

## 研究论文

### 应用ABEEM/MM模型研究水分子团簇(H<sub>2</sub>O)<sub>n</sub> (n=11~16)的性质

钱萍; 杨忠志

辽宁师范大学化学化工学院, 辽宁大连 116029

#### 摘要:

应用ABEEM/MM模型计算了较大的水分子团簇(H<sub>2</sub>O)<sub>n</sub> (n=11~16)的各种性质,如:优化的几何构型,氢键个数,结合能,稳定性,ABEEM电荷分布,偶极矩,以及结构参数、平均氢键个数和强度,增加的团簇结合能等.结果表明,从立方体结构到笼状结构的过渡出现在n=12的水分子团簇中,随着类似于笼状结构特点的不断增强,五元环的富集程度有所增加.

关键词: ABEEM/MM模型 原子键电负性均衡方法 分子力场 水分子团簇

收稿日期 2005-10-28 修回日期 2005-12-09 网络版发布日期 2006-04-28

通讯作者: 杨忠志 Email: zzyang@lnnu.edu.cn

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

PDF(597KB)

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

▶ ABEEM/MM模型

▶ 原子键电负性均衡方法

▶ 分子力场

▶ 水分子团簇

本文作者相关文章

▶ 钱萍

▶ 杨忠志