

利用傅立叶变换研究铜双晶纳米线的断裂行为

赵健伟, 王奋英, 蒋璐芸, 尹星, 刘云红

南京大学化学化工学院, 生命分析化学教育部重点实验室, 南京 210008

摘要:

利用超大规模分子动力学模拟程序研究了[111]||[110]双晶铜纳米线的拉伸断裂行为. 针对样品的周期性结构, 开发了离散傅立叶变换进行晶体特征分析的技术. 通过转换实空间的原子密度分布函数, 得到振幅-频率图和归一化的长轴原子密度分布图. 这两种处理方法提供了晶体取向和结晶状态的信息, 其中振幅-频率图适合描述大范围的晶体特征, 而归一化长轴的原子密度分布则反映了局部的细节. 利用该方法, 考察了不同拉伸时刻[111]||[110]双晶铜材料的晶体取向和结晶状态. 在拉伸过程中, 从振幅-频率图可以观察到4.78 nm⁻¹处的[111]特征峰和7.81 nm⁻¹处的[110]特征峰发生了低频移动和峰形变宽的现象; 同时在断裂时刻观察到了5.50 nm⁻¹处的[100]特征峰. 证明[111]||[110]铜双晶纳米线在拉伸形变过程中发生了界面融合, 同时界面层原子向[100]晶向的转变, 最终导致了双晶纳米线在[111]晶向一侧断裂. 傅立叶变换晶体分析技术在纳米材料和器件的研究中可以发挥积极的作用.

关键词: 分子动力学 原子密度分布 傅立叶变换 晶体结构 双晶

收稿日期 2009-03-30 修回日期 2009-06-02 网络版发布日期 2009-07-13

通讯作者: 赵健伟 Email: zhaojw@nju.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 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
2. 程兆年;丁弘;雷雨;许立.RbCl熔解的分子动力学模拟研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(10): 890-895
3. 陈学安;赵凌;李言;陈本明.PbCuP₂O₇的制备和晶体结构[J]. 物理化学学报, 1997,13(02): 113-118
4. 张浩;索全伶;王一兵;王丽;翁林红;冷雪冰.(μ₃-S)FeCo₂(CO)₇(dppfe)的合成和晶体结构[J]. 物理化学学报, 2002,18(08): 746-749
5. 任丽;孔繁放.OH自由基与CO反应的研究[J]. 物理化学学报, 2002,18(06): 486-489
6. 刘广;章士伟.新型十八核聚氧钼酸盐的合成与结构 [J]. 物理化学学报, 2002,18(07): 624-628
7. 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
8. 曾锡瑞;张勇;游效曾.过氧草酸酯结构和取代基对其化学发光的影响[J]. 物理化学学报, 2001,17(04): 361-363
9. 刘欣梅;阎子峰;王槐平.多产低碳烯烃及柴油用分子筛的设计 [J]. 物理化学学报, 2001,17(06): 547-551
10. 史学松;杜淼;卜显和.二氮环系配位化学的研究进展[J]. 物理化学学报, 2004,20(08S): 917-923
11. 黄世萍, 刘洪霖, 马彦会, 唐波, 陈念贻.ZnCl₂熔盐的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 1995,11(01): 71-73
12. 侯永康;高敏;李立璞;马志梅.测定晶体结构的系统试差法的研究(III) SYSTEM 90程序系统和应用[J]. 物理化学学报, 1994,10(12): 1087-1092
13. 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
14. 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
15. 吴秉芳;苏海全;阎秀英;胡襄;刘树堂;刘启旺;施剑秋.Rh₂(μ-SC₆H₅)₂(CO)₄的合成和晶体结构[J]. 物理化学学报, 1994,10(09): 847-851
16. 程兆年;郝正明;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
17. 张斌;王哲民;刘世雄;黄金陵.新的富金属三组元层状碲化物TaNi₂Te₂的合成和晶体结构[J]. 物理化学学报, 1994,10(06): 508-513
18. 王哲民;关铁堂;庄鸿辉.软X-射线分光晶体马来酸氢十八酯的晶体结构[J]. 物理化学学报, 1994,10(05):

扩展功能

本文信息

PDF(3062KB)

