

氧原子在具有Pt皮肤的Pt₃Ni(111)表面的吸附和扩散

杨宗献, 于小虎, 马东伟

河南师范大学物理与信息工程学院, 河南 新乡 453007|河南省光伏材料重点实验室, 河南 新乡 453007

摘要:

用基于密度泛函理论的第一性原理方法研究了氧原子在具有Pt皮肤的Pt₃Ni(111)[记为Pt-skin-Pt₃Ni(111)]表面的吸附和扩散特性. 重点研究了氧原子在Pt-skin-Pt₃Ni(111)表面的扩散问题, 这对理解Pt-skin-Pt₃Ni(111)催化剂的高催化活性有重要意义. 结果表明: 氧原子容易吸附在fcc位; 催化剂Pt₃Ni中的Ni原子对催化剂的电子结构有很大影响, 从而改变了其对氧原子的吸附. 用推拉弹性带(NEB)方法搜索氧原子的扩散势垒, 并解释了Pt-skin-Pt₃Ni(111)催化剂的高催化活性.

关键词: 密度泛函理论 氧原子 扩散 Pt皮肤 Pt₃Ni(111)表面

收稿日期 2009-05-15 修回日期 2009-07-17 网络版发布日期 2009-09-09

通讯作者: 杨宗献 Email: yzx@henannu.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 李宝宗. 2-硫代黄嘌呤互变异构体的密度泛函理论计算[J]. 物理化学学报, 2004,20(12): 1455-1458
2. 郭彩红; 贾建峰; 郭玲; 武海顺. Ga_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. 王岩; 曾小兰; 汪玲. 硅杂苯与亲二烯体的Diels-Alder反应[J]. 物理化学学报, 2009,25(02): 371-376
4. 崔明侠; 董士红; 王文亮; 尹世伟; 吕剑. 4-(1,2-二苯基)乙烯基-4'-(N,N-二苯基-4-乙烯基苯胺基)联苯及其二氟取代衍生物的电子结构与光谱性质[J]. 物理化学学报, 2009,25(02): 347-352
5. 游晓莉; 徐布一; 李权; 赵可清. 噻唑类生色分子的电子光谱和非线性光学性质[J]. 物理化学学报, 2009,25(02): 314-318
6. 张胜涛; 谢昭明; 孙大贵; 陶长元; 潘复生. 掠射椭圆偏振谱学方法数理模型的研究[J]. 物理化学学报, 2002,18(11): 985-988
7. 王建朝; 何凤荣; 刘冠昆; 童叶翔. 二甲基甲酰胺中Y-Mg-Co合金膜的电化学制备[J]. 物理化学学报, 2002,18(08): 732-736
8. 夏少武; 魏庆莉; 张书圣. C₆₀-甲苯溶液溶剂化作用[J]. 物理化学学报, 1997,13(11): 1029-1033
9. 唐新村; 何莉萍; 陈宗璋; 夏熙. 恒压-恒流充电容量比值法测定石墨电极中的锂离子扩散系数[J]. 物理化学学报, 2002,18(08): 705-709
10. 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
11. 李权; 王红艳; 蒋刚; 朱正和. PuX₃ (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
12. 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
13. 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
14. 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
15. 刘斌; 李瑛; 林海潮; 曹楚南. 颜料体积浓度对水在醇酸涂层中传输行为的影响 [J]. 物理化学学报, 2001,17(03): 241-244
16. 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
17. 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
18. 龚玉斌. 糖酵解模型双曲型反应-扩散方程的非线性行为[J]. 物理化学学报, 1997,13(05): 466-472

扩展功能

本文信息

PDF(620KB)

