李越湘;吕功煊;李树本;董禄虎.光催化降解污染物制氢反应与原位红外表征[J]. 物理化学学报, 2003,19(04): 329-333
170. 李权;黄方千.邻二氯杂苯-水复合物的氢键结构与性质[J]. 物理化学学报, 2005,21(01): 52-56
171. 吴文娟;赖塔;郑康成;云逢存.抗癌性咪唑啉啉生物体的定量构效关系[J]. 物理化学学报, 2005,21(01): 28-32
172. 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

173. 甄春花; 范纯洁; 谷艳娟; 陈声培; 孙志刚. 碱性介质中甘氨酸在纳米金膜电极上的吸附和氧化[J]. 物理化学学报, 2003,19(01): 60-64
174. 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
175. 陆安慧; 李文翠; 郑经堂. 分子筛型PAN-ACF制备及表面结构的XPS研究[J]. 物理化学学报, 2001,17(03): 216-221
176. 范山湖; 孙振范; 郭泉周; 李玉光. 偶氮染料吸附和光催化氧化动力学[J]. 物理化学学报, 2003,19(01): 25-29
177. 沈少来; 唐景昌; 曹松; 汪雷. Cl/GaAs(111)表面近边X射线吸收精细结构的多重散射研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(11): 1054-1058
178. 邵会波; 于化忠; 程广军; 张浩力; 刘忠范. 偶氮苯硫醇衍生物自组装成膜过程考察[J]. 物理化学学报, 1998,14(09): 846-851
179. 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
180. 吕海港; 黎乐民. 表观价态异常分子EuS₂和Eu₂S的泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(05): 413-418
181. 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
182. 马中义; 杨成; 董庆年; 魏伟; 李文怀; 孙子罕. CO₂/H₂在不同形态ZrO₂上的吸附行为[J]. 物理化学学报, 2005,21(02): 225-228
183. 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
184. 胡学铮; 刘俊康; 虞学俊; 刘松琴. 界面不稳定现象与相间迁移[J]. 物理化学学报, 1998,14(11): 1053-1056
185. 马厚义; 李桂秋; 陈慎豪. 连续电荷传递反应的阻抗谱与电极反应机制的关系[J]. 物理化学学报, 1998,14(09): 833-840
186. 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
187. 刘梅堂; 牟伯中; 刘洪来; 胡英. 修正的格子空间的密度泛函理论在狭缝中的应用[J]. 物理化学学报, 2004,20(06): 668-672
188. 朱王步瑶; 吴立军; 黄建滨; 何煦. 十一烯酸钠与十一酸钠水溶液的表面化学[J]. 物理化学学报, 1998,14(11): 1025-1029
189. 谭业邦; 张黎明; 李卓美. 两性纤维素接枝共聚物在膨润土上的吸附[J]. 物理化学学报, 1998,14(12): 1112-1115
190. 贾玉香; 郭向云. 超临界流体中CO和H₂吸附过程的Monte Carlo模拟[J]. 物理化学学报, 2005,21(03): 306-309
191. 陈建刚; 相宏伟; 董庆年; 王秀芝; 孙子罕. 钴基费-托合成催化剂上CO、H₂的吸附行为[J]. 物理化学学报, 2001,17(02): 161-164
192. 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
193. 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
194. 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
195. 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
196. 郭向丹; 黄世萍; 滕加伟; 谢在库. 水在Na_nZSM-5型分子筛中吸附的研究: 分子模拟[J]. 物理化学学报, 2006,22(03): 270-274
197. 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
198. 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
199. 杨树武; 纪纯新; 徐江; 阎卫宏; 张耀军; 应品良; 辛勤. γ-Mo₂N催化剂上H₂及NO吸附性质的TPD-MS研究[J]. 物理化学学报, 1996,12(12): 1084-1089
200. 蔡文斌; 任斌; 毛秉伟; 全朝; 田中群. 几种粗糙铂电极上表面拉曼增强效应初探[J]. 物理化学学报, 1996,12(12): 1071-1073
201. 李海洋; 鲍世宁; 张训生; 范朝阳; 冯小松; 徐亚伯. CO在Cs/Ru(1010)表面上吸附的ARUPS研究[J]. 物理化学学报, 1996,12(11): 1001-1005
202. 张文霞; 王泽新. Ni(115)台阶面对氢表面微观动力学行为的影响[J]. 物理化学学报, 1996,12(10): 910-915
203. 张积树; 张文霞; 王泽新. 氢原子在钼低指数表面上的吸附和扩散[J]. 物理化学学报, 1996,12(09): 773-779

