

原子簇离子解离统计分布的动力学研究

张强,黄荣彬,刘朝阳,郑兰荪

固体表面物理化学国家重点实验室, 厦门大学化学系, 厦门 361005

摘要：

对激光产生的原子簇离子, 通过质量选择, 可以对选出的原子簇离子进行碰撞诱导离解或光解离研究, 在对实验记录的解离质谱的分析中发现, 同一系列碎片离子的相对丰度分布符合一定的统计规律, 不同的统计分布形式对于不同的解离机理, 通过求解解离反应的动力学方程, 得到碎片离子统计从而可以通过分析解离质谱中碎片离子的统计分布, 探讨相应的原子簇离子解离反应的机理。

关键词：解离 原子簇离子 统计分布 动力学

收稿日期 1995-06-06 修回日期 1995-08-04 网络版发布日期 1996-03-15

通讯作者：郑兰荪 Email:

本刊中的类似文章

1. 朱志昂; 黄小群; 陈荣悌. 铜(II)与四(间甲基)苯基卟啉镍(II)取代反应动力学[J]. 物理化学学报, 1993, 9(05): 635-641
2. 席海海; 高亚平; 孙小强; 殷开梁; 陈正隆. 缺电子联吡啶环蕃与富电子苯链接的结合能[J]. 物理化学学报, 2009, 25(02): 377-381
3. 程兆年; 丁弘; 雷雨; 许立. RbCl溶液的分子动力学模拟研究[J]. 物理化学学报, 1995, 11(10): 890-895
4. 周培骥; 谢昌礼; 刘义; 屈松生; 朱英国; 周涵韬. 量热法研究线粒体代谢的热力学和动力学行为[J]. 物理化学学报, 1995, 11(11): 1026-1030
5. 胡照林; 唐宇虹. 嵌入定理和BZ反应机理研究[J]. 物理化学学报, 1995, 11(12): 1057-1061
6. 刘义; 谢卫红; 谢昌礼; 屈松生. 细菌有限生长热动力学研究[J]. 物理化学学报, 1996, 12(02): 156-158
7. 李全新; 冉勇; 盛六四; 陈从香; 高辉; 俞书勤; 张允武; 马兴华. 二氯甲烷同步辐射光电离的动力学研究[J]. 物理化学学报, 1996, 12(02): 136-140
8. 史扬; 高振; 朱起鹤; 孔繁放. 气相中原子分子簇动力学 II. 碳簇形成动力学[J]. 物理化学学报, 1996, 12(03): 208-212
9. 史扬; 高振; 朱起鹤; 孔繁放. 气相中原子分子簇动力学 I. 动力学的基本模型[J]. 物理化学学报, 1996, 12(03): 196-201
10. 孙利鹏; 马骅; 王沂轩; 刘成卜. CF₃C(O)F水合作用的热力学和动力学理论研究[J]. 物理化学学报, 1996, 12(04): 361-364
11. 林娟娟; 王舜; 高庆宇; 高碘酸盐-亚硫酸盐反应体系的复杂动力学[J]. 物理化学学报, 2002, 18(09): 817-820
12. 马玉涛; 夏树屏; 高世扬. MgO•3B₂O₃•18MgSO₄•H₂O过饱和溶液结晶动力学[J]. 物理化学学报, 2001, 17(11): 1021-1026
13. 邓洁; 史鸿运; 张云黔; 电刷镀含钛合金非晶态镀层的晶化动力学(II)[J]. 物理化学学报, 1997, 13(03): 283-287
14. 张洪林; 于秀芳; 张刚; 钟、镁离子对淀粉酶催化激活作用的热动力学[J]. 物理化学学报, 2002, 18(12): 1125-1128
15. 范山湖; 尹向阳; 潘社霞; 陈六平; 古喜兰; 李玉光; 石宗炳. 循环流动床固定床光催化反应器动力学数学模拟[J]. 物理化学学报, 2001, 17(11): 1000-1005
16. 陈迪钊; 梁逸曾; 徐承建. 动力学体系二维数据的拟合及其应用[J]. 物理化学学报, 2002, 18(10): 924-929
17. 郭源; 李永军; 何茂霞; 夏熙. γ-二氧化锰/K₃[Fe(CN)₆]溶液界面的电子转移反转化[J]. 物理化学学报, 2001, 17(07): 636-640
18. 赵铭姝; 崔玉春; 田彦文. 锂离子电池正极材料锰酸锂合成的动力学 [J]. 物理化学学报, 2002, 18(02): 188-192
19. 唐超紫; 石磊; 黄荣彬; 刘朝阳; 郑兰荪. C_nSH[±]与C_nS²⁻的碰撞诱导解离研究[J]. 物理化学学报, 1997, 13(04): 328-334
20. 周晓国; 刘世林. 乙烯基A²A^{*}电子态的振转分析[J]. 物理化学学报, 2006, 22(04): 481-485
21. 阮文娟; 朱志昂; 林华宽; 陈正华; 陈红卫; 杨秀樵; 邵迎; 陈荣悌; 锌、镉及苯甲酮生成反应动力学研究[J]. 物理化学学报, 1997, 13(04): 335-343
22. 高庆宇; 李保民; 孙康; 蔡遵生; 赵学庄. 亚氯酸盐-硫脲反应体系的非线性动力学 [J]. 物理化学学报, 2001, 17(03): 257-260
23. 储高升; 宋钦华; 王忠义; 葛学武; 张志成; 王文峰; 姚思德. 环-Phe-His二肽水溶液的激光光解[J]. 物理化学学报, 2000, 16(03): 232-237
24. 潘湛吕; 陈启元; 黄慧民; 伯电极上醋酸-醋酐溶液中Mn(II)/Mn(II)电对研究 [J]. 物理化学学报, 2001, 17(12): 1067-1071
25. 周培骥; 谢昌礼; 杨峰; 屈松生; 周涵韬; 凌杏香; 朱英国. 差示扫描量热研究水稻线粒体能量释放动力学[J]. 物理化学学报, 1998, 14(05): 467-471
26. 唐晓萍; 王素凡; 高丽蓉; 王操; 孔繁放. 甲烷在飞秒强激光场中的解离[J]. 物理化学学报, 2003, 19(07): 661-665
27. 李小平; 刘志宏; 高世扬; 胡满成; 夏树屏. 氯柱硼镁石在87 °C水中的溶解及相转化动力学[J]. 物理化学学报, 2003, 19(02): 181-184
28. 卢秀慧; 王沂轩; 邓从豪; 硅烯与乙烯环加成反应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1998, 14(04): 332-336
29. 周国荣; 吴佑实; 张川江; 赵芳. 二十面体准晶对非晶形成影响的模拟[J]. 物理化学学报, 2003, 19(01): 13-16
30. 徐立进; 严继民; 高振; 孔繁放; 朱起鹤. CH₄+O³P→CH₃+OH反应的准经典轨迹研究[J]. 物理化学学报, 1997, 13(11): 999-1004
31. 高义德; 刘云珍; 陈琴; 陈从香; CC₂自由基被无机小分子猝灭的速率常数[J]. 物理化学学报, 2001, 17(10): 944-947
32. 王琴萍; 吕殿祯; 中丽; 杨家振. 乙醇-水混合溶剂中氨基酸解离热力学性质[J]. 物理化学学报, 2001, 17(10): 952-955
33. 李航; 陈明树; 带电胶体离子扩散与交换动力学的比较[J]. 物理化学学报, 1998, 14(03): 278-282
34. 徐立进; 王斌斌; 严继民; 孔繁放. Cl+C₂H₆→HCl+C₂H₅反应的准经典轨迹研究[J]. 物理化学学报, 1998, 14(02): 158-163
35. 周晓国; 刘世林. 乙烯自由基A²A'(v'=0)→X²A'(v'=0)带的转动分析[J]. 物理化学学报, 2006, 22(01): 6-10
36. 徐俊波; 吴昊; 陆冬云; 何险峰; 温浩. 双嵌段共聚物薄膜介观结构的耗散粒子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2006, 22(01): 16-21
37. 杨超; 江良学; 孙康. 酸酐固化环氧树脂/蒙脱土复合材料的等温固化动力学[J]. 物理化学学报, 2005, 21(06): 681-685
38. 于化忠; 王利明; 李学初; 顾月妹; 孙琦; 印永嘉. CH₃NO₂与He(³S)、Ne(³P_{0,2})的解离激发反应[J]. 物理化学学报, 1995, 11(02): 123-130
39. 黄维; 俞启凡; 金韵. 书裕峰. 动力学参数数目与法方程条件数的关系[J]. 物理化学学报, 1995, 11(02): 147-150
40. 黄维; 俞启凡; 金韵. CeO₂/SiO₂的制备及丁烯异构化动力学[J]. 物理化学学报, 1995, 11(01): 9-14
41. 王悟敏; 侯惠奇; 秦启宗; 钱谊乐; 方黎; 郑海洋. 在超声分子束条件下Mn₂(CO)₁₀的多光子电离解离[J]. 物理化学学报, 1995, 11(02): 189-192
42. 孙琦; 翟月妹; 郭敬忠; 印永嘉; 李学初; 沈关林. 单次碰撞条件下Ar(³P_{0,2})与SO₂、SOCl₂的传能反应[J]. 物理化学学报, 1995, 11(01): 31-37
43. 辛梅; 瞿润生; 张林虎. 郭燮贤. 气相存在下CO在Pd上非线性脱附动力学的研究[J]. 物理化学学报, 1995, 11(01): 38-45