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

▶ 分子动力学

▶ 原子密度分布

▶ 傅立叶变换

▶ 晶体结构

▶ 双晶

本文作者相关文章

▶ 赵健伟

▶ 王奋英

▶ 蒋璐芸

▶ 尹星

▶ 刘云红

19. 郑吉民;车云霞;王如骥;王宏根.甘氨酸与间硝基苯甲酸加合物的合成及晶体结构[J]. 物理化学学报, 1994,10(01): 64-68
20. 马建方;卫革成;倪嘉缜.反丁烯二酸稀土配合物的合成及晶体结构[J]. 物理化学学报, 1993,9(06): 752-759
21. 杨清传;戴胜;周洪兵;周其凤;唐有祺.二种新型有侧向取代基液晶化合物结构及性质[J]. 物理化学学报, 1993,9(06): 795-801
22. 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
23. 李雪辉;张磊;李琼;耿卫国;叶玉嘉;王乐夫.1-正丁基-3-甲基咪唑溴化物离子液体TGA-FTIR研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(12): 1465-1468
24. 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
25. 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
26. 李林艳;李国宝;廖复辉;林建华. $\text{La}[\text{B}_5\text{O}_8(\text{OH})(\text{H}_2\text{O})]\text{NO}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ 的合成与结构[J]. 物理化学学报, 2005,21(07): 769-773
27. 杨建;丘泰;沈春英.一种新BCN化合物先驱体的合成及其表征[J]. 物理化学学报, 2005,21(12): 1373-1377
28. 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
29. 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
30. 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
31. 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
32. 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
33. 李增和;银陈;王如骥;王平;郭洪猷. $\text{Co}(\mu_2\text{-bpy})\text{V}_2\text{O}_6$ (bpy =4,4'-联吡啶)的水热合成和晶体结构[J]. 物理化学学报, 2003,19(12): 1133-1137
34. 白玉林;陈向荣;杨向东;芦鹏飞.硫团簇 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
35. 殷开梁;徐端钧;夏庆;叶雅静;邬国英;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
36. 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
37. 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
38. 邵俊;徐桦;陆文聪;陈念贻.高压 $\text{Na}_2\text{O}-\text{SiO}_2$ 系输运性质反常的分子模拟[J]. 物理化学学报, 2004,20(03): 237-239
39. 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
40. 邓文平 徐刚 万磊 刘安雯 高波 杜军和 胡水明 陈旸.固态氢分子基质隔离高分辨光谱实验装置及其应用[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1329-1334
41. 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
42. 胡晓春;张同来;乔小品;杨利;张建国;崔燕;张进.三硝基间苯三酚5-氨基四唑盐的晶体结构及热分解[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 576-580
43. 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
44. 张进;张同来;杨利;张建国;崔燕. $[\text{Ni}(\text{CH}_2)_3]\text{SO}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ 的合成、晶体结构及热分解特性[J]. 物理化学学报, 2008,24(05): 760-766
45. 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
46. 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
47. 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
48. 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 I_2 的振动能量弛豫[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1451-1458