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

▶ 氧原子

▶ 扩散

▶ Pt皮肤

▶ Pt₃Ni(111)表面

本文作者相关文章

▶ 杨宗献

▶ 于小虎

▶ 马东伟

19. 徐永祥;严川伟;高延敏;曹楚南.水汽在涂层中的扩散传输行为和存在形式 [J]. 物理化学学报, 2002,18(07): 649-652
20. 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
21. 郭荣;朱小军;宋根萍.β-CD对SDS胶束生成与特性的影响[J]. 物理化学学报, 2001,17(04): 314-318
22. 张永洪;毛希安.槲皮素在溶液中的化学交换和自扩散运动[J]. 物理化学学报, 2001,17(04): 300-304
23. 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
24. 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
25. 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
26. 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
27. 左渠, 陈天红, 吴佩强, 郑容.St-DVB凝胶化反应动力学机理的模型理论研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(01): 83-86
28. 冯益其;周国定.铜在低电导溶液中扩散机理的研究[J]. 物理化学学报, 1994,10(05): 472-475
29. 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
30. 李如生.局域平衡假设和反应—扩散过程[J]. 物理化学学报, 1994,10(01): 38-43
31. 唐新村;黄伯云;贺跃辉.LiMn₂O₄中锂离子扩散系数与充/放电次数的关系[J]. 物理化学学报, 2005,21(09): 957-960
32. 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
33. 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
34. 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
35. 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
36. 耿志远;王永成;汪汉卿.锆烯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
37. 徐灿;朱莉芳;高晨阳;曹娟.硅氧团簇(SiO₂)_nO₂H₄的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(02): 152-155
38. 黄飙;张家兴;李锐;申自勇;侯士敏;赵兴钰;薛增泉;吴全德.Al-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
39. 马文瑾;武海顺.AlmN₂⁻(m=1~8)团簇的结构与稳定性[J]. 物理化学学报, 2006,22(02): 178-182
40. 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
41. 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
42. 章应辉;阮文娟;吴扬.密度泛函理论研究5-单苯基吡啶分子的几何结构和拉曼光谱[J]. 物理化学学报, 2005,21(12): 1390-1394
43. 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
44. 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
45. 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
46. 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
47. 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
48. 赵鹏;方慧珏;薛腾;亓西敏;陆嘉星.计时电量法求NiCl₂(bpy)₃在DMF中的扩散系数和速率常数[J]. 物理化学学报, 2005,21(11): 1235-1239
49. 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
50. 张国庆;刘冰;姚素薇;郭鹤桐;何菲;龚正烈.NiPd/Si界面常温扩散及硅化物形成的XPS证据[J]. 物理化学学报, 1997,13(02): 164-168

51. 曾健青;张镜澄;郭向云;钟炳.表面扩散对CO氧化反应一级相变点的影响:蒙特卡罗模拟[J].物理化学学报, 1997,13(02): 183-187
52. 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
53. 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
54. 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
55. 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, 0,(): 0-0
56. 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, 0,(): 0-0
57. 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
58. 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
59. 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
60. 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
61. 周俊红;曾艳丽;孟令鹏;郑世钧.CIO与CIO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
62. 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
63. 徐艺军;李俊篔;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
64. 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
65. 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
66. 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
67. 唐致远;薛建军;李建刚;王占良.锂离子固相扩散控制下的材料放电过程 [J].物理化学学报, 2001,17(06): 526-530
68. 戴国亮;董向群;孙祉伟;胡文瑞.气相扩散法生长溶菌酶晶体的动态光散射研究[J].物理化学学报, 2001,17(06): 531-536
69. 唐致远;薛建军;刘春燕;庄新国.锂离子在石墨负极材料中扩散系数的测定[J].物理化学学报, 2001,17(05): 385-388
70. 刘恩辉;李新海;侯朝辉;何则强;邓凌峰.利用湿法反应制备的LiV₃O₈的锂离子扩散特性[J].物理化学学报, 2004,20(04): 377-381
71. 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
72. 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
73. 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
74. 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
75. 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
76. 邵恒;甘永平;黄辉;张文魁.顺、反丁烯二酸在铅电极上的电还原特性[J].物理化学学报, 2008,24(07): 1264-1270
77. 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
78. 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
79. 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
80. 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
81. 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
82. 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