44. 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
45. 黄世萍; 刘洪霖; 马燕会; 唐波; 陈念贻. ZnCl₂盐桥的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 1995, 11(01): 71-73
46. 张冰; 张升华; 方黎; 张福义; 林森. 镍离子与直链烷烃分子气相反应的飞行时间质谱[J]. 物理化学学报, 1994, 10(12): 1059-1061
47. 单金媛; 刘铁英; 王安周. 二羟碘合铜(II)氧化氨基丙酸的动力学[J]. 物理化学学报, 1994, 10(12): 1110-1115
48. 汪鹏飞; 岳忠军; 交叉共轭烯酮化合物分子内的电荷转移[J]. 物理化学学报, 1994, 10(11): 1020-1025
49. 张红宇; 常钰. Langmuir分子动力学模拟中的头基效应[J]. 物理化学学报, 1994, 10(11): 998-1003
50. 黄世萍; 马彦会; 唐波; 徐桦; 陈念贻. NaCl-NaBr系熔盐溶液的分子动力学研究[J]. 物理化学学报, 1994, 10(11): 1045-1048
51. 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
52. 单金媛; 刘铁英. 二羟碘合铜(II)氧化乙酰胺的动力学及机理[J]. 物理化学学报, 1994, 10(10): 947-949
53. 姚萍; 史鸿运; 邓洁; 张云黔; 王一波; 范寿琯. 电刷镀含钛合金非晶态镀层的晶化动力学(I)[J]. 物理化学学报, 1994, 10(10): 959-962
54. 程兆年; 郑正明; 许立; 陈念贻. 熔融NaCaF₃、Na₂CaF₄和Na₃CaF₅的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 1994, 10(08): 676-679
55. 单金媛; 凌芹; 王安周. 烷基黄原酸合钴(II)与二丙胺第三步反应动力学[J]. 物理化学学报, 1994, 10(08): 728-732
56. 顾锦晴; 穆绍林. 邻菲啰啉对固定尿酸酶催化反应用力学的影响[J]. 物理化学学报, 1994, 10(07): 648-653
57. 邱丰和; 刘淑莹. 氯代甲苯双电荷离子的单分子解离反应研究[J]. 物理化学学报, 1994, 10(06): 526-531
58. 王日山明; 汪尔康. Cu(II)-2,2'-联吡啶在液/液界面转移及反应动力学[J]. 物理化学学报, 1994, 10(05): 418-423
59. 杨利庭; 常青; 王逢利; 王安周. 二羟基二羟碘合镍(IV)氧化氨基丙酸的动力学[J]. 物理化学学报, 1994, 10(04): 297-302
60. 应立明; 韩德刚; 杨惠星. 异丁烷高温热解反应动力学和机理[J]. 物理化学学报, 1994, 10(03): 223-229
61. 居冠之; 居冠之. Cl+CH₄反应的电子相关、基团与化学反应性[J]. 物理化学学报, 1994, 10(01): 92-95
62. 张洪林; 刘永军; 孙海涛; 孙秀芳; 单庆华; 谢昌礼; 屈松生. 细菌生长的热动力学性质的研究[J]. 物理化学学报, 1993, 9(06): 836-839
63. 郭金玉; 张建国; 张同来; 吴瑞风; 于伟. 三维网状结构配位聚合物[Cu(HCOO)₂(H₂O)₂]_n晶体的热分解机理[J]. 物理化学学报, 2006, 22(10): 1206-1211
64. 葛素红; 董光兴; 程新路; 杨向东; 土卫六大气中H₂和IN⁺反应的动力学研究[J]. 物理化学学报, 2006, 22(10): 1217-1221

65. 熊亚;潘正君;王宏;吴鼎泉;康立山;屈松生.线粒体外代谢热力学模型及其演化优化研究[J].物理化学学报,1997,13(06): 503-509
66. 闪海威;陈栋华;唐万军. M_2O_4 ($M=Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn$) 的热力学及其热分析动力学[J]. 物理化学学报, 2005, 21(09): 1001-1005
67. 袁军;邓明进;艾军;解孝林;郑启新.聚基丁酸-戊酸的非等温热分解反应用力学[J]. 物理化学学报, 2005, 21(09): 988-992
68. 王文清;闵玮;黄葵.手性氨基酸分子的温度诱导相变——自发对称性破缺与复原[J]. 物理化学学报, 2005, 21(10): 1186-1194
69. 吴晓萍;刘志平;汪文川.分子模拟研究气体在室温离子液体中的溶解度[J]. 物理化学学报, 2005, 21(10): 1138-1142
70. 周培源;谢昌礼;杨锋;屈松生;朱英国;周涵韬.水稻线粒体DNA热变性的动力学研究[J]. 物理化学学报, 1997, 13(08): 756-759
71. 朱必学;史鸿运;林智信;蔡汝秀.钛与3,5-DBSAF反应的荧光动力学及配合物结构[J]. 物理化学学报, 1997, 13(07): 664-668
72. 望天志;吴鼎泉;黄在银;屈松生;李东风;廖展如;万洪文.紫色酸性磷酸酶模型化合物水解ATP的研究[J]. 物理化学学报, 1997, 13(07): 643-646
73. 张曙光;石文艳;雷武;夏明珠;王风云.水溶性聚合物与方解石晶体相互作用的MD模拟[J]. 物理化学学报, 2005, 21(11): 1198-1204
74. 薛永强;杜建平;王沛东;王志忠.粒度对多相反应用力学参数的影响[J]. 物理化学学报, 2005, 21(07): 758-762
75. 岳林海;金达莱;吕德义;徐铸德. $Mg(OH)_2$ 热分解反应的非等温动力学研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(07): 752-757
76. 冯嘉春;段瑜;焦瑛;张秀菊;陈鸣才.镧配合物对等规聚丙烯等温结晶性能的影响[J]. 物理化学学报, 2005, 21(12): 1431-1435
77. 余益民;熊晓虹;周雨;刘淑莹.两种氨基酸中 $[MH\text{-}CO_2H_2]^+$ 的特征质谱碎裂[J]. 物理化学学报, 1997, 13(03): 252-257
78. 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
79. 王鸿梅;唐晓丹;储焰南;周士康.亚稳态 $SO(c^{\downarrow}Z^-, V'=0)$ 的猝灭动力学[J]. 物理化学学报, 2005, 21(11): 1195-1197
80. 刘朋军;杜奇石;常鹰飞;荣顺华. $HNCs$ 和 $CH_2(X^2\text{I})$ 反应微观动力学的理论研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(12): 1347-1351
81. 张雪彤;张荣华.沸石与酸性水溶液反应的动力学机制[J]. 物理化学学报, 2005, 21(06): 616-621
82. 吴爱玲;赵昱;关大任;易希璋.取代苯体系的一阶非线性光学性质(动力学李代数方法)[J]. 物理化学学报, 2005, 21(11): 1319-1323
83. 宋文玉;赵荣慧;降青梅;铱(II)离子催化钾(IV)离子氧化丙氨酸的动力学及机理[J]. 物理化学学报, 2005, 21(08): 929-933
84. 刘士军;陈启元;舟桥重信.超临界二氧化碳中卟啉与钴(II)、镍(II)、锌(II)配合物反应动力学[J]. 物理化学学报, 2005, 21(08): 893-897
85. 刘春莉;李春华;陈慰祖;王存新.分子模拟方法研究HIV-1整合酶与咖啡酰基类抑制剂的相互作用[J]. 物理化学学报, 2005, 21(11): 1229-1234
86. 李曼尼;杨文斌;新民. Na^+ 型斜发沸石上 $Na^{+}\text{-Cu}^{2+}$ 离子交换过程动力学[J]. 物理化学学报, 1997, 13(03): 224-229
87. 韩克利.非绝热量子散射动力学[J]. 物理化学学报, 2004, 20(08S): 1032-1036
88. 苑世领;吴锐;蔡政亭.水溶液中嵌段共聚物的耗散颗粒动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2004, 20(08): 811-815
89. 黄玉成;胡应杰;肖继军;殷开梁;肖鹤鸣.TATB基PBX结合能的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2005, 21(04): 425-429