49. 刘振华;敖国军;张同来;杨利;张建国;臧艳.(TAGH)₂(TNR)的合成、晶体结构及热分析[J]. 物理化学学报, 2008,24(07): 1155-1159
50. 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
51. 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
52. 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
53. 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
54. 赵勇山 郑清川 张红星 楚慧鄂 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
55. 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
56. 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
57. 李章朋 邢永恒 张元红 白凤英 曾小庆 葛茂发.蝎型钒氧苯甲酸配合物的合成、结构及量化计算[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 741-746
58. 郭金梁;孙丰;李勇;东长雄.氯化二氯代四苯基卟啉磷合二氯甲烷的晶体结构[J]. 物理化学学报, 1995,11(04): 360-364
59. 周淑琴;余建二;金祥凤;王庆广.高分辨双晶XRF研究酞菁化合物中硫杂质的化学态[J]. 物理化学学报, 1995,11(05): 447-449
60. 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
61. 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
62. 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
63. 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
64. 缪方明;刘小兰;陈红丽;崔雪琪;王宏根;王如骥;姚心侃.[双-(N-苯基水杨醛亚胺)](二氮杂菲)合钴(II)的合成与结构[J]. 物理化学学报, 1995,11(09): 824-827
65. 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
66. 王文芝;樊能廷.4,4'-一氧二(苯胺灵)的合成和晶体结构[J]. 物理化学学报, 2003,19(01): 75-78
67. 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
68. 魏坤;石燕;贺伦燕.纳米晶Dy_{1-x}Sr_xCoO_{3-y}晶体结构和红外光谱[J]. 物理化学学报, 1998,14(10): 957-960
69. 李悦青;邓立志;周晓海;张绍辉;杨清传.磺基水杨酸盐的晶体结构和倍频效应[J]. 物理化学学报, 1998,14(09): 778-783
70. 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
71. 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
72. 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
73. 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
74. 陈明安;谢玄;威海英;张新明;李慧中;杨汐.2A12铝合金表面双-(γ-三乙氧基硅丙基)四硫化物薄膜的特性[J]. 物理化学学报, 2006,22(08): 1025-1029
75. 庄鸿辉;吴鼎铭;黄建全;黄金陵.[Cu₄Cl₄(C₁₀H₁₆S₄)₂]的合成和晶体结构[J]. 物理化学学报, 1996,12(08): 761-765
76. 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
77. 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
78. 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
79. 张丽, 牛淑云, 金晶, 孙丽萍, 史忠丰, 李雷.以芳香族多羧酸为配体的Ni(II)配位超分子的研制及光诱导下的表面电子行为[J]. 物理化学学报, 2009,25(06): 1161-1166
80. 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

81. 付一政, 刘亚青, 兰艳花.端羟基聚丁二烯/增塑剂混合物相容性的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2009,25(07): 1267-1272
82. 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
83. 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
84. 王春光, 邢永恒, 谢妍, 李章朋, 李静, 曾小庆, 葛茂发.杂金属配位聚合物 $[\text{Ln}_2\text{Zn}_2(2,5\text{-pydc})_5(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ 的合成、结构及发光特性[J]. 物理化学学报, 2009,25(08): 1545-1549
85. 李向富;陈宏善;孟凡顺;刘百幸. $(\text{AgI})_n$ 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
86. 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
87. 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
88. 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
89. 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
90. 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
91. 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
92. 张海全;杨兵;杨光第;马於光.X射线单晶衍射研究系列功能七元杂环桥联苯构象[J]. 物理化学学报, 2008,24(10): 1879-1883
93. 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
94. 钱保华;马卫兴;许兴友;陆路德;杨绪杰;汪信.一维链状配位聚合物 $[\text{Zn}(\text{acac})_2(4,4'\text{-bipy})]_n$ 的合成、表征及量子化学研究[J]. 物理化学学报, 2008,24(09): 1650-1654
95. 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
96. 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
97. 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
98. 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
99. 熊静;蔡晓庆;尹萍;胡茂林.2-(甲苯-4-磺酰胺基)-苯甲酸的晶体结构、光谱及热性质[J]. 物理化学学报, 2007,23(08): 1183-1188
100. 张宝丽;邢永恒;葛茂发;孙政;李章朋;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
101. 董社英;薛春霞;黄廷林.阿托伐他汀钙与牛血清白蛋白的相互作用[J]. 物理化学学报, 2007,23(10): 1520-1524
102. 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
103. 杨维春;剧川川;凡素华;孙豪岭;王科志.奥扎格雷的晶体结构和酸碱性质[J]. 物理化学学报, 2008,24(01): 176-178
104. 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
105. 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
106. 燕姗姗;吴连弟;陈锋;张金龙.双晶型 TiO_2 薄膜的低温制备及表征[J]. 物理化学学报, 2007,23(03): 414-418
107. 李琦;温晓泉;蔡小海;王先荣;谢有畅.基于键价理论的晶体及表面结构分析软件[J]. 物理化学学报, 2002,18(06): 558-562
108. 宋相志;刘广;章士伟.分化诱导剂PMDH的合成及晶体结构[J]. 物理化学学报, 2002,18(06): 545-549
109. 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
110. 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
111. 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
112. 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):

113. 张文勤;张志明;郑艳;王淑丽;赵抒娜.1,3-二联苯基-2, 4-二吡啶基环丁烷的结构与光化学性质[J]. 物理化学学报, 2000,16(03): 207-213

