

动力学体系二维数据的秩分析及其应用

陈迪钊;梁逸曾;徐承建

怀化学院化学系, 怀化 418008;中南大学化学化工学院, 长沙 410083

摘要:

详细论证了动力学体系中存在的多种共线性情况,以及在此情况下二维数据阵的秩与独立反应数及组分数的关系.分析了通过增秩这一方式来判断体系组分数的条件.讨论了反应间存在物质交换对数据阵秩的影响.建立起一套通过秩分析判断未知动力学体系中存在的反应组分数、独立反应数以及可能反应机理的方法.将秩分析技术应用到聚苯胺与质子酸反应,初步分析了该体系存在的多种吸光性结构及结构变化.确定了 $[H^+]=0.01\sim 0.1\text{ mol}\cdot\text{L}^{-1}$ 范围内,聚苯胺与质子酸反应存在一个三结构两步互变过程.

关键词: 动力学 秩分析 因子分析 聚苯胺 反应机理

收稿日期 2002-01-03 修回日期 2002-04-26 网络版发布日期 2002-10-15

通讯作者: 梁逸曾 Email: yzliang@public.cs.hn.cn

本刊中的类似文章

1. 朱志昂;黄小群;陈荣梯.铜(II)与四(间甲基)苯基卟啉(II)取代反应动力学[J]. 物理化学学报, 1993,9(05): 635-641
2. 席海涛;高亚军;孙小强;殷开梁;陈正隆.缺电子联吡啶环蕃与富电子苯醚链的结合能[J]. 物理化学学报, 2009,25(02): 377-381
3. 程兆年;丁弘;雷雨;许立.RbCl溶解的分子动力学模拟研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(10): 890-895
4. 周培疆;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. 史扬;高振;朱起鹤;孔繁敖.气相中原子分子成簇动力学 II.碳簇形成动力学[J]. 物理化学学报, 1996,12(03): 208-212
8. 张强;黄荣彬;刘朝阳;郑兰荪.原子簇离子解离统计分布的动力学研究[J]. 物理化学学报, 1996,12(03): 213-217
9. 史扬;高振;朱起鹤;孔繁敖.气相中原子分子成簇动力学 I.动力学基本模型[J]. 物理化学学报, 1996,12(03): 196-201
10. 孙利鹏;马骛;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·3B₂O₃-18%MgSO₄-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.钙、镁离子对淀粉酶催化激活作用的热力学[J]. 物理化学学报, 2002,18(12): 1125-1128
15. 范山湖;余向阳;湛社霞;陈六平;古喜兰;李玉光;石宗炳.循环流动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. 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区[J]. 物理化学学报, 2001,17(07): 636-640
17. 赵铭姝;翟玉春;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
18. 阮文娟;朱志昂;林华宽;陈正华;陈红卫;杨秀樾;邵迎;陈荣梯.锌、镉及汞卟啉生成反应动力学研究[J]. 物理化学学报, 1997,13(04): 335-343
19. 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
20. 潘湛昌;陈启元;黄慧民.铂电极上醋酸-醋酐溶液中Mn(III)/Mn(II)电对研究 [J]. 物理化学学报, 2001,17(12): 1067-1071
21. 周培疆;谢昌礼;杨锋;屈松生;周涵韬;凌杏元;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

扩展功能

本文信息

PDF(1853KB)