90. 武刚;李宁;王殿龙;周德瑞. $\alpha\text{-Al}_2O_3$ 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
91. 王操;孔繁放.多原子分子在强飞秒激光场中的解离[J]. 物理化学学报, 2004, 20(08S): 1055-1062
92. 赵玮, 佟斌; 史俊格; 潘月秀; 申进波; 石建兵; 董宇平. $4\text{-}(2\text{-}4'\text{-毗啶})\text{乙块}$ 莱基重氮盐的光化学反应动力学及其自组装单分子膜的表征[J]. 物理化学学报, 0(0): 0-0
93. 米艳;黄在银;姜俊颖;李艳芬.CaMoO₄微晶生长过程的原位微量热法研究[J]. 物理化学学报, 2009, 25(12): 2422-2426
94. 李美芳;曾凡桂;孙荷莲;齐福辉.低煤级煤热解 H_2 生成动力学及其与第一次煤化作用跃变的关系[J]. 物理化学学报, 2009, 25(12): 2597-2603
95. 宋文玉;李红变;刘红梅;铱(II)离子催化钾(IV)离子氧化异丁醇的反应动力学及机理[J]. 物理化学学报, 2004, 20(08): 801-805
96. 张进;唐英;谢家庆;李建章;曾宪诚;胡常伟.冠醚化Schiff碱配合物金属胶束催化BNPP水解动力学[J]. 物理化学学报, 2005, 21(04): 408-413
97. 张爱龙;刘让苏;梁佳;郑采星.冷却速率对液态Ni凝固过程中微观结构演变影响的模拟研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(04): 347-353
98. 黄钦;侯廷军;徐彼杰.基于传递算法的Caco-2细胞穿透系数的研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(04): 372-377
99. 钟起玲;张兵;章磊;杨能元;黄凡.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
100. 张弢;谷廷坤;齐元华.熔体快速冷凝过程的微观结构演化[J]. 物理化学学报, 2005, 21(02): 173-176
101. 秦绪波;张妍宁;鲁剑林.原子尺寸差异与非晶形成能力[J]. 物理化学学报, 2003, 19(12): 1163-1166
102. 焦宝娟;朱丽;杨旭武;陈三平;高胜利;史启模.三元配合物 $Tb(Et_2dtc)_3$ (phen) 的热化学性质[J]. 物理化学学报, 2004, 20(07): 767-771
103. 张伟伟;袁洪海;李丽娟;陈伟华.二水草酸锌脱水的热分解动力学研究[J]. 物理化学学报, 2004, 20(01): 33-37
104. 曹江林;冷文华;张鉴清;曹楚南.氢氧根离子在 TiO_2 薄膜电极上的吸附行为和光催化动力学[J]. 物理化学学报, 2004, 20(07): 735-739
105. 张杰杰;姚熹;施豫铁电体的微畴-宏畴转变与生长动力学[J]. 物理化学学报, 2004, 20(07): 712-716
106. 徐荪;孙立贤;谭志诚;梁建国;周丹红;邸友堂;兰孝征;张涛;阿司匹林的热解机理及热动力学研究[J]. 物理化学学报, 2004, 20(01): 50-54
107. 白玉林;陈向荣;杨向东;芦鹏飞.硫酸团簇 S_n ($n=2\sim 8$) 结构的朗之万分子动力学计算[J]. 物理化学学报, 2003, 19(12): 1102-1107
108. 殷开荣;徐端钧;夏庆;叶雅静;邹国英;陈正隆;正十六烷体系凝固过程的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2004, 20(03): 302-305
109. 李小平;刘志宏;高世扬;胡满成;夏树屏.硼酸溶液中氯柱硼镁石的溶解及相转化动力学[J]. 物理化学学报, 2003, 19(07): 584-587
110. 王舜;高庆宇;王新红;林娟娟;赖顺安;莫吉学;亚氯酸盐-硫代硫酸盐非缓冲体系的动力学[J]. 物理化学学报, 2003, 19(08): 762-765
111. 文衍宣;王励生;金作美.模拟磷矿脱镁废水镁离子的交换动力学研究[J]. 物理化学学报, 2003, 19(10): 913-916
112. 赵丽丽;王榕树;锂离子交换剂制备及交换反应动力学[J]. 物理化学学报, 2003, 19(10): 933-937
113. 苏育志;郭仕恒;冀翼之;肖敏;杨绮琴. $2,2'$ -二氨基苯基氨基二硫化物的电极过程动力学研究[J]. 物理化学学报, 2004, 20(05): 518-523
114. 于永辉;李春华;卢本卓;陈慰祖;王存新.从对接结构中挑选近天然构象的新方法[J]. 物理化学学报, 2003, 19(08): 757-761
115. 范华荣;柳明珠;陈振斌.羧甲基纤维素水凝胶生物降解动力学研究[J]. 物理化学学报, 2004, 20(04): 386-390
116. 樊友花;范纯洁;魏春花;陈芦培;孙世刚. $Pt(111)$ 单晶电极上乙二醇解离吸附反应用力学[J]. 物理化学学报, 2004, 20(04): 382-385
117. 刘新;孟长功;刘长厚.金属铂在高温速率下的熔化和过热行为[J]. 物理化学学报, 2004, 20(03): 280-284
118. 曾跃;郑仰伦;易建龙;尚慈;杨春明;李则林.次溴酸根在镍电极上的氧化机理与动力学[J]. 物理化学学报, 2003, 19(08): 718-722
119. 徐俊;徐桦;陆文璐;陈念熙.高压 $Na_2O\text{-SiO}_2$ 系输运性质反常的分子模拟[J]. 物理化学学报, 2004, 20(03): 237-239
120. 高义德;胡长进;金瑾;陈旸;陈从香. $CCl_2(A^1B_1, a^3B_1)$ 自由基被烷烃类分子猝灭动力学[J]. 物理化学学报, 2001, 17(06): 516-520
121. 张弢;张晓茹;吴爱玲;管立;徐昌业.金属铜升温和熔化过程的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2003, 19(08): 709-713
122. 张荣;谭蔚蔚;郑敦胜;罗三明;李浩然.特殊缔合体系TEF水溶液分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2008, 24(03): 428-432
123. 高虹旭;张海;赵凤起;胡荣超;马海霞;徐抗章;仪建华;徐司雨;高茵. N -脒基脲二硝酰胺放热分解反应的动力学行为[J]. 物理化学学报, 2008, 24(03): 453-458
124. 耿春华;丁丽颖;韩清珍;温浩.气体分子对烷水合物稳定性的影响[J]. 物理化学学报, 2008, 24(04): 595-600
125. 张小弟;李伟善;黄幼菊;彭海燕.玻璃电极上DTAB对氧还原反应的促进作用[J]. 物理化学学报, 2008, 24(04): 691-694
126. 徐鹏;宋乐新.超分子中主体热分解行为的多样性分析——残存环环糊精的热分解[J]. 物理化学学报, 2008, 24(04): 729-736
127. 李春华;仇卫华;康晓丽;周国治;鲁雄刚;李福.固相反应合成 $Ba_{1-x}Co_{0.7}Fe_{0.2}Nb_{0.1}O_{3-\delta}$ 的动力学[J]. 物理化学学报, 2008, 24(05): 767-771
128. 丁元法;张跃;张凡伟;张大海;李仲平.石英玻璃高温分子动力学模拟中的势函数[J]. 物理化学学报, 2008, 24(05): 788-792
129. 陈萌;张昌华;曹振洲;张冰.离子速度成像方法研究溴代环己烷的紫外光解动力学[J]. 物理化学学报, 2008, 24(05): 844-848
130. 阮艳莉;唐致远. $LiFePO_4$ 的合成及其热分析动力学[J]. 物理化学学报, 2008, 24(05): 873-879
131. 董林茂;李晓东;杨荣杰.基于质谱的六硝基六氯杂多异伍兹烷热分解动力学[J]. 物理化学学报, 2008, 24(06): 997-1001
132. 崔宝秋;宫利东;赵东霞.微过氧化物酶水溶液的ABEM/MM动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2008, 24(06): 1035-1040
133. 马伟;王苏;崔季平;张海涛;范秉诚;何宇红.酚醛树脂的热解动力学模型[J]. 物理化学学报, 2008, 24(06): 1090-1094
134. 王亚明;刘焱;罗远芳;黄远民;郭文跃;王勇;李中谱.苯并咪唑缓蚀剂缓蚀性能的理论评价[J]. 物理化学学报, 2008, 24(07): 1239-1244