114. 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

115. 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

116. 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

117. 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

118. 陈虎;许兴友;高健;杨绪杰;陆路德;汪信.高氯酸化三邻菲啉合镍晶体结构研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(07): 856-859

119. 赵波;张道;曹阳;陈文建;孙真荣;王祖庚.几种查耳酮的二阶非线性光学性质解析[J]. 物理化学学报, 2000,16(05): 422-425

120. 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

121. 丁二润;吴树林;李庆山;殷元骥.手性金属簇合物的合成、结构表征及其反应[J]. 物理化学学报, 1999,15(03): 241-246

122. 缪方明;樊志;周卫红;齐丽宁;李爱秀;刘小兰.三(2-苯并咪唑亚甲基)胺合锰的结构和量化计算[J]. 物理化学学报, 1999,15(09): 775-782

123. 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

124. 孙远华;张同来;张建国;杨利;乔小晶.高氯酸碳酸酐钴、高氯酸碳酸酐镍快速热分解反应动力学[J]. 物理化学学报, 2006,22(06): 649-652

125. 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

126. 王晓玲;索全伶;王一兵;孙杰. $\text{FeCo}_2(\text{CO})_7(\mu_3\text{-S})(\text{O}[\text{P}(\text{SCH}_2)_2]_2)$ 的合成与晶体结构[J]. 物理化学学报, 1999,15(08): 757-760

127. 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

128. 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

129. 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

130. 陈震;王如骥. $[\text{M}(\text{en})_3]_2\text{Sn}_2\text{Se}_6$ (M=Mn,Zn)的制备及其热稳定性[J]. 物理化学学报, 1999,15(12): 1070-1075

131. 卢雪芳;张海蓉;李嫫;刘景;杨国强.高压下两种8-羟基喹啉络合物的发光行为和结构变化 [J]. 物理化学学报, 2001,17(10): 898-903

132. 宁家成;杨鳌;关焯第;王哲明;严纯华.光活性酮咯酸衍生物的拆分及绝对构型的测定[J]. 物理化学学报, 2002,18(09): 821-824

133. 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

134. 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

135. 丛红日;边秀房;李喜珍;李辉.液态 $\text{Al}_{80}\text{Fe}_{20}$ 在快速冷却中的MD模拟 [J]. 物理化学学报, 2002,18(05): 414-419

136. 杨子良;杨四海;李国宝;林建华. $[\text{HN}(\text{C}_2\text{H}_5)_3][\text{B}_5\text{O}_6(\text{OH})_4]$ 的合成、结构和热稳定性[J]. 物理化学学报, 2007,23(03): 285-288

137. 雷雨;程兆年;唐鼎元.分子动力学模拟研究 β - BAB_2O_4 熔体的结构[J]. 物理化学学报, 1996,12(06): 481-484

138. 陆庆玮;王一兵;索全伶;吴宝山;孙杰. $\text{Fe}_3(\text{CO})_8(\text{C}_6\text{H}_5\text{NC})(\mu_3\text{-S})_2$ 的合成和晶体结构[J]. 物理化学学报, 1996,12(06): 532-536

139. 程兆年;郑正明;张静;陈念怡.熔融 CaF_2 的径向分布函数[J]. 物理化学学报, 1993,9(04): 438-441

140. 叶代启;梁红;黄仲涛. $\text{V}_2\text{O}_5/\text{TiO}_2$ 催化剂活性组分与载体相互作用研究[J]. 物理化学学报, 1993,9(04): 501-508

141. 庄鸿辉;吴鼎铭;卢灿忠;童纹. $(\text{C}_5\text{H}_7\text{S}_2)_2[\text{Cu}_3\text{I}_5]$ 的合成和晶体结构[J]. 物理化学学报, 1993,9(04): 548-552