83. 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
84. 洪功义;黎乐民;徐光宪;林宪杰.单碳基镧的键合异构现象[J]. 物理化学学报, 1995,11(06): 481-483
85. 胡道中;陈实;王子冬;赵淑红.MH电极中氢扩散系数的测定及其应用[J]. 物理化学学报, 2006,22(09): 1151-1154
86. 孙宝珍;陈文凯;徐香兰. NO 双分子在 $\text{Cu}_2\text{O}(111)$ 面吸附与解离的理论研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(09): 1126-1131
87. 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
88. 李权;黄方千.邻二氮杂苯-水复合物的氢键结构与性质[J]. 物理化学学报, 2005,21(01): 52-56
89. 吴文娟;赖瑛;郑康成;云逢存.抗癌性吲哚啉衍生物的定量构效关系[J]. 物理化学学报, 2005,21(01): 28-32
90. 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
91. 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
92. 毛诗珍;杜有如.表面活性剂在水溶液中性质的质子核磁共振研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(07): 675-680
93. 王莉;殷木省;朱永法. $\text{Ti/ZrN}_2/\text{Si}$ 薄膜界面扩散反应的研究[J]. 物理化学学报, 2003,19(07): 641-646
94. 王凡;张玉玲;卫庆硕;吴凯;谢有畅.阳极氧化铝模板上热扩散法制备 MoO_x 纳米阵列[J]. 物理化学学报, 2004,20(06): 637-641
95. 龚玉斌.低浓度三分子双曲型反应-扩散方程的非线性理论[J]. 物理化学学报, 1998,14(10): 913-918
96. 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
97. 吕海港;黎乐民.表观价态异常分子 EuS_2 和 Eu_2S 的泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(05): 413-418
98. 曹小龙;郭丽.多通道反应 $\text{O}(^3P)+\text{CH}_2\text{F}$ 的理论研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(06): 642-646
99. 王利江;张聪杰;武海顺. $\text{C}_n\text{B}_\delta$ ($\delta=0, \pm 1; n=1\sim 6$)团簇的结构、稳定性和光谱[J]. 物理化学学报, 2005,21(03): 244-249
100. 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
101. 李中华;王锐;陈振宁;韦永德;周百斌.用密度泛函方法研究 $\alpha\text{-}[\text{XMo}_{12}\text{O}_{40}]^n\text{-}$ 杂多阴离子的振动光谱[J]. 物理化学学报, 2004,20(11): 1329-1334
102. 吴梅银;王建国;张鉴清;曹楚南.掺锰氢氧化镍的结构与电化学性能[J]. 物理化学学报, 2005,21(05): 523-527
103. 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
104. 徐艺军;李俊箴;章永凡. O_2 在具有氧和镁缺陷 $\text{MgO}(001)$ 表面的吸附[J]. 物理化学学报, 2003,19(09): 815-818
105. 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
106. 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
107. 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
108. 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
109. 谢大弢;杨丽敏;吴瑾光;徐光宪.金属离子-脱氧胆酸-胆红素扩散体系中的周期沉淀[J]. 物理化学学报, 2005,21(02): 205-208
110. 田欣欣;张富强;冯瑞娟;武海顺. $\text{B}_{28}\text{N}_{28}$ 笼的稳定性及笼中四元环间键联类型对笼稳定性的影响[J]. 物理化学学报, 2006,22(08): 937-941
111. 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
112. 张文霞;王泽新. $\text{Ni}(115)$ 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
113. 张积树;张文霞;王泽新.氢原子在钪低指数表面上的吸附和扩散[J]. 物理化学学报, 1996,12(09): 773-779
114. 刘天晴;郭荣;沈明;于卫里.SDS和CTAB水溶液中胶束扩散系数及第一、第二CMC测定[J]. 物理化学学报, 1996,12(04): 337-340