135. 张军;赵卫民;郭文跃;王勇;李中谱.苯并咪唑缓蚀剂缓蚀性能的理论评价[J]. 物理化学学报, 2008, 24(07): 1239-1244
136. 毛荣来;吕洋;周立川;李钦宇;李慎敏.分子动力学模拟纳米尺度限制体系下氯溶液中 I_2 的振动能量弛豫[J]. 物理化学学报, 2008, 24(08): 1451-1458
137. 沈秋萍;梁婉香;胡兴邦;李洪然.甲酸胺水溶液的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2008, 24(07): 1169-1174
138. 张连水;王百荣;党伟;肖广生.脉冲光放电激发电解液中 H_2O 分子的动力学过程[J]. 物理化学学报, 2008, 24(08): 1524-1528
139. 张锋;曹振洲;覃晓;刘玉柱;王艳梅;张冰.2-溴噻吩和3-溴噻吩在267 nm的C-Br键解离机理[J]. 物理化学学报, 2008, 24(08): 1335-1341
140. 徐司雨;赵凤起;仪建华;胡荣超;高虹旭;李海霞;裴军;含CL-20的改性双基推进剂的热行为及非等温反应用力学[J]. 物理化学学报, 2008, 24(08): 1371-1377
141. 王丽娜;刘忠伟;朱爱民;赵国利;徐勇;介质阻抗放电等离子体中 OH 和 HO_2 .自由基的数值模拟计算[J]. 物理化学学报, 2008, 24(08): 1400-1404
142. 吴晓敏;祖元刚;杨志伟;付玉杰;周丽君;杨刚.温控分子动力学研究微管蛋白活性肽链的折叠机制[J]. 物理化学学报, 2009, 25(04): 773-782
143. 张善荣;任吉民;裴奉奎.两种新 DTPA 衍生物的 1H NMR 谱定研究[J]. 物理化学学报, 1995, 11(03): 199-201
144. 沈新媛;吕洋;李慎敏.人体端粒中(3+1)混合结构G-四链体稳定性分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2009, 25(04): 783-791

145. 崔巍; 张怀; 计明纲.新型二氟甲基磷酸类氨酸蛋白磷酸酶1B抑制剂的分子动力学模拟和结合自由能计算[J].物理化学学报, 2009, 25(04): 668-676
146. 赵勇山; 郑清川; 张红星; 楚慧卿; 孙家钟.人类丝氨酸消旋酶的同源模建及其与多肽类抑制剂的分子对接[J].物理化学学报, 2009, 25(03): 417-422
147. 潘国祥; 倪哲明; 王芳; 王建国; 李小年.二氟尼柳/水滑石插层组装结构、氢键及水合特性的分子动力学模拟[J].物理化学学报, 2009, 25(02): 223-228
148. 陈聪; 李维仲.甘油水溶液氢键特性的分子动力学模拟[J].物理化学学报, 2009, 25(03): 507-512
149. 曹振洲; 张昌华; 王艳玲; 张锋; 华林强; 张冰; 邱凌甲苯在234和267 nm的光解动力学[J].物理化学学报, 2009, 25(03): 423-429
150. 何煦; 顾新华; 赵国玺; 戴光松; 吴世康.荧光探针法研究囊泡融合的动力学[J].物理化学学报, 1995, 11(06): 504-508
151. 赖兆文; 邓巧临; 来鲁华; 徐筱杰; 唐有祺.磷脂酶A₂及其复合物的分子动力学研究[J].物理化学学报, 1995, 11(07): 622-626
152. 赵瑞玉; 董鹏; 梁文杰.单分散SiO₂体系制备中TEOS水解动力学研究[J].物理化学学报, 1995, 11(07): 612-616
153. 刘让苏; 周群益; 李基水.液态金属结构变化的分子动力学模拟研究[J].物理化学学报, 1995, 11(08): 755-757
154. 顾健德; 田安民; 邝国森.N₂-O₂水溶液光谱的分子动力学模拟[J].物理化学学报, 1995, 11(08): 719-723
155. 王黎明; 李学初; 陈宏; 舒关林; 楼南泉; He(²S₁); Ne(³P_{0,2})与NH₃的传能动力学[J].物理化学学报, 1995, 11(08): 704-709
156. 王俊梅; 胡照林; 叶学其.亮氨酸脑啡肽构象的分子动力学方法研究[J].物理化学学报, 1995, 11(08): 673-677
157. 谭元民; 谭开礼; 郁松生; 赵必钧.厌氧菌生长代谢的微量量热学研究[J].物理化学学报, 1995, 11(10): 954-956
158. 蔡洪波; 梁峰; 魏政荣; 李海洋; 张冰.离子速度影像法研究n-C₇H₁₆Br分子光解反应动力学[J].物理化学学报, 2006, 22(09): 1106-1110
159. 周震; 言天英; 高学平.储能材料的模拟与设计[J].物理化学学报, 2006, 22(09): 1168-1174
160. 高振霆; 刘义; 黄玉屏; 沈萍; 郁松生.营养缺陷型酿酒酵母AY生长代谢的热动力学研究[J].物理化学学报, 2002, 18(07): 590-594
161. 王贵昌; 孙予罕; 钟炳.合成甲醇Cu基催化剂结构敏感性的模拟[J].物理化学学报, 1998, 14(04): 337-342
162. 张妍宁; 王丽; 边秀房.中介尺度Au纳米团簇熔化的分子动力学模拟[J].物理化学学报, 2003, 19(01): 35-39
163. 王素华; 陈德文.对氨基苯磺酸钠的光化学动力学的ESR研究[J].物理化学学报, 1998, 14(05): 458-462
164. 范山湖; 孙振范; 邬泉周; 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
165. 刘彦方; 赵敏; 申世刚; 高俊刚.TBPPAER/DDM的固化反应动力学[J].物理化学学报, 1998, 14(10): 927-931
166. 魏克成; 陆冬云; 周璐; 徐未; 温皓; 许志宏; 丁二酰亚胺类分散剂体系的介观模拟研究[J].物理化学学报, 2004, 20(06): 602-607
167. 卢秀慧; 王沂轩; 邓从豪.二氯卡宾与甲酰环加成反应的理论研究[J].物理化学学报, 1998, 14(09): 784-788
168. 杨防粗; 黄令; 许书培; 周绍民.添加剂作用下钯沉积行为研究[J].物理化学学报, 2004, 20(05): 463-467
169. 王世忠; 刘旋.Sm_{0.5}Sr_{0.5}CoO₃阴极氧还原动力学[J].物理化学学报, 2004, 20(05): 472-477
170. 李媛; 黄保华; 吕迎潮; 金声; 邢其毅.邻氨基苯硫基-1-丙酮缩合反应用动力学及机理[J].物理化学学报, 1998, 14(11): 1048-1052
171. 孟祥光; 李建梅; 庞钦辉; 朱杰; 戚蓉蓉; 曾宪诚.CTAB对H₂O₂氧化抗血酸反应动力学的影响[J].物理化学学报, 2005, 21(03): 283-286
172. 司维江; 蔡淑萍.居冠之.NH+O₃→ONH+O₂反应热力学和动力学研究[J].物理化学学报, 2003, 19(10): 974-977
173. 张立敏; 陈军; 戴静华; 王储记; 章萍; 陈从香; 马兴孝.242-260nm波长区CS₂分子的多光子解离电离[J].物理化学学报, 1998, 14(11): 1007-1012
174. 秦星; 张秉坚; 张晖; 胡文煊.硅酸盐岩石微孔中流体混合物扩散系数的分子动力学模拟[J].物理化学学报, 2005, 21(03): 315-318
175. 陈勇; 汪海东; 曾宪诚.平行反应的热动力学研究法[J].物理化学学报, 2001, 17(02): 123-127
176. 吴晓萍; 刘志平.室温离子液体[bmim][BF₄]和水混合物的计算机模拟研究[J].物理化学学报, 2005, 21(09): 1036-1041
177. 王旭; 邓娅; 曹微能; 来鲁华; 色氨酸标记的GCN4单体肽与DNA位点的分子识别[J].物理化学学报, 2003, 19(09): 834-838
178. 方美娟; 胡书娜; 王河清; 刘万云; 赵玉芬.磷酰化对丙氨酸与溶酶相互作用的影响[J].物理化学学报, 2005, 21(09): 1042-1045
179. 卫立夏; 杨斌; 王晶; 黄超群; 盛六四; 齐飞.1-丙醇和2-丙醇的真空紫外光致电离质谱研究[J].物理化学学报, 2006, 22(08): 987-992
180. 刘迎春; 王琦; 吕玲红; 章连众.疏水性微孔中水的结构和扩散性质的分子模拟[J].物理化学学报, 2005, 21(01): 63-68
181. 杨斌; 黄超群; 杨锐; 卫立夏; 王晶; 王思胜; 单晓斌; 齐飞; 张允武; 盛六四; 王振亚; 郁立庆; 周士康.五氟乙烷的真空紫外光致电离解离[J].物理化学学报, 2005, 21(05): 539-543
182. 郭向云; 钟炳; 彭少逸.用化学动力学方法估算颗粒表面的分维数[J].物理化学学报, 1997, 13(01): 52-55