204. 毛传斌;周廉;孙祥云.Bi系超导体原始粉末的化学吸附行为[J]. 物理化学学报, 1996,12(08): 693-697
205. 钱建刚;顾惕人.醋酸十二铵的吸附和SiO₂悬浮液的稳定性[J]. 物理化学学报, 1996,12(08): 698-703
206. 郭军;矫庆泽;吕慧娟;蒋大振;杨光辉;闵恩泽.几种杂多阴离子柱撑水滑石的合成与吸附行为[J]. 物理化学学报, 1996,12(06): 573-576
207. 罗胜成;桂琳琳;唐有祺.MoO₃/TiO₂-Al₂O₃对H₂S吸附的XPS研究[J]. 物理化学学报, 1996,12(04): 341-345
208. 孙科举 李微雪 冯兆池 李灿.Fe-ALPO₄-5分子筛的共振拉曼光谱[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 606-610
209. 曹吉林 刘振路 刘秀伍.铁掺杂方沸石的合成及其磁化[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 707-712
210. 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
211. 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
212. 樊友军 甄春花 陈声培 孙世刚.阴离子特性吸附和Pt(111)电极表面结构对乙二醇解离吸附动力学的影响[J]. 物理化学学报, 2009,25(05): 999-1003
213. 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_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
214. 王丽娟 刘够生 宋兴福 于建国.十二烷基吗啉选择性吸附氯化钠的分子模拟[J]. 物理化学学报, 2009,25(05): 963-969
215. 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
216. 郝志显 赵海涛 王利军 解丽丽 田震 李庆华.微波辐射法合成SAPO-5分子筛中硅铝比对产物结晶度和甲苯吸附性能的影响[J]. 物理化学学报, 2009,25(05): 829-834
217. 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
218. 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
219. 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
220. 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
221. 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
222. 李凌杰, 姚志明, 雷惊雷, 徐辉, 张胜涛, 潘复生.十二烷基苯磺酸钠在AZ31镁合金表面的吸附及其缓蚀作用[J]. 物理化学学报, 2009,25(07): 1332-1336
223. 庞先勇, 邢斌, 王贵昌, YOSHITADA Morikawa, JUNJI Nakamura.HCOO在Cu(110)、Ag(110)和Au(110)表面的吸附[J]. 物理化学学报, 2009,25(07): 1352-1356
224. 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, 0,(): 0-0
225. 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, 0,(): 0-0
226. 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
227. 陈善俊;戴伟;罗江山;唐永建;王朝阳;孙卫国.甲烷在AFS型分子筛中的吸附模拟[J]. 物理化学学报, 2009,25(02): 285-290
228. 肖谷清;谢祥林;徐满才.疏水/亲水大孔PDVB/PAEMIPN 树脂对香兰素的吸附性能[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 97-102
229. 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
230. 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
231. 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
232. 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
233. 刘以良 杨缤维 蒋刚.Ni(111)表面上N原子对C原子电子结构的影响[J]. 物理化学学报, 2009,25(03): 435-440
234. 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