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

▶ 动力学

▶ 秩分析

▶ 因子分析

▶ 聚苯胺

▶ 反应机理

本文作者相关文章

▶ 陈迪钊

▶ 梁逸曾

▶ 徐承建

- 学学报, 1998,14(05): 467-471
22. 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
23. 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
24. 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
25. 徐立进;严继民;高振;孔繁敖;朱起鹤. $\text{CH}_4 + \text{O}(^3P) \rightarrow \text{CH}_3 + \text{OH}$ 反应的准经典轨线研究[J]. 物理化学学报, 1997,13(11): 999-1004
26. 高义德;刘云珍;冉琴;陈从香. CCl_2 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
27. 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
28. 徐立进;王学斌;严继民;孔繁敖. $\text{Cl} + \text{C}_2\text{H}_6 \rightarrow \text{HCl} + \text{C}_2\text{H}_5$ 反应的准经典轨线研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(02): 158-163
29. 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
30. 杨超;江学良;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
31. 黄维;俞启全;金韵;韦裕峰. 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
32. 黄维;俞启全;金韵. $\text{CeO}_2/\text{SiO}_2$ 的制备及丁烯异构化动力学[J]. 物理化学学报, 1995,11(01): 9-14
33. 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 $\text{Mn}_2(\text{CO})_{10}$ 的多光子电离解离[J]. 物理化学学报, 1995,11(02): 189-192
34. 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的研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(01): 38-45
35. 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
36. 黄世萍;刘洪霖;马彦会;唐波;陈念贻. ZnCl_2 熔盐的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 1995,11(01): 71-73
37. 单金缓;刘铁英;王安周. 二过碘酸合铜(III)氧化氨基丙酸的动力学[J]. 物理化学学报, 1994,10(12): 1110-1115
38. 汪鹏飞;岳志军;吴世康. 交叉共轭型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
39. 张红宇;韦钰. Langmuir膜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
40. 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
41. 单金缓;刘铁英. 二过碘酸合铜(III)氧化乙醇胺的动力学及机理[J]. 物理化学学报, 1994,10(10): 947-949
42. 姚萍;史鸿运;邓洁;张云黔;王一波;范寿璋. 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
43. 程兆年;郝正明;许立;陈念贻. 熔融 NaCaF_3 、 Na_2CaF_4 和 Na_3CaF_5 的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 1994,10(08): 676-679
44. 单金缓;凌芹;王安周. 烷基黄原酸合钴(III)与二丙胺第三步反应动力学[J]. 物理化学学报, 1994,10(08): 728-732
45. 阚锦晴;穆绍林. 邻菲罗啉对固定尿酸酶催化反应动力学的影响[J]. 物理化学学报, 1994,10(07): 648-653
46. 王曰/山明;汪尔康. Cu(II)-2,2' -联喹啉在液/液界面转移及反应动力学[J]. 物理化学学报, 1994,10(05): 418-423
47. 杨利庭;常青;王逢利;王安周. 二羟基二过碘酸合镍(IV)氧化氨基丙酸的动力学[J]. 物理化学学报, 1994,10(04): 297-302
48. 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
49. 居冠之;居泉. $\text{Cl} + \text{CH}_4$ 反应的电子相关、基组与化学活性[J]. 物理化学学报, 1994,10(01): 92-95
50. 张洪林;刘永军;孙海涛;孙秀芳;单庆祝;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
51. 郭金玉;张建国;张同来;吴瑞凤;于伟. 三维网状结构配位聚合物 $[\text{Cu}(\text{HCOO})_2(\text{H}_2\text{O})_2]_\infty$ 晶体的热分解机理[J]. 物理化学学报, 2006,22(10): 1206-1211
52. 葛素红;董光兴;程新路;杨向东. 土卫六大气中 H_2 和 N^+ 反应的动力学研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(10): 1217-1221
53. 熊亚;潘正君;王宏;吴鼎泉;康立山;屈松生. 线粒体体外代谢热动力学模型及其演化优化研究[J]. 物理化学学报, 1997,13(06): 503-509
54. 闪海威;陈栋华;唐万军. MC_2O_4 ($\text{M}=\text{Mn}, \text{Fe}, \text{Co}, \text{Ni}, \text{Cu}, \text{Zn}$)的热力学及其热分析动力学[J]. 物理化学学报, 2005,21(09): 1001-1005
55. 袁军;邓明进;艾军;解孝林;郑启新. 聚羟基丁酸-戊酸的非等温热分解反应动力学[J]. 物理化学学报, 2005,21(09): 988-992
56. 王文清;闵玮;龚葵. 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

