

一种确定反应中间态几何特征和能量的综合性方法

郑铮, 刘振明, 张亮仁

北京大学药学院药物化学系, 天然药物及仿生药物国家重点实验室, 北京 100191

摘要:

通过综合使用传统的过渡态优化算法、数学统计工具以及人工神经网络算法(ANN)找到一种不依赖于反应物起始构象而得到化学反应中过渡态结构和能量的方法. 在两个反应物互相接近的过程中, 每一步的几何构象都对应着一个系统能量值. 本研究的目的是尽可能地收集处在反应能量面上的这种能量点值. 通过采用几何参数作为自变量对势能面进行模拟研究, 得到了势能面上对应过渡态结构的一阶鞍点. 采用乙酰负离子和甲醛作为反应物, 对经典的醛醇缩合反应中的亲核进攻步骤进行了研究. 对内禀反应坐标(IRC)路径的计算是从反应物的三组不同起始构象出发, 最终获得了反应势能面上的96个点. 本研究中的势能面采用人工神经网络算法进行模拟研究, 并利用交叉验证方法评估得到的结果, 避免了采用人工神经网络算法时过度拟合情况的发生.

关键词: 反应过渡态 反应物几何构象 人工神经网络 反应势能面 一阶鞍点 交叉验证

收稿日期 2009-02-16 修回日期 2009-04-14 网络版发布日期 2009-05-20

通讯作者: 刘振明 Email: zmliu@bjmu.edu.cn

本刊中的类似文章

1. 王学业; 康德山; 李重河; 钦佩; 陈念贻. 金属卤化物熔盐系相图的规律及计算机预报[J]. 物理化学学报, 1996, 12(01): 67-70
2. 刘万强; 王学业; 李新芳; 龙清平; 文小红; 李建军. 聚丙烯酸酯类 T_g 的量子化学-神经网络研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(06): 596-601
3. 蔡煜东; 许伟杰; 陈念贻. 自组织神经树用于判别氟化物非晶态形成条件[J]. 物理化学学报, 1995, 11(07): 642-645
4. 周家驹; 谢桂荣; 谢前; 孙红梅; 冯军; 许志宏. 用于结构信息数值化的电负性拓扑指数方法[J]. 物理化学学报, 1995, 11(09): 777-780
5. 姚树文; 王学业; 郭进; 陈念贻. 简单无机盐熔点规律[J]. 物理化学学报, 1996, 12(12): 1103-1105
6. 姚树文; 郭进; 王学业; 陈念贻. ANN原子参数法预报合金相晶型及晶格常数[J]. 物理化学学报, 1996, 12(09): 809-811

扩展功能

本文信息

Supporting info

[PDF\(230KB\)](#)

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

▶ 反应过渡态

▶ 反应物几何构象

▶ 人工神经网络

▶ 反应势能面

▶ 一阶鞍点

▶ 交叉验证

本文作者相关文章

▶ 郑铮

▶ 刘振明

▶ 张亮仁