

模拟退火研究CO₂在Ar团簇中的结构和能量性质

Simulated Annealing Study on Structures and Energetics of CO₂ in Argon Clusters

摘要点击 253 全文点击 90 投稿时间: 2011-10-1 采用时间: 2011-10-8

[查看全文](#) [查看/发表评论](#) [下载PDF阅读器](#)

doi: 10.1088/1674-0068/24/05/620-624

中文关键词 [分子结构](#) [范德华团簇](#) [模拟退火算法](#)

英文关键词 [Molecular structure](#) [van der Waals cluster](#) [Simulated annealing algorithm](#)

基金项目

作者	单位	E-mail
王乐成	南京大学化学化工学院理论与计算化学研究所, 教育部介观化学重点实验室, 南京210093	
谢代前*	南京大学化学化工学院理论与计算化学研究所, 教育部介观化学重点实验室, 南京210093	dqxie@nju.edu.cn

中文摘要

采用模拟退火算法研究了范德华团簇Ar_N-CO₂(N=1~19)的结构和能量性质. 利用一个最近得到的Ar-CO₂的势能面及Aziz的Ar-Ar作用势能, 采用两体加和近似来构建团簇的高维势能面, 再根据一个精心设计的退火进度表来采样玻璃态相空间以得到最低能量构型. 与其他较轻的稀有气体形成的Rg_N-CO₂团簇不同, Ar-CO₂团簇表现出特有的结构和能量性质, 比如小尺度团簇的相关性质

英文摘要

The minimum-energy configurations and energetic properties of the Ar_N-CO₂ (N=1-19) van der Waals clusters were investigated by a simulated annealing algorithm. A newly de-veloped Ar-CO₂ potential energy surface together with the Aziz Ar-Ar interaction potential was employed to construct the high dimensional potential functions by pairwise additive ap-proximation. The global minimal conformations were optimized by sampling the glassy phase space with a circumspetively formulated annealing schedule. Unlike the lighter Rg_N-CO₂ clusters, the size-dependent structural and energetic characteristics of Ar_N-CO₂ exhibit a different behavior. The dramatically variations with number of solvent were found for small clusters. After the completion of the first solvation shell at N=17, the clusters were evolved more smoothly.

Copyright@2007 IOPP

承办: 中国科学技术大学 协办: 中国科学院大连化学物理研究所
主管: 中国科学技术协会 主办: 中国物理学会 国际代理发行: 英国物理学会

编辑部地址: 安徽省合肥市金寨路96号 中国科学技术大学东区外语楼二楼
联系电话: 0551-3601122 Email: cjcp@ustc.edu.cn

本系统由北京勤云科技发展有限公司设计