57. 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
58. 周培疆;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
59. 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
60. 望天志;吴鼎泉;黄在银;屈松生;李东风;廖展如;万洪文.紫色酸性磷酸酯酶模型化合物水解ATP的研究[J]. 物理化学学报, 1997,13(07): 643-646
61. 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
62. 薛永强;杜建平;王沛东;王志忠.粒度对多相反应动力学参数的影响[J]. 物理化学学报, 2005,21(07): 758-762
63. 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
64. 冯嘉春;段瑜;焦瑛;张秀菊;陈鸣才.铜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
65. 王鸿梅;唐晓阳;储焰南;周士康.亚稳态SO(c¹Σ⁻,v'=0)的猝灭动力学[J]. 物理化学学报, 2005,21(11): 1195-1197
66. 刘朋军;杜奇石;常鹰飞;荣顺.HNCS与CH₂(X²Π)反应微观动力学的理论研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(12): 1347-1351
67. 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
68. 吴爱玲;赵显;关大任;易希璋.取代苯体系的二阶非线性光学性质:动力学李代数方法[J]. 物理化学学报, 2005,21(11): 1319-1323
69. 宋文玉;赵荣慧;降青梅.铋(III)离子催化铈(IV)离子氧化四氢糠醇的动力学及机理[J]. 物理化学学报, 2005,21(08): 929-933
70. 刘士军;陈启元;舟桥重信.超临界二氧化碳中吡啶与钴(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
71. 刘春莉;李春华;陈慰祖;王存新.用分子模拟方法研究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
72. 李曼尼;杨文斌;新民.Na型斜发沸石上Na⁺-Cu²⁺离子交换过程动力学[J]. 物理化学学报, 1997,13(03): 224-229
73. 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
74. 苑世领;吴锐;蔡政亨.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
75. 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
76. 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
77. 宋文玉;李红变;刘红梅.铋(III)离子催化铈(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
78. 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
79. 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
80. 黄钦;侯廷军;徐筱杰.基于遗传算法的Caco-2细胞渗透系数的研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(04): 372-377
81. 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
82. 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
83. 焦宝娟;朱丽;杨旭武;陈三平;高胜利;史启祯.三元配合物Tb(Et₂dca)₃(phen)的热化学性质[J]. 物理化学学报, 2004,20(07): 767-771
84. 张伟南;袁誉洪;李丽清;陈栋华.二水草酸锌脱水的分解动力学研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(01): 33-37
85. 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
86. 张栋杰;姚熹.弛豫铁电体的微畴-宏畴转变与生长动力学[J]. 物理化学学报, 2004,20(07): 712-716
87. 徐芬;孙立贤;谭志诚;梁建国;周丹红;邸友莹;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
88. 白玉林;陈向荣;杨向东;芦鹏飞.硫团簇S_n(n=2~8)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
89. 殷开梁;徐端钧;夏庆;叶雅静;郭国英;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
90. 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
91. 王舜;高庆宇;王新红;林娟娟;赖顺安;莫言学.亚硝酸盐-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