235. 刘亚明 戴宪起 姚树文 侯振雨.H吸附诱发ZnO(10-10)表面的金属化[J]. 物理化学学报, 2008,24(12): 2293-2296
236. 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
237. 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
238. 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
239. 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
240. 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
241. 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
242. 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
243. 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
244. 陈新; 李瑛; 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
245. 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
246. 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
247. 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
248. 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
249. 杜冰 江奇 赵晓峰 林孙忠 幕佩珊 赵勇. 基于静电吸附作用制备PPy/CNTs复合材料[J]. 物理化学学报, 2009,25(03): 513-518
250. 徐群杰; 朱律均; 曹为民; 万宗跃; 周国定; 林昌健. 绿色缓蚀剂聚天冬氨酸对铜的缓蚀性能与吸附行为[J]. 物理化学学报, 2008,24(09): 1724-1728
251. 范闽光 李斌 张飞跃 李望良 邢建民 刘自力. 铜离子在CuLaHY分子筛中的分布与吸附脱硫性能[J]. 物理化学学报, 2009,25(03): 495-501
252. 王洪国; 姜恒; 徐静; 孙兆林; 张晓彤; 朱赫礼; 宋丽娟. 苯和1-辛烯对Ce(IV)Y分子筛选择性吸附脱硫的影响[J]. 物理化学学报, 2008,24(09): 1714-1718
253. 张健 高保娇 卢金华. 水杨酸型螯合树脂对Fe(III)离子的螯合吸附行为[J]. 物理化学学报, 2009,25(03): 532-538
254. 周天华; 赵剑曦. 不对称Gemini表面活性剂在气/液界面的吸附动力学[J]. 物理化学学报, 2007,23(07): 1047-1052
255. 刘海峰; 闫华; 刘志勇; 王少龙. 三氯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
256. 岳巧红; 邵晓红; 曹达鹏. 高比表面活性碳微球分离H₂中少量CO₂[J]. 物理化学学报, 2007,23(07): 1080-1084
257. 任云鹏; 鲁玉祥; 娄琦. CO在Pt低指数面上吸附行为的理论研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(11): 1728-1732
258. 庞先勇; 任瑞鹏; 薛丽琴; 王贵昌. Cu(100)表面HCOO对CO₂吸附的稳定作用[J]. 物理化学学报, 2007,23(07): 1109-1112
259. 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
260. 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
261. 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
262. 王罗新; 刘勇; 庾新林; 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
263. 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
264. 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