142. 刘小兰;孙命;缪方明;李玉桂;王建基;韩玉真;徐筱杰.1-氧代 -4-(取代)-2,6,7-三氧杂-1-磷杂双环[2,2,2]辛

143. 刘永盛;舒宁成;胡宁海.一般型相角的代数估算方法[J]. 物理化学学报, 1992,8(02): 255-260
144. 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[J]. 物理化学学报, 2006,22(11): 1367-1371
145. 范广裕;王焕忠;崔秀山;李云政;朱鹤孙.1,2-二甲基-3-咪唑甲叉(异丙叉)丁二酸酐(1)和1,2-二甲基-3-咪唑乙叉(异丙叉)丁二酸酐(2)的晶体结构[J]. 物理化学学报, 1992,8(04): 545-549
146. 王增林;胡宁海;牛春吉;倪嘉缙;崔爱莉. $\text{Er}_2(\text{PhCH}_2\text{COO})_6 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ 的结构及热分析[J]. 物理化学学报, 1992,8(05): 642-646
147. 杜少斌;王瑾;马福泰;郑洪元;楼辉;敬承衡.La-Mn-Ni-O催化剂组成、结构、还原性能及氧化活性[J]. 物理化学学报, 1992,8(05): 630-635
148. 吴秉芳;阎秀英;刘启旺;刘树堂;胡襄.簇合物 $(\mu\text{-SC}_6\text{H}_5)(\mu\text{-P}(\text{SC}_6\text{H}_5)_2)\text{Fe}_2(\text{CO})_6$ 的合成和晶体结构[J]. 物理化学学报, 1992,8(06): 749-752
149. 曾广赋;郭鑫;王翠英;林永华;李涵.双-(磷酸二甲酯)合铜的红外光谱与晶体结构[J]. 物理化学学报, 1992,8(06): 778-782
150. 杨清传;李一莉;唐有祺;傅亨.*N*-苯基苯二甲酰亚胺和2-苯基喹噁啉晶态分子动力学行为研究[J]. 物理化学学报, 1991,7(01): 77-81
151. 新民;孙晓林;刘启旺;胡玉才. β -氰乙基- α -二茂铁邻卤代苄基醚的晶体和分子结构[J]. 物理化学学报, 1991,7(02): 136-139
152. 胡盛志;陈明旦;刘晓云;周原朗.乙酰丙酮和1-萘甲酸甲酯加成物 $\text{C}_{17}\text{H}_{18}\text{O}_4$ 的晶体结构和分子力学计算[J]. 物理化学学报, 1991,7(02): 191-195
153. 胡盛志;黄明生;程贤恩;周原朗.乙酰丙酮光二聚产物 $\text{C}_{10}\text{H}_{16}\text{O}_4$ 的晶体结构和分子力学计算[J]. 物理化学学报, 1991,7(02): 196-201
154. 上官国强;张树功;金钟声;刘淑莹;倪嘉缙. β -羧乙基(或 α -甲基乙基)锆三氯化物晶体和分子结构及其质谱分析[J]. 物理化学学报, 1991,7(02): 223-226
155. 金祥林;童友之;徐筱杰;唐有祺.大环穴醚双铜硫氰酸根配合物 $[\text{Cu}_2(\text{SCN})_3(\text{C}_{16}\text{H}_{38}\text{N}_6)]_2(\text{ClO}_4)_2$ 的合成和结构[J]. 物理化学学报, 1991,7(03): 323-328
156. 程兆年;张静;郑正明;陈年贻.超离子导体 CaF_2 中的 Ca^{2+} 亚晶格和 F^- 亚晶格[J]. 物理化学学报, 1991,7(04): 390-393
157. 邵俊;汤正途.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
158. 黄明生;张鹏;张颖;杨华惠;郑兰荪.膦桥多核银络合物 $[\text{Ag}_4(\text{dppe})_3(\text{NO}_3)_4]$ 的合成与结构[J]. 物理化学学报, 1991,7(06): 694-698
159. 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
160. 金祥林;姜亦佳;章士伟;唐有祺.咪唑桥连四氮大环双铜配合物合成和晶体结构[J]. 物理化学学报, 1995,11(10): 932-936
161. 袁伟;李贺先;王颖;王国昌.*N*-(1-萘基)-琥珀酰亚胺化合物晶体结构的理论预测[J]. 物理化学学报, 2006,22(09): 1071-1074
162. 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
163. 计敏;甄军锋;张群;陈旸.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
164. 高廷红;刘让苏;周丽丽;田泽安;谢泉.液态 Ca_7Mg_3 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