92. 文衍宣;王励生;金作美.模拟磷矿脱镁废水中镁离子的交换动力学研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(10): 913-916
93. 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
94. 苏育志;郭仕恒;萧翼之;肖敏;杨绮琴.2,2'-二氨基苯氧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
95. 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
96. 聂华荣;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
97. 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
98. 刘新;孟长功;刘长厚.金属银在高升温速率下的熔化和过热行为[J]. 物理化学学报, 2004,20(03): 280-284
99. 曾跃;郑仰存;易建龙;于尚慈;杨春明;李则林.次亚磷酸根在镍电极上的电氧化机理与动力学[J]. 物理化学学报, 2003,19(08): 718-722
100. 邵俊;徐桦;陆文聪;陈念贻.高压Na₂O-SiO₂系输运性质反常的分子模拟[J]. 物理化学学报, 2004,20(03): 237-239
101. 高义德;胡长进;金瑾;陈旸;陈从香.CCl₂(A¹B₁,a³B₁)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
102. 张弢;张晓茹;吴爱玲;管立;徐昌业.金属铜升温熔化过程的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2003,19(08): 709-713
103. 张荣;谭载友;郑敦胜;罗三来;李浩然.特殊缔合体系TFE水溶液分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2008,24(03): 428-432
104. 高红旭;张海;赵凤起;胡荣祖;马海霞;徐抗震;仪建华;徐司雨;高茵.N-脒基脲二硝酰胺放热分解反应的分子动力学行为[J]. 物理化学学报, 2008,24(03): 453-458
105. 耿春宇;丁丽颖;韩清珍;温浩.气体分子对甲烷水合物稳定性的影响[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 595-600
106. 张小弟;李伟善;黄幼菊;彭海燕.玻碳电极上DTAB对氧还原反应的促进作用[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 691-694
107. 徐鹏;宋乐新.超分子中主体热分解行为的多样性分析——残存态环糊精的热分解[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 729-736
108. 李春宏;仇卫华;康晓丽;周国治;鲁雄刚;李福.固相反应合成Ba_{1.0}Co_{0.7}Fe_{0.2}Nb_{0.1}O_{3-δ}的动力学[J]. 物理化学学报, 2008,24(05): 767-771
109. 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
110. 陈荫;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
111. 阮艳莉;唐致远.LiFePO₄的合成及其热分析动力学[J]. 物理化学学报, 2008,24(05): 873-879
112. 董林茂;李晓东;杨荣杰.基于质谱的六硝基六氮杂异伍兹烷热分解动力学[J]. 物理化学学报, 2008,24(06): 997-1001
113. 崔宝秋;宫利东;赵东霞.微过氧化物酶水溶液的ABEEM/MM动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2008,24(06): 1035-1040
114. 马伟;王苏;崔季平;张胜涛;范秉诚;何宇中.酚醛树脂的热解动力学模型[J]. 物理化学学报, 2008,24(06): 1090-1094
115. 王亚明;刘岚;罗远芳;贾德民.氟橡胶/改性乙丙橡胶并用胶的热稳定性[J]. 物理化学学报, 2008,24(06): 1100-1104
116. 张军;赵卫民;郭文跃;王勇;李中谱.苯并咪唑类缓蚀剂缓蚀性能的理论评价[J]. 物理化学学报, 2008,24(07): 1239-1244
117. 毛荣荣;吕洋;周立川;李钦宁;李慎敏.分子动力学模拟纳米尺寸限制体系下氙溶液中I₂的振动能量弛豫[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1451-1458
118. 沈秋婵;梁婉春;胡兴邦;李浩然.甲酰胺水溶液的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2008,24(07): 1169-1174
119. 张连水;王百荣;党伟;肖广长生.脉冲流光放电激发解离H₂O分子的动力学过程[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1524-1528
120. 徐司雨;赵凤起;仪建华;胡荣祖;高红旭;李上文;郝海霞;裴庆.含CL-20的改性双基推进剂的热行为及非等温反应动力学[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1371-1377
121. 王丽娜;刘忠伟;朱爱民;赵国利;徐勇.介质阻挡放电等离子体中·OH和HO₂·自由基的数值模拟计算[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1400-1404
122. 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
123. 沈新媛 吕洋 李慎敏.人体端粒中(3+1)混合结构G-四链体稳定性的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 783-791