183. 吴新民; 刘建华; 李巍; 戚传松.稀土氨基配合物RE(Val)₃·6H₂O(RE = Nd, Sm)的热分解动力学[J].物理化学学报, 2006, 22(08): 942-946
184. 马建军; 张志红; 丛书林; NO(⁴S)+NO(²D)→N₂(X³Σ_g⁻)+O(³P)反应的立体动力学研究[J].物理化学学报, 2006, 22(08): 972-976
185. 刘义; 谭智群; 熊亚; 宋昭华; 郁松生; 王元香.细胞力学研究VII.植物细胞非生长代谢特征[J].物理化学学报, 1997, 13(01): 68-70
186. 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
187. 蔡继业; 刘奕; 李亚东; 成国胜; 张伟; 张冰; 周士康; 高军毅; 黄知本.二级管道激光探测法研究高振动能NO₂与NH₃振动传递能[J].物理化学学报, 1996, 12(09): 786-795
188. 高孝快; 高德; 蒋淑芬.秘系2223相形成机理及单相块材的合成[J].物理化学学报, 1996, 12(09): 825-829
189. 张强; 黄荣彬; 刘朝阳; 郑兰荪.原子簇离子产生的动力学方程与分布函数[J].物理化学学报, 1996, 12(08): 735-740
190. 许宗荣; 高艳玲.Si₄₊Si₃⁻反应动力学: 振动激发态对反应的影响[J].物理化学学报, 1996, 12(05): 396-399
191. 刘义; 谭安民; 谢昌礼; 汪存信; 郁松生; 郁宗宇.细胞力学研究 III.细菌算术级数生长过程热动力学[J].物理化学学报, 1996, 12(05): 451-455
192. 刘义; 谭安民; 谢昌礼; 汪存信; 郁松生; 郁宗宇.细胞力学研究 II.产物抑制生长过程的热动力学[J].物理化学学报, 1996, 12(04): 377-381
193. 解辉; 刘朝; 刘彬武.纳米通道内混合气体流动的分子动力学模拟[J].物理化学学报, 2009, 25(05): 994-998
194. 孙浩; 蒋勇军; 俞庆森; 邹卫平.分子动力学模拟方法研究结构水在糖原合成酶激酶-3β中的作用[J].物理化学学报, 2009, 25(04): 635-639
195. 樊友军; 茜春花; 陈培声; 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
196. 蒋勇; 邱榕.基于直接关系图法的碳氢燃料复杂化机理简化[J].物理化学学报, 2009, 25(05): 1019-1025
197. 牛继南.强碱性-高岭石-水体系中水分子结构的分子动力学模拟[J].物理化学学报, 2009, 25(06): 1167-1172
198. 曾凡柱; 贾建设.霍林河褐煤热解甲烷生成反应类型及动力学的热重-质谱实验与量子化学计算[J].物理化学学报, 2009, 25(06): 1117-1124
199. 宋其圣; 郭新利; 苑世领; 刘成才.十二烷基苯磺酸钠在SiO₂表面聚集的分子动力学模拟[J].物理化学学报, 2009, 25(06): 1053-1058
200. 朱华玲; 李兵; 熊海灵; 李航.贾明云.不同电解质体系中土壤胶体凝聚动力学的动态光散射研究[J].物理化学学报, 2009, 25(06): 1225-1231
201. 付一政; 刘亚青; 兰艳花.端羟基聚丁二烯/水塑剂共混物相变性的分子动力学模拟[J].物理化学学报, 2009, 25(07): 1267-1272
202. 陶长寅; 冯海军; 周健; 吕玲红; 陆小华.氧气在聚丙烯内吸附和扩散的分子模拟[J].物理化学学报, 2009, 25(07): 1373-1378
203. 应玫瑰; 徐盛明; 白晨光; 徐刚; 吕学伟.水解制备球形TiO₂及其水解过程动力学[J].物理化学学报, 2009, 25(08): 1511-1516
204. 赵健伟; 刘洪梅; 倪文彬; 郭彦; 尹星.分子水平研究电子传递[J].物理化学学报, 2009, 25(07): 1472-1480
205. 周爱松; 周立川; 李慎敏.混合量子-经典动力学方法研究反胶团水池中I₂⁻分子的振动频率位移[J].物理化学学报, 2009, 25(08): 1572-1580
206. 李向富; 陈宏善; 孟凡顺; 刘百革.(AgI)_n团簇熔化行为的分子动力学模拟[J].物理化学学报, 2009, 25(01): 103-106
207. 肖谷清; 谢样林; 徐满才.疏水/亲水大孔PDVB/PAEMIP树脂对香兰素的吸附性能[J].物理化学学报, 2009, 25(01): 97-102
208. 李振东; 郭新利; 王红艳; 李青华; 苑世领; 徐桂英; 刘成才.阴离子表面活性剂在油水界面聚集的分子动力学模拟[J].物理化学学报, 2009, 25(01): 6-12
209. 李敏; 高诚辉; 杨素珍.电沉积Ni_{81.32}Mo_{18.68}非晶/纳米晶镀层的晶化动力学[J].物理化学学报, 2009, 25(04): 735-740
210. 万丽华; 颜克风; 李小森.癸烷燃烧热力学抑制剂作用下甲烷水合物分解过程的分子动力学模拟[J].物理化学学报, 2009, 25(03): 486-494
211. 蔡开聪; 王建平; E.醉醇的分子动态结构[J].物理化学学报, 2009, 25(04): 677-683
212. 李军; 冯杰; 李文英; 常海洲; 谢克强.弱强还原媒聚集对其可溶性影响的分子力学和分子动力学分析[J].物理化学学报, 2008, 24(12): 2297-2303
213. 张衡; 赵凤起; 仪建华; 张晓明; 胡荣祖; 徐司雨; 任晓宁; 3-硝基邻苯二甲酸酯的制备、热分解机理及非等温反应动力学[J].物理化学学报, 2008, 24(12): 2263-2267
214. 徐鹏; 宋乐新; 丁香油; β-环糊精包合物中残存环糊精的热分解动力学[J].物理化学学报, 2008, 24(12): 2214-2220
215. 陈莹; 王秀英; 赵俊卿.小尺寸金属团簇熔化过程的分子动力学模拟[J].物理化学学报, 2008, 24(11): 2042-2046
216. 杨振; 杨晓宁; 徐志军.金纳米颗粒周围水的结构和动力学性质的分子动力学模拟[J].物理化学学报, 2008, 24(11): 2047-2052
217. 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
218. 储艳秋; 潘婷婷; 陈春云; 俞伟伟; 郑松柏; 丁传伟.谷胱甘肽与D型氨基酸非共价复合物的质谱[J].物理化学学报, 2008, 24(11): 1981-1987
219. 李旭; 徐升华; 孙祉伟.重力对溶液悬浮粒子聚集过程影响的布朗动力学模拟[J].物理化学学报, 2009, 25(02): 207-212
220. 胡建平; 柯国涛; 常珊; 陈慰祖; 王存新.HIV-1病毒DNA与整合酶结合后的构象变化[J].物理化学学报, 2008, 24(10): 1803-1810
221. 付一政; 刘亚青; 梅林玉; 兰艳花.HTPB与Al不同晶面结合能和力学性能的分子动力学模拟[J].物理化学学报, 2009, 25(01): 187-190
222. 杨晓峰; 泰张峰; 王建国.分子在纯硅 β 分子筛内扩散的随机行走模型[J].物理化学学报, 2008, 24(11): 2128-2132
223. 侯吉旋; 司黎明.流体系统模拟中邻区列表法的优化理论[J].物理化学学报, 2009, 25(03): 430-434

224. 周天华; 赵剑敏. 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
225. 张予东; 李宾杰; 徐朋民; 李德亮. ZnSn(OH)_6 的热分解动力学[J]. 物理化学学报, 2007, 23(07): 1095-1098
226. 李姝; 刘磊; 曹臻; 汪继强; 袁天英. 室温熔盐二(三氟甲基磺酸酰)亚胺锂-尿素体系的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2007, 23(07): 983-986
227. 王新罗; 刘勇; 戚新林; 李松年; 王晓工. NH_4^+ - NH_4^+ 对HMN的N—NO₂键解离能的影响[J]. 物理化学学报, 2007, 23(10): 1560-1564
228. 王毅; 姜伟; 程志鹏; 张先修; 安崇伟; 宋小兰; 李风生; 核壳结构Cu/AI微纳米复合材料与WO₃的热反应性能[J]. 物理化学学报, 2007, 23(11): 1753-1759
229. 王颖; 赵贺先; 王国昌; 钟启林; 杨海龙; 袁伟; 何炳林. N-(1-蔡基)琥珀酰亚胺玻璃态的晶化[J]. 物理化学学报, 2007, 23(08): 1257-1259