265. 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
266. 陈昕;张漪丽;苏育华;孟文华;谢青季;姚守拙.镀金和碳纳米管修饰金电极上吸附态葡萄糖氧化酶比活性的EQCM研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(08): 1201-1206
267. 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
268. 朱晨华;沈鹤柏;徐瑞云;王皓月;韩继美.磁性壳聚糖微球对牛血清白蛋白的吸附性能[J]. 物理化学学报, 2007,23(10): 1583-1588
269. 张天永;范巧芳;曾淼;王正;夏文娟;池立峰.耐晒大红BBN与表面活性剂双组分光催化降解[J]. 物理化学学报, 2007,23(11): 1803-1807
270. 叶超;巩前明;卢方平;梁吉.中分子毒素在碳纳米管上的吸附[J]. 物理化学学报, 2007,23(09): 1321-1324
271. 刘宇林;李丽霞;陈晓红;宋怀河.有序中孔炭的电化学储氢性能[J]. 物理化学学报, 2007,23(09): 1399-1404
272. 王挺;蒋新;李希.吸附相反应技术用于不同载体表面纳米 TiO_2 的制备[J]. 物理化学学报, 2007,23(09): 1375-1380
273. 张辉;郭玉鹏;刘艳华;赵旭;邓艳辉;王子忱;江雷.稻壳制备多孔炭对肌酐的吸附[J]. 物理化学学报, 2007,23(06): 825-829
274. 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
275. 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
276. 陈健;黄政仁;董绍明 江东亮.用热分析技术测定碳化硅粉体对聚乙二醇的吸附量[J]. 物理化学学报, 2007,23(06): 926-928
277. 李薇;潘纲;陈灏;张美一;何广智;李晋;杨玉环.温度对 Zn(II)-TiO_2 体系吸附可逆性的影响[J]. 物理化学学报, 2007,23(06): 807-812
278. 杜晓明;吴二冬.应用吸附势理论研究氢在沸石上的超临界吸附[J]. 物理化学学报, 2007,23(06): 813-819
279. 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
280. 李磊;桑革;张鹏程;蒋刚. $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ 阻氢微观机制研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(12): 1912-1916
281. 曹吉林;邢冬强;刘秀伍;谭朝阳.超声波合成磁性4A沸石分子筛[J]. 物理化学学报, 2007,23(12): 1893-1898
282. 汪剑;高保娇;郭浩鹏.接枝微粒PMAA/ SiO_2 在水介质中对杀虫剂抗蚜威的吸附机理[J]. 物理化学学报, 2007,23(12): 1905-1911
283. 周利民;王一平;黄群武;刘峙嵘.改性磁性壳聚糖微球对 Cu^{2+} 、 Cd^{2+} 和 Ni^{2+} 的吸附性能[J]. 物理化学学报, 2007,23(12): 1979-1984
284. 刘振林;屠兢;伏义路.负载Pd催化剂的表面碱性和NO吸附关系[J]. 物理化学学报, 2000,16(08): 753-757
285. 吴广新;张捷宇;吴永全;李谦;周国治;包新华.H在Mg(0001)表面吸附、解离和扩散的第一性原理研究[J]. 物理化学学报, 2008,24(01): 55-60
286. 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
287. 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
288. 徐群杰;万宗跃;印仁和;朱律均;曹为民;周国定;林昌健.3-氨基-1,2,4-三氮唑自组装膜对黄铜的缓蚀作用[J]. 物理化学学报, 2008,24(01): 115-120
289. 赵新新;宓一鸣. Cu(001) 表面CO吸附单层结构和电子态的第一性原理研究[J]. 物理化学学报, 2008,24(01): 127-132
290. 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
291. 吴启辉;甄春花;周志有;孙世刚.Sb在Au电极上不可逆吸附的电化学过程[J]. 物理化学学报, 2008,24(02): 201-204
292. 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
293. 纪永军;武海顺;张富强;贾建峰. $(\text{MN})_n\text{H}_m$ ($\text{M}=\text{Ga}, \text{In}; n=1-4; m=1, 2$)团簇的结构与稳定性[J]. 物理化学学报, 2008,24(02): 257-262
294. 鲁照玲;邱于兵;郭兴蓬.pH值对十二胺在碳钢表面的吸附行为及缓蚀机理的影响[J]. 物理化学学报, 2008,24(02): 243-249
295. 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-