124. 崔巍 张怀 计明娟.新型二氟甲基磷酸类酪氨酸蛋白磷酸酯酶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
125. 赵勇山 郑清川 张红星 楚慧碧 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
126. 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
127. 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
128. 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
129. 骆兆文;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
130. 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
131. 刘让苏;周群益;李基永.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
132. 顾健德;田安民;鄢国森.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
133. 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
134. 谭安民;谢昌礼;屈松生;赵必钧.厌氧菌生长代谢的微量热学研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(10): 954-956
135. 渠洪波;梁峰;魏政荣;李海洋;张冰.离子速度影像法研究*n*-C₇H₁₅Br分子光解反应动力学[J]. 物理化学学报, 2006,22(09): 1106-1110
136. 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
137. 高振霆;刘义;黄玉屏;沈萍;屈松生.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
138. 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
139. 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
140. 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
141. 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
142. 刘彦方;赵敏;申世刚;高俊刚.TBBPAER/DDM的固化反应动力学[J]. 物理化学学报, 1998,14(10): 927-931
143. 魏克成;陆冬云;周涵;徐未;温浩;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
144. 卢秀慧;王沂轩;邓从豪.二氯卡宾与甲醛环加成反应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(09): 784-788
145. 杨防祖;黄令;许书楷;周绍民.添加剂作用下钨电沉积行为研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(05): 463-467
146. 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
147. 李媛;黄保华;吕迎潮;金声;邢其毅.邻氨基苯硫基-1-丙酮缩合反应动力学及机理[J]. 物理化学学报, 1998,14(11): 1048-1052
148. 孟祥光;李建梅;庞钦辉;朱杰;臧蓉蓉;曾宪诚.CTAB对H₂O₂氧化抗坏血酸反应动力学的影响[J]. 物理化学学报, 2005,21(03): 283-286
149. 司维江;嵇淑萍;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
150. 秦星;张秉坚;张晖;胡文暄.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
151. 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
152. 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
153. 方美娟;骆书娜;王河清;刘万云;赵玉芬.磷酸化对丙氨酸与溶菌酶相互作用的影响[J]. 物理化学学报, 2005,21(09): 1042-1045
154. 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
155. 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[J]. 物理化学学报, 1997,13(01): 52-55
156. 吴新民;刘建华;李巍;戚传松.稀土氨基酸配合物RE(Val)Cl₃·6H₂O(RE = Nd, Sm)的热分解动力学[J]. 物理化学学报, 2006,22(08): 942-946
157. 马建军;张志红;丛书林 .N(⁴S)+ NO(²Π)→N₂(³Σ_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
158. 刘义;谭智群;熊亚;宋昭华;屈松生;王元香.细胞动力学研究VII.植物细胞非生长代谢特征[J]. 物理化学学报, 1997,13(01): 68-70
159. 蔡继业;刘奕;李亚东;成国胜;张伟;张冰;周士康;高军毅;龚知本.二极管激光探测法研究高振动NO₂与NH₃振动传能[J]. 物理化学学报, 1996,12(09): 786-795
160. 高孝恢;高德;蒋淑芬.铋系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
161. 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

