

## 精密从头算与ABEEM/MM模型对水团簇(H<sub>2</sub>O)<sub>11</sub> 9种低能结构的计算

杨忠志 刘永军

辽宁师范大学化学化工学院, 辽宁 大连 116029; 辽宁师范大学物理与电子技术学院, 辽宁 大连 116029

摘要:

用精密从头算方法研究了(H<sub>2</sub>O)<sub>11</sub>的9种低能异构体的性质, 包括优化的几何结构、结合能、偶极矩和氢键个数等, 并且得出了515-a是(H<sub>2</sub>O)<sub>11</sub>的全局最低能结构. 同时, 也用ABEEM/MM(atom bond electronegativity equalization method/molecular mechanics) 模型研究了这些性质, 与从头算的结果进行了比较, 得到了相符合的结果. 这显示了ABEEM/MM模型在描述中等大小的水分子团簇结构上是成功的.

关键词: 从头算方法 ABEEM/MM 最低能结构 结合能 水分子团簇

收稿日期 2008-12-03 修回日期 2009-02-12 网络版发布日期 2009-03-18

通讯作者: 杨忠志 Email: zzyang@lnnu.edu.cn

### 本刊中的类似文章

1. 郭建新; 王彦妮; 张启元. 氰基苯阴离子与CO<sub>2</sub>间的内球电子转移[J]. 物理化学学报, 1998, 14(03): 193-197
2. 张绍文; 傅孝愿. HNCO热解为CO<sub>2</sub>和HNHCNH的反应机理理论研究[J]. 物理化学学报, 1994, 10(11): 1004-1008
3. 李来才; 钱一鸣; 朱元强; 田安民. CH<sub>3</sub> + HNCO反应机理的理论研究[J]. 物理化学学报, 2004, 20(03): 228-232
4. 陈波珍; 黄明宝; 苏红梅; 孔繁敖. CH<sub>2</sub> + O<sub>2</sub>反应的反应机理[J]. 物理化学学报, 2000, 16(10): 869-872
5. 邝平先; 陈波珍; 黄明宝. C(<sup>3</sup>P)与H<sub>2</sub>S反应的反应机理[J]. 物理化学学报, 2000, 16(05): 389-392

扩展功能

本文信息

PDF(634KB)

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

▶ 从头算方法

▶ ABEEM/MM

▶ 最低能结构

▶ 结合能

▶ 水分子团簇

本文作者相关文章

▶ 杨忠志

▶ 刘永军