115. 孙科举 李微雪 冯兆池 李灿. Fe- AlPO_4 -5分子筛的共振拉曼光谱[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 606-610
116. 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
117. 刘海洋 冷科 胡军 应晓 徐志广 张启光. A_3 型Corrole中位取代基对其 β 位 $^1\text{H-NMR}$ 的影响[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 694-700
118. 辜家芳 陆春海 陈文凯 许莹 郑金德. 气相和水溶液中铈酰配合物 $\text{UO}_2\text{L}^{2-n^*a}_n$ ($\text{L}=\text{F}^-$, CO_3^{2-} , NO_3^- ; $n=0-6$, $a=1, 2$)的结构和振动光谱[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 655-660
119. 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
120. 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 TiO_2 (101)表面的敏化机理[J]. 物理化学学报, 2009,25(05): 947-952
121. 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
122. 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
123. 孙秀良 黄崇品 张傑 陈标华. Beta分子筛中Al的分布和Bronsted酸的酸性强度[J]. 物理化学学报, 2009,25(06): 1136-1142
124. 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
125. 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
126. 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
127. 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
128. 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
129. 张富春 张志勇 张威虎 阎军峰 江妮. $\text{Pb}_x\text{Sr}_{1-x}\text{TiO}_3$ 的电子结构[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 61-66
130. 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
131. 赵新新 陶向明 宓一鸣 谭明秋. Pt/Cu(001)- $p(2\times 2)$ -O表面吸附结构的总能计算[J]. 物理化学学报, 2009,25(03): 567-574
132. 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
133. 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
134. 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
135. 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
136. 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
137. 郑金德 陆春海 孙宝珍 陈文凯. N_2 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
138. 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
139. 芦永红 徐海波 王佳 孔祥峰 姜晶. 氯化钠溶液中铜丝尺寸效应对腐蚀行为的影响[J]. 物理化学学报, 2008,24(10): 1907-1911
140. 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
141. 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
142. 陈新 李瑛 蒋青. 几种(C[^]N)Pt^{II}Q型配合物的电子结构和紫外-可见吸收光谱[J]. 物理化学学报, 2008,24(10): 1797-1802
143. 李宗宝 姚凯伦 刘祖黎. 有机-无机杂化化合物 $[\text{Cu}(\mu\text{-cbdca})(\text{H}_2\text{O})_n]$ 的电子结构及铁磁性[J]. 物理化学学报, 2008,24(09): 1681-1684
144. 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
145. 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

146. 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
147. 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
148. 刘海峰; 闫华; 刘志勇; 王少龙. 三氟化氯和水反应的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(07): 1099-1104
149. 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
150. 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
151. 梁云霄; 水淼; 李榕生. 硼/氮掺杂富勒烯 C_{20} 的结构和稳定性[J]. 物理化学学报, 2007,23(10): 1647-1651
152. 马淳安; 王晓娟; 李国华; 李美超; 陈松. 硝基甲烷在离子液体BMImBF₄中的电还原特性[J]. 物理化学学报, 2007,23(11): 1719-1722
153. 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
154. 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
155. 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
156. 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
157. 潘国祥; 倪哲明; 李小年. 类水滑石主体层板与客体CO₃²⁻、H₂O间的超分子作用[J]. 物理化学学报, 2007,23(08): 1195-1200
158. 姚素薇; 宋振兴; 王宏智. Co/Cu多层纳米线阵列的制备与磁性能[J]. 物理化学学报, 2007,23(08): 1306-1310
159. 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
160. 张炜; 王书亮; 马云庆; 王翠萍; 刘兴军. 铝基板的界面扩散对薄膜型TiO₂光催化活性的影响[J]. 物理化学学报, 2007,23(09): 1347-1352
161. 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
162. 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
163. 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
164. 李磊; 桑革; 张鹏程; 蒋刚. α -Al₂O₃阻氢微观机制研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(12): 1912-1916
165. 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
166. 徐伯华; 李来才; 王欣; 田安民. N₅H₅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
167. 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
168. 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
169. 贝逸翎; 主沉浮; 刘庆阳; 戚桂斌. 卤代硅烷(R₃SiX)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
170. 纪永军; 武海顺; 张富强; 贾建峰. (MN)_nH_m(M=Ga, In; n=1-4; m=1, 2)团簇的结构与稳定性[J]. 物理化学学报, 2008,24(02): 257-262
171. 王朝杰; 蔡跃飘. 铁原子与氮分子间的相互作用——单侧双配位构型[J]. 物理化学学报, 2008,24(02): 289-295
172. 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
173. 王科范; 刘金锋; 刘忠良; 徐彭寿; 韦世强. Si(001)表面分子束外延生长的小尺寸Ge量子点[J]. 物理化学学报, 2007,23(06): 841-845
174. 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
175. 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