162. 许宗荣;高艳玲;Si₄Si₃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
163. 刘义;谭安民;谢昌礼;汪存信;屈松生;郝宗宇.细胞动力学研究 III.细菌算术级数式生长过程热动力学[J]. 物理化学学报, 1996,12(05): 451-455
164. 刘义;谭安民;谢昌礼;汪存信;屈松生;郝宗宇.细胞动力学研究 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
165. 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
166. 孙浩 蒋勇军 俞庆森 邹建卫.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
167. 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
168. 蒋勇 邱榕.基于直接关系图法的碳氢燃料复杂化学机理简化[J]. 物理化学学报, 2009,25(05): 1019-1025
169. 牛继南, 强颖怀.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
170. 曾凡桂, 贾建波.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
171. 宋其圣, 郭新利, 苑世领, 刘成卜.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
172. 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
173. 付一政, 刘亚青, 兰艳花.端羟基聚丁二烯/增塑剂共混物相容性的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2009,25(07): 1267-1272
174. 陶长贵, 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
175. 扈玫瑰 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, 0,(): 0-0
176. 赵健伟, 刘洪梅, 倪文彬, 郭彦, 尹星.从分子水平研究电子传递[J]. 物理化学学报, 2009,25(07): 1472-1480
177. 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, 0,(): 0-0
178. 李向富;陈宏善;孟凡顺;刘百幸.(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
179. 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
180. 李振泉;郭新利;王红艳;李青华;苑世领;徐桂英;刘成卜.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
181. 李凝 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
182. 万丽华 颜克凤 李小森 樊栓狮.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
183. 蔡开聪 王建平.乙醇醛的分子动态结构[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 677-683
184. 李军 冯杰 李文英 常海洲 谢克昌.强弱还原煤聚集态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
185. 张衡 赵凤起 仪建华 张晓宏 胡荣祖 徐司雨 任晓宁.3-硝基邻苯二甲酸酐的制备、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
186. 徐鹏 宋乐新.丁香油-β-环糊精包合物中残存态环糊精的热分解动力学[J]. 物理化学学报, 2008,24(12): 2214-2220
187. 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
188. 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
189. 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
190. 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
191. 付一政;刘亚青;梅林玉;兰艳花.HTPB与AI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
192. 杨晓峰;秦张峰;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
193. 侯吉旋 司黎明.流体系统模拟中邻区列表算法的优化理论[J]. 物理化学学报, 2009,25(03): 430-434
194. 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
195. 张予东;李宾杰;徐翔民;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
196. 李姝;刘磊;曹臻;汪继强;言天英.室温熔盐二(三氟甲基磺酸酐)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
197. 王毅;姜炜;程志鹏;张先锋;安崇伟;宋小兰;李凤生.核-壳结构Cu/Al微纳米复合材料与 WO_3 的热反应性能[J]. 物理化学学报, 2007,23(11): 1753-1759
198. 王颖;李贺先;王国昌;钟启林;杨海龙;袁伟;何炳林. M -(1-萘基)琥珀酰亚胺玻璃态的晶化[J]. 物理化学学报, 2007,23(08): 1257-1259
199. 马立文;陈白珍;何新快.羧酸盐尿素体系中三价铬电沉积机理[J]. 物理化学学报, 2007,23(10): 1607-1611
200. 张宝丽;邢永恒;葛茂发;孙政;李章册;韩晶;牛淑云.含有羧基配体的蝎型钒氧配合物的合成、结构及其热分解动力学[J]. 物理化学学报, 2007,23(11): 1701-1706
201. 仪建华;赵凤起;徐司雨;高红旭;胡荣祖;郝海霞;裴庆;高茵.柠檬酸铜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
202. 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
203. 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
204. 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
205. 董殿权;张凤宝;张国亮;刘亦凡. $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ 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
206. 孙景;胡胜亮;杜希文;雷贻文;江雷.毫秒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
207. 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
208. 延辉;苑世领;刘成卜.烯烃分子在氢终止 $\text{Si}(100)$ - 2×1 表面的自由基链反应[J]. 物理化学学报, 2008,24(01): 8-12
209. 孙丽美;曹殿学;王贵领;吕艳卓;张密林.纳米Pd上 H_2O_2 的电催化还原反应[J]. 物理化学学报, 2008,24(02): 323-327
210. 袁剑辉;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
211. 彭传校;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
212. 应国良;潘国卫;刘焕;聂青苗;陈庆虎.二维完全阻挫Josephson结阵列的非平衡态相变[J]. 物理化学学报, 2007,23(04): 617-619
213. 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
214. 申世刚;石红梅;孙汉文.二(氢过碘酸)合银(III)配离子氧化愈创甘油醚的反应动力学及机理[J]. 物理化学学报, 2007,23(03): 409-413
215. 颜承农;刘义;屈松生;陈春英;徐辉碧.细胞动力学研究VIII. Na_2SeO_3 对黑根菌作用特征[J]. 物理化学学报, 1997,13(04): 354-357
216. 丛红日;边秀房;李辉;王丽.液态 $\text{Al}_{80}\text{Fe}_{20}$ 合金的中程有序结构[J]. 物理化学学报, 2002,18(01): 39-44
217. 颜承农;刘义;宋昭华;屈松生.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
218. 田圣军;成庆堂;席国喜;娄向东;李靖华. 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
219. 徐桦;邵俊.氟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
220. 王永成;耿志远;陈宏善.羰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
221. 王丽;衣粟;边秀房. Ni_3Al 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
222. 孔景临;薛宽宏;邵颖;何春建;陈巧玲.镍纳米线电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
223. 王舜;林娟娟;黄振炎;高庆宇;赵敏;林振权.高碘酸盐-硫脲-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
224. 赵剑曦;叶向宇.苯在Pluronic F127和P123胶束水溶液中的增溶动力学 [J]. 物理化学学报, 2002,18(04): 377-380
225. 李权;王红艳;蒋刚;朱正和. $\text{Pu}(^7F_g)+\text{CO}(X^1\Sigma^+, 0, 0)$ 的分子反应动力学 [J]. 物理化学学报, 2002,18(04): 302-306
226. 侯廷军;安钰;茹炳根;徐筱杰.三种金属硫蛋白动力学稳定性的理论研究[J]. 物理化学学报, 2000,16(03): 221-225
227. 李振华;皮洪琼;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
228. 杨毅芸;孙世刚.铂单晶电极表面不可逆反应动力学I.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
229. 周健;朱宇;汪文川;陆小华;王延儒;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
230. 刘奉岭.不饱和类卡宾 $\text{H}_2\text{C}=\text{ClIF}$ 的密度泛函研究 [J]. 物理化学学报, 2002,18(03): 228-231
231. 陈同蕙;白耀文;孙仁慧.聚六亚甲基碳酸酯二醇增韧环氧树脂的固化动力学[J]. 物理化学学报, 1997,13(09):