230. 马立文; 陈白珍; 何新快. 硅酸盐尿素体系中三价铅电沉积机理[J]. 物理化学学报, 2007, 23(10): 1607-1611
231. 张宝丽; 那水桓; 葛茂发; 孙政; 李章朋; 高品; 牛淑云. 含有羧基配体的堿型钒氧化合物的合成、结构及其热分解动力学[J]. 物理化学学报, 2007, 23(11): 1701-1706
232. 仪建华; 赵凤起; 徐司雨; 高红旭; 胡荣祖; 郝海霞; 贾庆; 高青; 柠檬酸镧催化双基推进剂的非等温热分解反应动力学[J]. 物理化学学报, 2007, 23(09): 1316-1320
233. 杨忠志; 崔宝秋. 血红素近轴侧基氢键的ABEEM/MM分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2007, 23(09): 1332-1336
234. 王韶旭; 赵哲; 谭志诚; 李彦生; 童波; 史全; 李英; 丙硫异烟胺的热稳定性及其热分解动力学[J]. 物理化学学报, 2007, 23(09): 1459-1462
235. 张静; 吕福功; 徐勇; 杨学锋; 朱爱民. 介质阻挡放电脱除甲醛的化学动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2007, 23(09): 1425-1431
236. 董殿权; 张风宝; 张国亮; 刘亦凡. $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_9$ 的合成及对Li⁺的离子交换动力学[J]. 物理化学学报, 2007, 23(06): 950-954
237. 孙景; 胡胜亮; 杜希文; 雷贻文; 江雷. 硼脉冲激光合成超细纳米金刚石[J]. 物理化学学报, 2007, 23(07): 1105-1108
238. 周利民; 王一平; 黄群武; 刘峙嵘. 改性磁性壳聚糖微球对Cu²⁺、Cd²⁺和Ni²⁺的吸附性能[J]. 物理化学学报, 2007, 23(12): 1979-1984
239. 延辉; 苑世领; 刘成卜. 烯烃分子在氢终止Si(100)-2×1表面的自由基链反应[J]. 物理化学学报, 2008, 24(01): 8-12
240. 吴士新; 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
241. 孙丽美; 曹殿学; 王丽霞; 吕艳华; 张密林. 纳米Pd_xH₂O_y的电催化还原反应[J]. 物理化学学报, 2008, 24(02): 323-327
242. 袁剑群; 程玉民. 接枝羧基对单壁碳纳米管弹性性质的影响[J]. 物理化学学报, 2007, 23(06): 889-894
243. 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
244. 彭传伟; 王丽; 张妍宁. 应变率诱发镍纳米丝的非晶化[J]. 物理化学学报, 2007, 23(04): 517-520
245. 应国良; 潘国卫; 刘婉; 袁俊苗; 陈庆虎. 二维完全阻挫Josephson结阵列的非平衡相变[J]. 物理化学学报, 2007, 23(04): 617-619
246. 唐万军; 陈栋华. 二水草酸亚铁热分解反应动力学[J]. 物理化学学报, 2007, 23(04): 605-608
247. 申世刚; 石红梅; 孙汉文. 二(氯碘酸)合银(I)配离子氧化愈创甘油酯的反应动力学及机理[J]. 物理化学学报, 2007, 23(03): 409-413
248. 颜承农; 刘义; 尹松生; 陈春英; 徐辉碧. 细胞动力学研究VIII. Na₂SeO₃对黑根菌作用特征[J]. 物理化学学报, 1997, 13(04): 354-357
249. 丛红日; 边秀房; 李辉; 王丽. 液态Al₈₀Fe₂₀合金的中程有序结构[J]. 物理化学学报, 2002, 18(01): 39-44
250. 吴国胜; 高毅勤; 陈文武; 杨达林; 盛六四; 武国华; 叶为全; 张允武. 四氢呋喃的同步辐射光电离研究[J]. 物理化学学报, 1997, 13(02): 188-192
251. 颜承农; 刘义; 宋昭华; 尹松生. 细胞不同代谢类型的量热学研究 I. 静息细胞有氧非生长代谢特征[J]. 物理化学学报, 1997, 13(05): 477-480
252. 田圣军; 成庆堂; 席国喜; 姜向东; 李清华. β -CD与乙酸苄酯包合物的制备及其热分解研究[J]. 物理化学学报, 1997, 13(05): 459-465
253. 徐桦; 邵俊. 氰代硼酸锂玻璃的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2002, 18(01): 10-13
254. 袁林森; 张立敏; 戴静华; 章强; 陈从香; 马兴孝. 370-410nm波段CS₂的共振多光子电离研究[J]. 物理化学学报, 1998, 14(06): 540-543
255. 王永成; 耿志远; 陈宏善. 糜基氧化物环化反应动力学的计算研究[J]. 物理化学学报, 2002, 18(01): 45-49
256. 王丽; 农衣粟; 边秀房. Ni₃Al合金液态与非晶中的原子团簇 [J]. 物理化学学报, 2002, 18(04): 297-301
257. 孔景临; 薛莹宏; 邵颖; 何春建; 陈巧玲. 锆纳米电线极对乙醇的电催化氧化动力学参数的测定 [J]. 物理化学学报, 2002, 18(03): 268-271
258. 王舜; 林娟娟; 黄振亚; 高庆平; 赵敏; 林振权; 高碘酸盐-硫酸-硫酸反应体系的非线性动力学[J]. 物理化学学报, 2002, 18(03): 264-267
259. 赵剑虹; 叶向宇. 苯在Pluronic F127和P123胶束溶液中的增溶动力学 [J]. 物理化学学报, 2002, 18(04): 377-380
260. 李权; 王红艳; 蒋刚; 朱正和. Pu⁷F₉⁻+CO(X^{1±}, O⁻, O⁻)的分子反应动力学 [J]. 物理化学学报, 2002, 18(04): 302-306
261. 侯廷军; 安茹; 茹荷根; 徐俊杰. 三种金属硫蛋白稳定性理论研究[J]. 物理化学学报, 2000, 16(03): 221-225
262. 李振华; 皮洪斌; 何炳林. 阳离子交换树脂对钙拮抗剂的吸附及控释特性[J]. 物理化学学报, 2000, 16(04): 379-384
263. 杨毅芸; 孙世刚. 铂单晶电极表面不可逆反应动力学Pt(100)单晶电极上甲酸氧化的现场红外反射光谱研究[J]. 物理化学学报, 1997, 13(07): 632-636
264. 刘朝阳; 黄荣彬; 郑兰荪. C_nAlⁿ(n=1-11)结构的量子化学从头计算[J]. 物理化学学报, 1997, 13(07): 621-625
265. 周健; 朱宇; 汪文川; 陆小华; 王延伟; 时钧. 超临界NaCl水溶液的分子动力学模拟 [J]. 物理化学学报, 2002, 18(03): 207-212
266. 刘奉岭. 不饱和类卡宾H₂C=CLiF的密度泛函研究 [J]. 物理化学学报, 2002, 18(03): 228-231
267. 陈同慧; 白耀文; 孙仁慧. 聚六亚甲基碳酸酯二醇增环环氧树脂的固化动力学[J]. 物理化学学报, 1997, 13(09): 848-852
268. 张向东; 刘岩; 孙锦玉; 刘锦涛. 胶束溶液中某些氨基酸和二肽的解离常数[J]. 物理化学学报, 2000, 16(04): 351-355
269. 冯海霞; 朱志昂; 王传忠; 阮文娟; 李瑛; 陈荣焯; 钟(11)酰菁与巯基乙醇轴向配位反应的动力学[J]. 物理化学学报, 1999, 15(02): 167-172
270. 朱小雷; 周志华; 卢文庆; 黄锦凡; 彭彦英. 由CBr₄分子动力学研究观察到的可能的新相[J]. 物理化学学报, 1997, 13(09): 815-821
271. 钱新明; 王耘; 冯长根; 郑妍. 用加速量热仪研究KClO₃/CuO/S/Mg-Al/C₆Cl₆的热分解[J]. 物理化学学报, 2001, 17(01): 70-73
272. 张丽清; 刘素兰; 朱建新; 姚淑华; 谢颖. MgSO₄·H₃BO₃·H₂O体系水热条件下结晶动力学[J]. 物理化学学报, 2000, 16(05): 468-471
273. 李彬; 隋智通. CaO-MgO-Fe₂O₃-Al₂O₃-SiO₂玻璃晶化机理[J]. 物理化学学报, 1998, 14(07): 645-648
274. 叶雅静; 张立同; 成来飞; 徐永东. 分子动力学模拟无定形BCN体系结构特征[J]. 物理化学学报, 2006, 22(07): 878-882
