

## 杂合型全局优化法优化水分子团簇结构

曹益林; 汪山献松

河南师范大学化学与环境科学学院, 新乡 453002

### 摘要:

基于遗传算法、快速模拟退火及其梯度方法提出了一种快速的杂合型全局优化方法(fast hybrid global optimization algorithm, FHGOA),并将这一方法应用于TIP3P和TIPS2模型水分子团簇(H<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>结构的优化.在进行TIP3P模型水分子团簇结构的优化过程中,发现了能量比文献值更低的团簇结构,且执行效率有较大提高.把该方法应用到优化TIPS2模型的水分子团簇,发现最优结构和采用TTM2-F模型优化的水分子团簇结构在n < 17时完全相同,为全表面结构;而在n=17、19、22时为单中心水分子笼状结构;在n=25、27时为双中心水分子笼状结构.说明随着团簇中水分子个数的增加,采用TIPS2和TTM2-F势能函数优化的团簇最优结构有相同的变化趋势.

关键词: 杂合型全局优化方法 水分子簇 结构优化

收稿日期 2003-10-14 修回日期 2004-02-26 网络版发布日期 2004-08-15

通讯作者: 曹益林 Email: wys.0403@eyou.com

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(1505KB)

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

▶ 杂合型全局优化方法

▶ 水分子簇

▶ 结构优化

本文作者相关文章

▶ 曹益林

▶ 汪山献松