176. 李思殿;郭巧凌;苗常青;任光明.含平面配位碳的过渡金属炔配合物 M_nH_nC 密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(05): 743-745
177. 伍彦;姚文清;朱永法. Ta_2O_5/Si 薄膜界面结构及光催化活性[J]. 物理化学学报, 2007,23(05): 625-629
178. 陈红香;周剑章;席燕燕;蓝碧波;冯增芳;姚光华;林仲华.Nafion基氧化还原聚合物在空气中的电荷传输性能[J]. 物理化学学报, 2007,23(03): 404-408
179. 毛诗珍;望天志;缪希茹;方晓文;袁汉珍;杜有如;朱麟勇;李妙贞;王尔鉴.Dendr. PE-PAA在水溶液中自聚集的NMR研究[J]. 物理化学学报, 2001,17(08): 743-746
180. 戴国亮;董向群;孙祉伟;胡文瑞.气相扩散速率对溶菌酶晶体生长的影响 [J]. 物理化学学报, 2002,18(01): 70-73
181. 蒲敏;王海霞;冯霄;吴东;孙予罕.DFT法研究3-羟基丙烯酸的双键旋转异构反应机理[J]. 物理化学学报, 2002,18(06): 522-526
182. 郭荣;纪云;张启清;张晓红.青霉素钾对CTAB胶束性质的影响 [J]. 物理化学学报, 2002,18(01): 50-54
183. 刘天晴;郭荣;于卫里;沈明.SDS/BA/ H_2O 体系的扩散系数与结构特性[J]. 物理化学学报, 1997,13(05): 401-406
184. 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
185. 李念力;陶长元;张胜涛;黄宗卿;丁培道.掠射椭圆偏振光对 $K_4[Fe(CN)_6]/K_3[Fe(CN)_6]$ 表面溶液层性质的研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(07): 654-658
186. 蒋文华;刘华;韩世钧.小分子在膜中无限稀释扩散系数的测定[J]. 物理化学学报, 1999,15(07): 668-672
187. 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
188. 柳文军;吴秉亮;查全性;张红.平面铂电极上吸附氢原子表面扩散系数的测定[J]. 物理化学学报, 1998,14(06): 481-484
189. 郁青红;周明华;雷乐成.新型气体扩散电极体系高效产 H_2O_2 的研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(07): 883-887
190. 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
191. 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
192. 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
193. 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
194. 严京峰;吴念祖;张宏霞;谢有畅;唐有祺;朱永法;姚文清. MoO_3 在 Al_2O_3 薄膜表面扩散的研究[J]. 物理化学学报, 1999,15(08): 684-687
195. 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
196. 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
197. 李辽沙;娄太平;车荫昌;隋智通. $CaO-SiO_2-Al_2O_3-MgO-TiO_x-FeO_y$ 体系氧化动力学[J]. 物理化学学报, 2000,16(08): 708-712
198. 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
199. 柳汀汀;罗国斌;应立明;赵新生.在单个分子水平上研究罗丹明标记的磷脂分子的扩散[J]. 物理化学学报, 2000,16(05): 393-397
200. 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
201. 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
202. 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
203. 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
204. 刘红斌;任延;王宇新;王世昌;安英丽;左桢.动态凝胶网络中的溶质扩散[J]. 物理化学学报, 1999,15(03): 210-215
205. 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
206. 喻典;陈志达;王繁;李述周.元素电负性和硬度的密度泛函理论研究[J]. 物理化学学报, 2001,17(01): 15-22