- 848-852
232. 冯海霞;朱志昂;王传忠;阮文娟;李瑛;陈荣悌. 钴(II)酞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
233. 朱小蕾;周志华;卢文庆;黄锦凡;彭盘英. 由 CBr_4 分子动力学研究观察到的可能的新的相[J]. 物理化学学报, 1997,13(09): 815-821
234. 钱新明;王耘;冯长根;郑晓. 用加速量热仪研究 $\text{KClO}_3/\text{CuO/S/Mg-Al/C}_6\text{Cl}_6$ 的热分解[J]. 物理化学学报, 2001,17(01): 70-73
235. 张丽清;刘素兰;朱建新;姚淑华;谢颖. $\text{MgSO}_4\text{-H}_3\text{BO}_3\text{-H}_2\text{O}$ 体系水热条件下结晶动力学[J]. 物理化学学报, 2000,16(05): 468-471
236. 李彬;隋智通. $\text{CaO-MgO-Fe}_2\text{O}_3\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-SiO}_2$ 玻璃晶化机理[J]. 物理化学学报, 1998,14(07): 645-648
237. 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
238. 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
239. 陈海翔;刘乃安;范维澄. 基于差示扫描量热技术的生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
240. 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
241. 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
242. 曾跃;于尚慈;李则林;陈珂;周绍民. 乙醇在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
243. 陈平;郑小明;Meyer S; Temps F. FTIR研究HCO自由基与 NO_2 反应的动力学[J]. 物理化学学报, 2000,16(11): 1043-1047
244. 刘佐才;全向春;韩利平;王建龙. 喹啉的生物降解动力学[J]. 物理化学学报, 2000,16(07): 663-666
245. 钟澄;蒋益明;罗宇峰;廖家兴;吴玮巍;李劲. 两种表征金属有机双层膜络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
246. 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
247. 李辽沙;姜太平;车荫昌;隋智通. $\text{CaO-SiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-MgO-TiO}_x\text{-FeO}_y$ 体系氧化动力学[J]. 物理化学学报, 2000,16(08): 708-712
248. 高庆宇;魏贤勇;侯哲;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
249. 冉鸣;蒋刚;高涛;朱正和;蒋国强;罗德礼;武胜. $\text{Al}(^2P_u)+\text{H}_2(X^1\Sigma_g^+)$ 的分子反应动力学[J]. 物理化学学报, 2000,16(08): 694-700
250. 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
251. 侯廷军;朱丽荔;徐筱杰;计明娟;叶学其. 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
252. 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
253. 孙远华;张同来;张建国;杨利;乔小晶. 高氯酸碳酰肼钴、高氯酸碳酰肼镍快速热分解反应动力学[J]. 物理化学学报, 2006,22(06): 649-652
254. 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
255. 计明娟;叶学其;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
256. 周健;陆小华;王延儒;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
257. 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
258. 周培疆;谢昌礼;杨锋;屈松生;吴金平;李才伟. 大肠杆菌有限生长的微量热及非线性动力学研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(02): 174-177
259. 李青莲;陈寿田;姚朴;魏国;曲永和. 纳米钛酸钡生成的热分解机理[J]. 物理化学学报, 2000,16(02): 170-174
260. 谢洪平;蒋刚;张静;吕利刚;朱正和. $\text{H}+\text{CN}$ 体系中平行络合反应的动力学[J]. 物理化学学报, 1999,15(06): 573-576
261. 汪存信;梁毅;王文清;宋昭华;刘欲文;屈松生. 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
262. 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
263. 易平贵;商志才;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
264. 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
265. 董俊;史鸿运;邓洁;张云黔. 电沉积法制各镍与镧、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
266. 张志红;陈茂笃;丛书林;韩克利. $\text{S}(^1D)+\text{D}_2$ 反应的立体动力学理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(05): 557-561