275. 王丽; 边秀房; 李辉. 金属Cu液固转变及晶体生长的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2000, 16(09): 825-829
276. 程丽; 申作春; 鲁建业; 高惠德; 吕志伟. 两种烷基碘化物分子理论研究及其发射谱测量[J]. 物理化学学报, 2006, 22(07): 864-867
277. 陈海翔; 刘乃安; 范维澄. 基于差示扫描量热技术的生物物质热解两步连续反应模型研究[J]. 物理化学学报, 2006, 22(07): 786-790
278. 侯怀宇; 陈国良; 陈光. 金属Ni熔化前后结构变化的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2006, 22(07): 771-776
279. 孙世刚; 杨毅芸. 铂单晶电极表面不可逆反应动力学II. 铂单晶(100)晶面电极上甲酸氧化反应动力学参数解析[J]. 物理化学学报, 1997, 13(08): 673-679
280. 曾跃; 于尚慈; 李则林; 陈珂; 周绍民. 乙醉在Ni-Mo合金电极上氧化的动力学模型[J]. 物理化学学报, 2000, 16(11): 1013-1021
281. 刘付铁; 盛六四; 齐飞; 武国华; 高辉; 周卫东; 张允武. 1, 2-环氧丙烷的光电离离通道与机理[J]. 物理化学学报, 1999, 15(09): 845-849
282. 陈平; 郑小明; Meyer S; Temps F. FTIR研究HCO自由基与NO₂反应的动力学[J]. 物理化学学报, 2000, 16(11): 1043-1047
283. 邹鹏; 吴国盛; 陈文武; 杨达林; 盛六四; 武国华; 叶为全; 张允武. 1, 4-二羟六环的光电离离解[J]. 物理化学学报, 1998, 14(01): 21-26
284. 刘佑才; 全向春; 韩利平; 王建龙; 哇琳的生物降解动力学[J]. 物理化学学报, 2000, 16(07): 663-666
285. 钟澄; 蒋益明; 罗宁峰; 廖家兴; 吴玮巍; 李劲. 两种表征金属有机双层膜结合和金属薄膜氧化反应动力学的方法[J]. 物理化学学报, 2006, 22(06): 696-700
286. 曹玉群; 黄荣彬; 郑兰荪. 激光溅射下原子团簇生长的非平衡动力学[J]. 物理化学学报, 1999, 15(04): 345-350
287. 李辽沙; 娄太平; 车荫昌; 隋智通. CaO-SiO₂-Al₂O₃-MgO-TiO_x-FeO_y体系氧化动力学[J]. 物理化学学报, 2000, 16(08): 708-712
288. 高庆平; 魏贤勇; 侯剑; 蔡遵生; 赵学庄. 闭系中硫(-II)氧化的非线性动力学一般特征[J]. 物理化学学报, 1999, 15(04): 351-355
289. 冉鸣; 蒋刚; 高涛; 朱正和; 蒋国强; 罗德礼; 武胜. Al²P₀₄²⁻+H₂(X^{1±})₀²⁻的分子反应动力学[J]. 物理化学学报, 2000, 16(08): 694-700
290. 高俊刚; 李燕芳. 双酚-S环氧树脂与琥珀酸酐固化反应动力学[J]. 物理化学学报, 2000, 16(05): 405-409
291. 侯廷军; 朱丽荔; 徐俊杰; 计明娟; 叶学琴. MCM-22型分子筛中苯分子吸附行为的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2000, 16(08): 701-707
292. 曹玉群; 黄荣彬; 郑兰荪. 激光溅射下原子团簇生长的非平衡动力学[J]. 物理化学学报, 2000, 16(07): 621-626
293. 孙远华; 张向来; 张建国; 杨利; 乔小晶. 高氯酸碳酰胆碱快速热分解反应动力学[J]. 物理化学学报, 2006, 22(06): 649-652
294. 徐桦; 邵俊. 正磷酸铝高压下相变的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2000, 16(06): 512-516
295. 计明娟; 叶学琴; 杨鹏程. 甲硫氨酸-脑啡肽的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 1999, 15(11): 1011-1016
296. 周健; 陆小华; 王延伟; 时钧. 超临界水的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 1999, 15(11): 1017-1022
297. 李辉; 边秀房; 李玉忱; 刘洪波; 陈魁英. 贵金属Au的液态结构分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 1998, 14(07): 630-634
298. 周培祖; 谢昌礼; 杨锋; 尹松生. 超临界水的分子动力学研究[J]. 物理化学学报, 1998, 14(02): 174-177
299. 李青莲; 陈寿田; 姚朴; 魏国; 曲永和. 纳米钛酸钡生长的热分解机理[J]. 物理化学学报, 2000, 16(02): 170-174
300. 谢洪平; 蒋刚; 张静; 吕利刚; 朱正和; H₄CN体系中平行格合反应的动力学[J]. 物理化学学报, 1999, 15(06): 573-576
301. 胡义华; 刘美希; 小王; 周金运; 杨新; 杨世和; 两聚物(C₆H₅F)₂²⁻的光解离光谱[J]. 物理化学学报, 1999, 15(12): 1057-1059
302. 汪存信; 梁毅; 王文清; 宋昭华; 刘欲文; 周绍生. 热动力学的滴定量热研究 I. 一级反应的热动力学[J]. 物理化学学报, 1997, 13(05): 425-431
303. 陈勇; 谢家庆; 张元勤; 曾宪诚. 简单级数反应的特征时间法[J]. 物理化学学报, 1999, 15(04): 361-364

304. 平易贵;商才志;俞庆森;梅明辉;林瑞森.热导式热量计冷却常数的化学标定法[J].物理化学学报,2000,16(01): 87-92
305. 刘岩.两种不同类型的声场与声化学产额的关系[J].物理化学学报,2001,17(11): 1031-1035
306. 董俊;史鸿运;邓洁;张云黔.电沉积法制备镍与镧、铈的非晶态合金及其晶化动力学[J].物理化学学报,2001,17(11): 1053-1056
307. 张志红;陈茂萍;从书林;韩克利. $S(^1D)+D_2$ 反应的立体动力学理论研究[J].物理化学学报,2006,22(05): 557-561
308. 张晖;张秉乾;梁世强;路典林;胡文昭.微孔中简单流体粘度的分子动力学模拟及关联模型[J].物理化学学报,2003,19(04): 352-355
309. 李换勇;胡荣祖;张广介.万能线性升温条件下纳米ZnSe的成成功力学[J].物理化学学报,2003,19(04): 315-319
310. 侯安新;屈松生;黄伟国;刘义.两种稀土卟啉配合物与大肠杆菌的作用微量热研究[J].物理化学学报,2003,19(02): 134-138
311. 于海涛;池玉娟;傅宏刚;李洋洋;孙家锋.磷碳R-C=P(R=-BH₂,-CH₃,-NH₂,-OH)及其异构体的稳定性[J].物理化学学报,2003,19(02): 125-129
312. 张大力;卢立柱;柯家骏.D2EHDTPA-TOA反协同萃取剂的速率方程[J].物理化学学报,2004,20(03): 275-279
313. 刘新;孟长功;刘长厚.升温速率对金属铂的熔化和过热行为的影响[J].物理化学学报,2003,19(08): 681-685
314. 丛红日;边秀房;李喜珍;李辉.液态Al₈₀Fe₂₀在快速冷却中的MD模拟[J].物理化学学报,2002,18(05): 414-419
315. 赵洪凯;钱春香.绝热法研究己内酰胺阴离子聚合尼龙动力学[J].物理化学学报,2007,23(03): 373-378
316. 王若;朱灵峰;张国宝;赵根锁;朱琰.改性羧基羟丙基苯胶热裂解动力学研究[J].物理化学学报,1996,12(07): 598-603
317. 刘义;汪存信;谢昌礼;屈松生;郝宗宇.细胞动力学研究IV.细菌非理想生长过程的热动力学[J].物理化学学报,1996,12(07): 659-663
318. 雷雨;程兆年;唐蔚元.分子动力学模拟研究 β -BaB₂O₄晶体的结构[J].物理化学学报,1996,12(06): 481-484
319. 王娅娟;祁学水;李晓燕.双核Cu(I)配合物的热分解非等温动力学[J].物理化学学报,1996,12(07): 668-672
320. 贾龙;徐永福;葛茂发;杜林;王庚辰;庄国顺.丙烯的臭氧化反应动力学研究[J].物理化学学报,2006,22(10): 1260-1265