296. 张秀娟;刘瑞泉;王献群.碱性介质中POTAS和PDTAS对铜的缓蚀作用[J]. 物理化学学报, 2008,24(02): 338-344
297. 赵会玲;胡军;汪建军;周丽绘;刘洪来.介孔材料氨基表面修饰及其对CO₂的吸附性能[J]. 物理化学学报, 2007,23(06): 801-806
298. 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
299. 陈鑫;陈文斌;尚学府;陶向明;戴建辉;谭明秋.氢原子在Ru(0001)表面的化学吸附[J]. 物理化学学报, 2007,23(06): 861-866
300. 潘慎敏;周芹;赵发琼;曾百肇.m-4-m型Gemini表面活性剂对铂电极上亚甲蓝吸附溶出伏安行为的影响[J]. 物理化学学报, 2007,23(06): 964-968
301. 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
302. 陈玉平;吕玲红;邵庆;黄亮亮;陆小华.烷烃在丝光沸石型分子筛中吸附和扩散行为[J]. 物理化学学报, 2007,23(06): 905-910
303. 李思殿;郭巧凌;苗常青;任光明.含平面配位碳的过渡金属烃配合物M_nH_nC密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(05): 743-745
304. 孙希媛;孔凡杰;蒋刚;朱正和.水蒸汽在Pd表面吸附的热力学[J]. 物理化学学报, 2007,23(05): 651-654
305. 孙岳明;杨萍;曹爱年;张远.NO、CO和O₂在铜离子分子筛上吸附的理论研究[J]. 物理化学学报, 2001,17(08): 761-764
306. 郜洪文;訾言勤;李玉成.多色蓝在核酸分子上的Langmuir聚集吸附[J]. 物理化学学报, 2002,18(06): 540-544
307. 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
308. 周健;汪文川.Gibbs系综Monte Carlo模拟甲烷的吸附平衡[J]. 物理化学学报, 2001,17(08): 723-727
309. 陈禹银;刘凡.硅胶自水溶液中吸附丙酸和丁酸的计量置换吸附模型 [J]. 物理化学学报, 2002,18(01): 62-65
310. 徐丽娜;徐鸿飞;周凯常;徐爱群;岳增全;顾宁;张海黔;刘举正;陈坤基.自组装膜吸附钯的化学镀前活化研究[J]. 物理化学学报, 2002,18(03): 284-288
311. 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
312. 马先勇;姚思德;王文锋;左志华;林念芸.胞嘧啶水溶液体系辐解的瞬态产物研究[J]. 物理化学学报, 1997,13(09): 833-837
313. 牛林;林海潮;曹楚南;宋光铃.苯并三氮唑对18-8钢应力腐蚀开裂的缓蚀作用[J]. 物理化学学报, 1997,13(09): 802-807
314. 张健;张黎明;李卓美;谢续明;李健;罗平亚.疏水化水溶性两性纤维素接枝共聚物与粘土的相互作用 [J]. 物理化学学报, 2002,18(04): 315-320
315. 叶树集;陈鸣才;胡红旗;郭元强.超临界二氧化碳中聚氨酯吸附小分子的影响因素[J]. 物理化学学报, 2000,16(04): 345-350
316. 张黎征;魏芳;赵新生;杨华铨.NAD类似物吸附电极的循环伏安研究[J]. 物理化学学报, 2000,16(04): 370-373
317. 刘振宇;郑经堂;王茂章;张碧江.PAN基活性炭纤维的氮吸附研究[J]. 物理化学学报, 2001,17(07): 594-599
318. 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
319. 蔡永;朱熙文;颜旻;陈永泰;高克林.过渡金属团簇M⁺₂(M=Fe、Co、Ni)与CO的化学反应[J]. 物理化学学报, 1999,15(02): 162-166
320. 计明娟;杨鹏程;叶学其;侯廷军;徐筱杰.模型分子筛对水分子的吸附[J]. 物理化学学报, 2000,16(06): 487-490
321. 李海洋;鲍世宁;杨东;何丕模;徐亚伯;刘凤琴;易布拉欣.奎热西;钱海杰.K/Ru(1010)表面上的CO-4a₁轨道对称性确定[J]. 物理化学学报, 2000,16(05): 437-440
322. 张耀君;辛勤.微量热法研究γ-Mo₂N催化剂表面氢的微分吸附热[J]. 物理化学学报, 2000,16(05): 464-467
323. 傅锦坤;刘月英;古萍英;汤丁亮;林种玉;姚炳新;翁绳周.乳酸杆菌A09吸附还原Ag(I)的谱学表征[J]. 物理化学学报, 2000,16(09): 779-782
324. 张路;罗澜;赵滩;俞稼镛.表面活性剂亲水-亲油能力对动态界面张力的影响 [J]. 物理化学学报, 2001,17(01): 62-65
325. 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