267. 张晖;张秉坚;梁世强;路映红;胡文暄.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
268. 李焕勇;胡荣祖;张红;介万奇.线性升温条件下纳米ZnSe的生成动力学[J]. 物理化学学报, 2003,19(04): 315-319
269. 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作用的微量热研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(02): 134-138
270. 于海涛;池玉娟;傅宏刚;李泽生;孙家锺.磷炔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
271. 张大力;卢立柱;柯家骏.D2EHDTPA-TOA反协同萃取镉的速率方程[J]. 物理化学学报, 2004,20(03): 275-279
272. 刘新;孟长功;刘长厚.升温速率对金属铅的熔化和过热行为的影响[J]. 物理化学学报, 2003,19(08): 681-685
273. 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
274. 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
275. 王著;朱灵峰;张国宝;赵根锁;朱琰.改性羧甲基羟丙基田菁胶热裂解动力学研究[J]. 物理化学学报, 1996,12(07): 598-603
276. 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
277. 雷雨;程兆年;唐鼎元.分子动力学模拟研究β-BAB₂O₄熔体的结构[J]. 物理化学学报, 1996,12(06): 481-484
278. 王娅娟;祁学永;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
279. 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
280. 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
281. 程兆年;郑正明;张静;陈念怡.熔融CaF₂的径向分布函数[J]. 物理化学学报, 1993,9(04): 438-441
282. 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
283. 陈从香;王学军;马兴孝.CH(A²Δ)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
284. 刘若庄;马思渝;李宗和.CH与H₂分子反应动力学及选态反应的理论研究[J]. 物理化学学报, 1993,9(02): 155-160
285. 高英;王之朴.停止流动法研究K₂FeO₄氧化乙醇胺的动力学[J]. 物理化学学报, 1993,9(01): 70-76
286. 王汉章;张德成;郭松山;包涵冰;杨立;陆振荣.p-CH₃C₆H₄SR型硫醚与钡(II)配合物热分解反应动力学[J]. 物理化学学报, 1993,9(01): 103-106
287. 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
288. 李靖华;张桂恩.硫酸氢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
289. 陈从香;朱梦霞;王利;邹建宏.CS₂和O(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
290. 陈德展;居冠之.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
291. 王海龙;王秀喜;王宇;梁海弋.金属Cu低指数表面熔化行为的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2006,22(11): 1367-1371
292. 沈报恩;王桂良;唐寅轩.靛蓝胭脂红的光谱电化学研究 II. 靛蓝胭脂红复相电子转移动力学[J]. 物理化学学报, 1992,8(04): 476-480
293. 谢恩海;孟庆水;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
294. 宏存茂;林秋竹;韩德刚.LaNi₅合金的吸氢动力学[J]. 物理化学学报, 1992,8(05): 586-594
295. 章萍萍;张五昌;张挺芳;周文娟;王志勤.钡(II)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
296. 艾宏韬;黄道惠;张玉军;王水兴.油脂氢化的动力学模型[J]. 物理化学学报, 1992,8(06): 789-794
297. 戴建波;白令君;张一宝;臧雅茹;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及中间体[J]. 物理化学学报, 1991,7(03): 260-269
298. 程兆年;张静;郑正明;陈年怡.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
299. 朱志昂;夏新;陈荣梯.对位取代四苯基卟啉铜(II)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
300. 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
301. 邵俊;汤正詮.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
302. 那平;张帆;李艳妮.水化Na-蒙脱石和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

303. 刘义; 谢昌礼; 屈松生; 邓凤姣; 郭煜. 线粒体体外代谢热动力学研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(10): 929-931
304. 姚占力; 高世扬; 朱黎霞. $\text{Li}_2\text{O} \cdot 2\text{B}_2\text{O}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ 过饱和溶液 20°C 结晶动力学研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(11): 1048-1052
305. 吕雯, 吕炜, 牛彦, 雷小平. 毒蕈碱型 M_1 受体的同源模建和分子对接[J]. 物理化学学报, 2009,25(07): 1259-1266
306. 计敏, 甄军锋, 张群, 陈旻. 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, 0,(): 0-0
307. 刘伟雄, 杨阳, 邵菊香, 宋文艳, 李象远, 乐嘉陵. 空气污染组分 H_2O 和 CO_2 对乙烯燃烧性能的影响[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
308. 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, 0,(): 0-0
-