321. 张子富;杨家振;杨齐志;杨永珍;刘伟;李辉.混合溶剂中弱电解质离热力学(I)[J].物理化学学报,1993,9(05): 668-674
322. 杨达林;凌云;丁传凡;周游;朱起鹤.碘甲烷通过A态和C态的多光子电离[J].物理化学学报,1993,9(04): 442-446
323. 刘劲松;曾宪诚;邓郁.热动力学对比进度法II.2-2型可逆反应[J].物理化学学报,1993,9(05): 698-701
324. 程兆华;郑正明;张静;陈念贻.熔融CaF₂的径向分布函数[J].物理化学学报,1993,9(04): 438-441
325. 刘劲松;曾宪诚;田安民;邓郁.热动力学对比进度法I.可逆反应热动力学模型[J].物理化学学报,1993,9(04): 509-515
326. 陈从香;王学军;马兴华.CH(A²A)被O₂、CS₂和环乙烷猝灭的速度常数[J].物理化学学报,1993,9(03): 398-401
327. 刘若庄;马思渝;李宗和;CH与H₂分子反应动力学及迭态反应的研究理论[J].物理化学学报,1993,9(02): 155-160
328. 高英;王之朴.停止流动法研究K₂FeO₄氧化乙醇酸的动力学[J].物理化学学报,1993,9(01): 70-76
329. 王汉章;张德成;郭松山;包涵冰;杨立;陆振荣.p-CH₃C₆H₄SR型硫醚与钯(I)配合物热分解反应动力学[J].物理化学学报,1993,9(01): 103-106
330. 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
331. 董绍俊;宋发益.聚苯胺薄膜修饰电极对抗坏血酸的电催化氧化[J].物理化学学报,1992,8(01): 82-86
332. 李清华;张桂恩.硫酸铵分解动力学及其分解机理的研究[J].物理化学学报,1992,8(01): 123-127
333. 陈从香;朱梦霞;王利;邹建宏.CS₂和IO(³P)及N(⁴S)原子化学反应动力学[J].物理化学学报,1992,8(02): 226-231
334. 陈德应;居延之.OH+C₂H₂与OH+C₂H₄加成反应的热力学和动力学[J].物理化学学报,1992,8(02): 236-239
335. 王海龙;王秀喜;王宇;梁海飞.金属Cu低指数表面熔化行为的分子动力学模[J].物理化学学报,2006,22(11): 1367-1371
336. 沈振恩;王桂良;唐寅轩.靛蓝胭脂红的光谱电化学研究 II. 靛蓝胭脂红相电子转移动力学[J].物理化学学报,1992,8(04): 476-480
337. 谢恩海;孟庆虎;王之朴.二过碘酸合镍(IV)氧化酒石酸钠的动力学[J].物理化学学报,1992,8(04): 500-504
338. 宏存茂;林秋竹;韩德刚.LaNi₆合金的吸氢动力学[J].物理化学学报,1992,8(05): 586-594
339. 章萍萍;张五昌;张挺芳;周文娟;王志勤;钯(I)配合物和氯化锌在DMF中阴极还原的动力学[J].物理化学学报,1992,8(05): 668-672
340. 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
341. 艾宏娟;黄道惠;张玉军;王水兴.油醋氢化的动力学模型[J].物理化学学报,1992,8(06): 789-794
342. 戴建波;白令君;张一宝;臧维茹;江冬青;顾卓英;赵学庄.肾上腺素氧化反应的研究——氧化反应动力学和机理以及自由基中间体[J].物理化学学报,1991,7(03): 260-269
343. 程兆华;张静;郑正明;陈年华.超离子导体CaF₂中的Ca²⁺亚晶格和F⁻亚晶格[J].物理化学学报,1991,7(04): 390-393
344. 朱志昂;夏新;陈荣锦.对位取代四苯基卟啉铜(I)的生成动力学及其它金属离子的影响[J].物理化学学报,1991,7(04): 456-461
345. 马玉超;张立敏;庄秀娟;王金婷;杨茂萍;俞书勤.CS₂⁺离子 C²Z_g⁺←B²Z_g⁺跃迁的Franck-Condon因子计算以及与光解离谱的比较[J].物理化学学报,2006,22(12): 1532-1536
346. 徐映宏;邓郁.热动力学的研究 X.一级反应的热谱峰高法[J].物理化学学报,1991,7(05): 601-604
347. 邓俊;汤正诠.LiCl急冷玻璃形成过程中局部结构的分子动力学模拟——基于周期性边界条件的Voronoi多面体计算[J].物理化学学报,1991,7(05): 571-576
348. 王杰;杨振耀.混和溶剂氨基酸解离热力学 IV. 278.15-318.15 K下甘氨酸-20Mass%葡萄糖-水体系[J].物理化学学报,1991,7(06): 716-720
349. 那平;张帆;李艳妮.水化Na-Mg-蒙脱石的分子动力学模拟[J].物理化学学报,2006,22(09): 1137-1142
350. 刘义;谢昌礼;屈松生;邓凤姣;郭煜.线粒体外代謝热动力学研究[J].物理化学学报,1995,11(10): 929-931
351. 姚占力;高世扬;朱黎霞.Li₂O·2B₂O₃·H₂O过饱和溶液20℃结晶动力学研究[J].物理化学学报,1995,11(11): 1048-1052
352. 吕雯;吕焯;牛彦;雷小平;毒蕈碱M₁受体的同源模建和分子对接[J].物理化学学报,2009,25(07): 1259-1266
353. 计敏;甄军锋;张群;陈晓.时间分辨傅立叶变换红外发射光谱技术研究叔丁基亚硝酸酯的光解动力学[J].物理化学学报,2009,25(08): 1641-1644
354. 刘伟雄;杨阳;邵菊香;宋文艳;李象远;乐嘉陵.空气污染组分H₂O和CO₂对乙烯燃烧性能的影响[J].物理化学学报,2009,25(08): 1618-1622
355. 张昌华;张延;张嵩;张冰.氯碘甲烷在A带的光解动力学[J].物理化学学报,2009,25(08): 1708-1712
356. 张盛;夏元钦;陈德应.N²⁺₂离子在线偏振和圆偏振激光场中的解离[J].物理化学学报,2009,25(08): 1683-1688
357. 赵伟涛;陈海翔;周建军;刘乃安.森林泥炭的热解特性及热解动力学[J].物理化学学报,2009,25(09): 1756-1762
358. 赵健伟;王奋英;蒋璐芸;尹星;刘云红.利用傅立叶变换研究铜晶纳米线的断裂行为[J].物理化学学报,2009,25(09): 1835-1840
359. 孔德金;邹薇;郑均林;祁晓风;房蔚业.MFI/MFI壳核分子筛合成的影响因素及结晶动力学[J].物理化学学报,2009,25(09): 1921-1927
360. 高廷红;刘让苏;周丽丽;田泽安;谢泉.液态Ca₂Mg₃合金快速凝固过程中团簇结构的形成特性[J].物理化学学报,2009,25(10): 2093-2100
361. 岳彪;吕东生;李伟善;雷建飞;赵智灵.热处理碳纸电极上VO²⁺/VO⁴⁻氧化还原动力学[J].物理化学学报,2009,25(10): 1972-1978
362. 孙小莉;曾庆轩;冯长根.多胺型阴离子交换纤维吸附铕(VI)的动力学[J].物理化学学报,2009,25(10): 1951-1957
363. 王晓琴;周正发;任凤梅;汪理;马海红;徐卫兵.水溶性封闭异氰酸酯单体的解封动力学[J].物理化学学报,2009,25(11): 2181-2185
364. 李旭;徐升华;孙祉伟.流体动力学作用对粒子聚集影响的布朗动力学模拟[J].物理化学学报,2009,25(10): 2130-2136
365. 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
366. 陈日耀;陈震;郑曄;陈晓.黄彩霞.CoPc(COOH)₈·SA/nCS双层膜的制备及表征[J].物理化学学报,2009,25(12): 2438-2444
367. 李博;刘明;胡文祥.芬太尼类化合物与阿片μ受体相互作用的分子对接与分子动力学模拟[J].物理化学学报,0,0: 0-0
368. 解辉;刘朝.纳米通道内表面润湿性对气泡的作用[J].物理化学学报,2009,25(12): 2537-2542
369. 薛亮;赵风起;邢晓玲;高红旭;仪建华;胡荣祖;1,3,3-三硝基氯杂环丁烷在乙酸乙酯和N,N'-二甲基甲酰胺中的溶解行为[J].物理化学学报,2009,25(12): 2413-2416
370. 张胜飞;孙丽丽;徐俊波;周涵;温浩.重质油胶体聚集体的耗散粒子动力学模拟[J].物理化学学报,0,0: 0-0
371. 黄承;胡亚华;刘世林;周晓国.N₂O分子C¹π态的吸收光谱及解离动力学[J].物理化学学报,0,0: 0-0
372. 姜富灵;瞿高红;丁黎;岳可芬;刘婉;史启桢;文振翼.NO₂·OH·OH·OH对HMX初始热解的影响[J].物理化学学报,0,0: 0-0
373. 王永霞;段雪梅;王钦;刘靖尧.甲硫醇和氢原子反应的从头算直接动力学[J].物理化学学报,0,0: 0-0