326. 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
327. 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
328. 赵国玺; 阳振乐; 朱王步瑶. 10-十一烯酸衍生物混合体系的表面化学[J]. 物理化学学报, 1997, 13(09): 773-779
329. 向娟; 吴秉亮; 陈胜利. 甲酸在铂电极上吸附氧化机理研究[J]. 物理化学学报, 2000, 16(10): 906-911
330. 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
331. 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
332. 朱丽荔; 侯廷军; 徐筱杰. ITQ-1 分子筛中二甲苯吸附特征的计算机模拟[J]. 物理化学学报, 2000, 16(11): 981-986
333. 郭子成; 孙淑巧; 李建军; 陈贤拓. 钙矾石吸附水的模型及等温式[J]. 物理化学学报, 2000, 16(07): 667-671
334. 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
335. 温斌; 何鸣元; 宋家庆; 宗保宁; 舒兴田. 铜铈协同作用对 $CuCeMgAl(O)$ 催化活性的影响[J]. 物理化学学报, 2000, 16(05): 402-404
336. 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
337. 曹亚; 李惠林. 高分子表面活性剂在固/液界面上的吸附形态[J]. 物理化学学报, 1999, 15(10): 895-899
338. 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
339. 孙德坤; 鲍书林; 徐亲; 须沁华. 高硅 Y 沸石的研制及吸附热力学性质[J]. 物理化学学报, 1999, 15(11): 1041-1044
340. 叶树集; 陈鸣才; 黄玉惠; 丛广民. 超临界二氧化碳中聚氨酯对小分子的吸附作用[J]. 物理化学学报, 2000, 16(02): 145-152
341. 曹亚; 李惠林; 张爱民. CMC 型高分子表面活性剂在固/液界面上的吸附[J]. 物理化学学报, 1999, 15(10): 952-955
342. 高作宁; 力虎林. 苯肼- α -环糊精包合物吸附行为的光谱与电化学研究[J]. 物理化学学报, 1999, 15(11): 1005-1010
343. 曹达鹏; 汪文川. 模拟吸附在狭缝微孔中的丙烷的微观结构[J]. 物理化学学报, 1999, 15(07): 581-587
344. 韩国彬; 吴金添; Vignes-Adler M. 起泡剂 $C_{12}E_8$ 的表面动力学性质[J]. 物理化学学报, 1999, 15(04): 327-332
345. 仲崇民; 王德峰; Takashi Ushikubo; Keisuke Wada. 甲醇、水及乙烯在氧化铈薄膜上吸附行为研究[J]. 物理化学学报, 1998, 14(03): 219-225
346. 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
347. 钟起玲; 王敦清; 刘峰名; 粟晓琼; 施财辉; 田中群. 硫脲与多种阴离子共吸附行为的拉曼光谱研究[J]. 物理化学学报, 1998, 14(06): 562-568
348. 于安池; 李密; 赵新生. TIRF 研究罗丹明-640 在石英表面的吸附[J]. 物理化学学报, 1998, 14(08): 682-685
349. 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计算[J]. 物理化学学报, 2001, 17(01): 15-22
350. 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
351. 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
352. 符德学; 缪绢; 王云燕; 舒余德. Na_2SeO_3 在 Fe 电极上还原和吸附机理[J]. 物理化学学报, 2002, 18(10): 956-960
353. 周丹红; 王玉清; 贺宁; 杨刚. $Cu(I)$, $Ag(I)$ /分子筛化学吸附脱硫的 n-络合机理[J]. 物理化学学报, 2006, 22(05): 542-547
354. 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研究[J]. 物理化学学报, 2002, 18(09): 802-807
355. 丁运生; 王僧山; 查敏; 王志刚. 有机阳离子 $[C_{18}mim]^+$ 在蒙脱土层间的物理化学吸附与聚集状态* [J]. 物理化学学报, 2006, 22(05): 548-551
356. 蒋化; 赵璧英; 谢有畅. 水对锂交换低硅铝比八面沸石吸附性能的影响 [J]. 物理化学学报, 2002, 18(07): 577-580
357. 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