207. 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
208. 李权;徐成刚;王红艳;朱正和.PuH₂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
209. 宋继国;宋化灿;杨绮琴;许遵乐.Cu(II)在对甲苯磺酸铜+DMSO中的电还原[J]. 物理化学学报, 2003,19(03): 283-285
210. 陈文凯;许娇;章永凡;周立新;李俊箴.2-羟基吡啶质子转移过程的理论研究[J]. 物理化学学报, 2002,18(09): 802-807
211. 徐建新;刘天晴;郭荣.SDS/*n*-C₅H₁₁OH/H₂O溶致液晶中SDS分子的扩散特性[J]. 物理化学学报, 2003,19(04): 364-367
212. 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
213. 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
214. 张敏;金振声;王守斌;张顺利;张治军.在Pd/TiO₂上CO的光催化增强效应[J]. 物理化学学报, 2003,19(02): 100-104
215. 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
216. 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
217. 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
218. 刘小平;陆君涛;查全性.带-带和带-平面电极的扩散极限电流[J]. 物理化学学报, 1993,9(04): 528-532
219. 黄荣彬;张鹏;朱永宝;刘朝阳;黄丰;陈明旦;林逢辰;郑兰荪.铝氧原子簇负离子的激光产生与结构[J]. 物理化学学报, 1993,9(03): 293-294
220. 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
221. 叶建辉.铁离子(II/III)/Nafion膜体系的阻抗分析[J]. 物理化学学报, 1992,8(03): 364-369
222. 谢扬;蒋雄.SbO⁺离子的阴极还原[J]. 物理化学学报, 1991,7(03): 354-357
223. 王刚;陶祖貽.弱碱性阴离子交换树脂的再生动力学[J]. 物理化学学报, 1991,7(04): 485-489
224. 宋默;梁好均;陈宜宜;姜炳政.聚甲基丙烯酸甲酯与苯乙烯-丙烯腈共聚物混合体系相分离初期的固体NMR研究[J]. 物理化学学报, 1991,7(05): 513-517
225. 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
226. 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
227. 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
228. 黄可龙;杨赛;刘素琴;王海波.磷酸铁锂在饱和硝酸锂溶液中的电极过程动力学[J]. 物理化学学报, 2007,23(01): 129-133
229. 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
230. 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
231. 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
232. 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
233. 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
234. 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
235. 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
236. 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
237. 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):

238. 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
239. 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
240. 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
241. 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
242. 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
243. 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
244. 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
245. 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
246. 赵新新, 陶向明, 宓一鸣, 陈戎, 谭明秋. Ni(110)-*p*2mg(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
247. 鞠秀芳, 靳玲玲, 马涛, 陈晓陆, 宋丽娟. 1,5-己二烯和苯对NiY分子筛脱硫性能的影响[J]. 物理化学学报, 2009,25(11): 2256-2260
248. 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
249. 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
250. 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
251. 陈锦灿, 陈兰美, 廖思燕, 郑康成. 抗癌性钌配合物[HL][*trans*-Ru^{III}Cl₄L₂](L=2-NH₂-5-Me-STz)的水解机理[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
252. 左志军, 黄伟, 韩培德, 李志红. CO和H₂在Cu(111)面的吸附和溶剂化效应[J]. 物理化学学报, 0,(): 0-0
253. 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, 0,(): 0-0
254. 李芬, 徐献芝, 宋辉, 熊晋, 吴飞. 粘结剂聚四氟乙烯乳液经过乙醇预处理后对气体扩散电极性能的影响[J]. 物理化学学报, 2009,25(11): 2205-2210
255. 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