358. 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
359. 朱建华;徐杨;周春芳;周仕禄;马丽丽.亚硝酸胺在小微孔沸石上的“嵌入式”吸附探讨[J]. 物理化学学报, 2003,19(03): 221-225
360. 郑青榕;顾安忠;林文胜;李明;鲁雪生.氢在多壁碳纳米管上吸附行为研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(02): 139-143
361. 黄贱苟;徐满才;李海涛;史作清;何炳林.非水体系中大孔交联酰胺基树脂的吸附热力学[J]. 物理化学学报, 2003,19(03): 208-211
362. 赵凯元;王敌清.聚苯胺修饰超微盘电极上镉(II)的表面络合吸附波[J]. 物理化学学报, 2003,19(08): 727-732
363. 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
364. 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
365. 曾勇平;居沈贵;邢卫红;陈长林.分子模拟噻吩、苯、正己烷混合物在MFI和MOR中的吸附行为[J]. 物理化学学报, 2007,23(03): 343-348
366. 侯思聪;刘凌涛;寇元.低温甲烷氧化偶联Li-ZnO/La₂O₃催化剂[J]. 物理化学学报, 2006,22(08): 1040-1042
367. 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
368. 吴锡尊;王新;张文智.肾上腺素电化学氧化的交流阻抗研究[J]. 物理化学学报, 1993,9(05): 709-712
369. 刘朝纲.气相色谱法测定气固表面的吸附停留时间[J]. 物理化学学报, 1993,9(04): 489-494
370. 周革;陈诵英;彭少逸.可逆与不可逆吸附CO在合成甲醇反应中的作用[J]. 物理化学学报, 1993,9(04): 561-564
371. 李南强;徐友宣.桑色素极谱行为的研究[J]. 物理化学学报, 1993,9(02): 175-180
372. 李新生;侯震山;辛勤;郭燮贤.硫化态Ru-Co-Mo/Al₂O₃加氢脱硫催化剂的表征[J]. 物理化学学报, 1993,9(01): 63-69
373. 欧锦如;郁蕴璐;林炳承;林炳昌.非线性色谱保留时间与进样量关系的实验分析[J]. 物理化学学报, 1993,9(01): 111-116
374. 孙世刚;杨东方;田昭武.酸性介质中1,2-丙二醇在铂电极上吸附和氧化过程的原位FTIR反射光谱研究[J]. 物理化学学报, 1992,8(01): 59-63
375. 薛毅;杜有如;叶朝辉;孔渝华.吸附在活性炭上的二氧六环类固相和类液相性质的NMR研究[J]. 物理化学学报, 1992,8(01): 113-116
376. 朱(王步)瑤;封力.表面活性剂在固/液界面吸附理论的新进展[J]. 物理化学学报, 1992,8(02): 153-155
377. 周亚平;Lentz, H..压汞法测量玻璃毛细孔中的水和正癸烷[J]. 物理化学学报, 1992,8(01): 109-112
378. 李丽霞;刘传朴;胡永峰;顾月姝;印永嘉;屈松生.四苯基吡吩化合物的表面增强喇曼散射[J]. 物理化学学报, 1992,8(02): 243-246
379. 周利民;黄一平;刘峙嵘;黄群武.羧甲基化壳聚糖-Fe₃O₄纳米粒子的制备及对Zn²⁺的吸附行为[J]. 物理化学学报, 2006,22(11): 1342-1346
380. 肖丰收;应品良;辛勤;郭燮贤.Co-Mo/Al₂O₃和Ru-Co-Mo/Al₂O₃催化剂的不同表面钴中心表征[J]. 物理化学学报, 1992,8(03): 321-325
381. 冯(言贝)民.乙腈、苯基氰在Cu(111)与Pd(100)表面上的吸附与反应[J]. 物理化学学报, 1992,8(03): 313-320
382. 李林峰;顾宪章;曹轩;廖沐真;吴国是.铝原子簇上化学吸附的尺度效应及其理论模型[J]. 物理化学学报, 1992,8(03): 376-382
383. 肖天存;安立敦;张兵;蒋致诚.硫物种对负载型钨催化剂上氢吸附性质的影响[J]. 物理化学学报, 1992,8(04): 470-475
384. 陶祖贻;张保林;盛芬玲.低浓度下离子交换树脂吸附氨基酸的机理[J]. 物理化学学报, 1992,8(04): 464-469
385. 邓昭镜;李声泽;曾祥吉.La(OH)₃凝聚的形态和粒径分布研究[J]. 物理化学学报, 1992,8(04): 487-492
386. 高岚;阎海科.量热法测定固体的比表面[J]. 物理化学学报, 1992,8(04): 563-566
387. 裴站芬;刘兴云;李宣文.高硅Y沸石“二次孔”结构的物理吸附法研究[J]. 物理化学学报, 1992,8(05): 613-618
388. 孙世刚;王津建;穆纪千.甲酸在Pt(100)单晶电极表面解离吸附过程的动力学[J]. 物理化学学报, 1992,8(06): 732-735

389. 邵淑敏; 席光康; 王君容; 李胜利; 杨学柱; 王金合; 周志强; 贺添喜; 于宝霞. 甲烷在Ni表面及La薄膜上激活解离化学吸附[J]. 物理化学学报, 1992,8(06): 767-771

390. 周金渭; 申洁如. 水分散体系中AgBr比表面的测定及晶体习性的确定[J]. 物理化学学报, 1991,7(01): 110-112

391. 潘然; 杨忠志. C(2×2)S/Fe(001)吸附体系的SCF-X_a-MS研究[J]. 物理化学学报, 1991,7(03): 294-299

392. 韩明勇; 刘旺; 王德军; 肖良质; 李铁津. 酞菁锰与表面吸附的NO₂之间的电荷转移相互作用研究[J]. 物理化学学报, 1991,7(03): 349-353

393. 朱王步瑶; 赵国玺. 对称正、负离子表面活性剂的胶团化和表面吸附自由能[J]. 物理化学学报, 1991,7(04): 385-389

394. 李强; 李开喜; 孙国华; 范慧; 谷建宇. 一种新型氧化还原电解液电化学电容器体系[J]. 物理化学学报, 2006,22(12): 1445-1450

395. 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

396. 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

397. 裘凯栋; 黎维彬. 水溶液中六价铬在碳纳米管上的吸附[J]. 物理化学学报, 2006,22(12): 1542-1546

398. 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

399. 李新生; 侯震山; 魏昭彬; 辛勤. 钴、钕在加氢脱硫催化剂中的助剂作用[J]. 物理化学学报, 1991,7(06): 673-680

400. 徐柏庆; 梁娟; 郑禄彬; 山口力; 田部浩三. ZrO₂催化剂上吸附甲酸的TPD和IR研究[J]. 物理化学学报, 1991,7(06): 712-715

401. 孟明; 夏凌燕; 郭丽红. 甘氨酸在高岭土表面的吸附和热缩合反应[J]. 物理化学学报, 2007,23(01): 32-36

402. 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

403. 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

404. 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

405. 徐丛, 李薇, 潘纲. Zn(II)/α-FeOOH 吸附体系的固体浓度效应[J]. 物理化学学报, 2009,25(09): 1737-1742

406. 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

407. 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

408. 廖强强, 岳忠文, 朱忠伟, 王毅, 张羽, 周国定, 周琪. 吡咯烷二硫代氨基甲酸铵自组装膜对铜的缓蚀作用[J]. 物理化学学报, 2009,25(08): 1655-1661

409. 卢月美, 巩前明, 梁吉. 碳纳米管/活性炭复合微球的制备及其对VB₁₂的吸附应用[J]. 物理化学学报, 2009,25(08): 1697-1702

410. 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

411. 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

412. 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

413. 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

414. 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

415. 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

416. 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

417. 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

418. 杜晓明, 吴尔冬. 氢气在A和X型沸石上超临界吸附的格子密度函数模型[J]. 物理化学学报, 2009,25(09): 1823-1828

419. 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

420. 詹卫伸, 潘石, 李源作, 陈茂笃. 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
421. 宋冰蕾, 赵剑曦. 光敏季铵盐Gemini表面活性剂a4-6-m在气/液界面的吸附[J]. 物理化学学报, 2009,25(10): 2020-2025
422. 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
423. 孙小莉, 曾庆轩, 冯长根. 多胺型阴离子交换纤维吸附铬(VI)的动力学[J]. 物理化学学报, 2009,25(10): 1951-1957
424. 赵新新, 陶向明, 宓一鸣, 陈成, 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
425. 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
426. 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
427. 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
428. 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
429. 陈锦灿, 陈兰美, 廖思燕, 郑康成. 抗癌性钌配合物[HL][trans-Ru^{II}Cl₄L₂](L=2-NH₂-5-Me-STz)的水解机理[J]. 物理化学学报, 2009,25(12): 2543-2550
430. 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
431. 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, 0,(): 0-0
432. 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, 2009,25(11): 2350-2356