

中介尺度Au纳米团簇熔化的分子动力学模拟

张妍宁; 王丽; 边秀房

山东大学材料液态结构及其遗传性教育部重点实验室, 济南 250061

摘要:

采用分子动力学模拟技术, 研究了原子个数为16~8628的 Au纳米团簇的熔化过程. 采用 Johnson的EAM (embedded atom method) 模型, 模拟结果表明, 金属纳米团簇存在一中介尺度区域. 对Au纳米团簇而言, 当原子个数 $N > 456$ 时, 团簇的热力学性质与团簇尺寸呈线性关系, 熔化首先从表面开始, 逐步向中心区域推进, 且满足 $T_{mb} - T_{mc}(N) = aN(-1/3)$ 的关系. 另外, 计算了中介区域的团簇的尺寸、熔化温度、表面能、熵、焓等热力学量以及均方根位移 (RMSD) 等动力学量, 为研究纳米团簇提供定量数据.

关键词: 分子动力学模拟 Au纳米团簇 熔化过程

收稿日期 2002-05-16 修回日期 2002-07-05 网络版发布日期 2003-01-15

通讯作者: 张妍宁 Email: zhangyanning_421@hotmail.com

本刊中的类似文章

1. 程兆年; 丁弘; 雷雨; 许立. RbCl熔解的分子动力学模拟研究[J]. 物理化学学报, 1995, 11(10): 890-895
2. 周国荣; 吴佑实; 张川江; 赵芳. 二十面体准晶对非晶形成影响的模拟[J]. 物理化学学报, 2003, 19(01): 13-16
3. 黄世萍; 刘洪霖; 马彦会; 唐波; 陈念贻. $ZnCl_2$ 熔盐的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 1995, 11(01): 71-73
4. 黄世萍; 马彦会; 唐波; 徐桦; 陈念贻. NaCl-NaBr系熔盐溶液的分子动力学研究[J]. 物理化学学报, 1994, 10(11): 1045-1048
5. 程兆年; 郝正明; 许立; 陈念贻. 熔融 $NaCaF_3$ 、 Na_2CaF_4 和 Na_3CaF_5 的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 1994, 10(08): 676-679
6. 吴晓萍; 刘志平; 汪文川. 分子模拟研究气体在室温离子液体中的溶解度[J]. 物理化学学报, 2005, 21(10): 1138-1142
7. 刘春莉; 李春华; 陈慰祖; 王存新. 用分子模拟方法研究HIV-1整合酶与咖啡酰基类抑制剂的相互作用[J]. 物理化学学报, 2005, 21(11): 1229-1234
8. 张爱龙; 刘让苏; 梁佳; 郑采星. 冷却速率对液态Ni凝固过程中微观结构演变影响的模拟研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(04): 347-353
9. 张弢; 谷廷坤; 齐元华. 熔体快速冷凝过程的微观结构演化[J]. 物理化学学报, 2005, 21(02): 173-176
10. 秦绪波; 张妍宁; 鲁剑林. 原子尺寸差异与非晶形成能力[J]. 物理化学学报, 2003, 19(12): 1163-1166
11. 殷开梁; 徐端钧; 夏庆; 叶雅静; 郭国英; 陈正隆. 正十六烷体系凝固过程的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2004, 20(03): 302-305
12. 刘新; 孟长功; 刘长厚. 金属银在高温速率下的熔化和过热行为[J]. 物理化学学报, 2004, 20(03): 280-284
13. 邵俊; 徐桦; 陆文聪; 陈念贻. 高压 Na_2O-SiO_2 系输运性质反常的分子模拟[J]. 物理化学学报, 2004, 20(03): 237-239
14. 张弢; 张晓茹; 吴爱玲; 管立; 徐昌业. 金属铜升温熔化过程的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2003, 19(08): 709-713
15. 张荣; 谭载友; 郑敦胜; 罗三来; 李浩然. 特殊缔合体系TFE水溶液分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2008, 24(03): 428-432
16. 崔宝秋; 宫利东; 赵东霞. 微过氧化物酶水溶液的ABEEM/MM动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2008, 24(06): 1035-1040
17. 张军; 赵卫民; 郭文跃; 王勇; 李中谱. 苯并咪唑类缓蚀剂缓蚀性能的理论评价[J]. 物理化学学报, 2008, 24(07): 1239-1244
18. 沈秋婵; 梁婉春; 胡兴邦; 李浩然. 甲酰胺水溶液的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2008, 24(07): 1169-1174
19. 沈新媛 吕洋 李慎敏. 人体端粒中(3+1)混合结构G-四链体稳定性的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2009, 25(04): 783-791
20. 崔巍 张怀 计明娟. 新型二氟甲基磷酸类酪氨酸蛋白磷酸酯酶1B抑制剂的分子动力学模拟和结合自由能计算[J]. 物理化学学报, 2009, 25(04): 668-676
21. 赵勇山 郑清川 张红星 楚慧郢 孙家钟. 人类丝氨酸消旋酶的同源模建及其与多肽类抑制剂的分子对接[J]. 物理化学学报, 2009, 25(03): 417-422

扩展功能

本文信息

PDF(1495KB)

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

▶ 分子动力学模拟

▶ Au纳米团簇

▶ 熔化过程

本文作者相关文章

▶ 张妍宁

▶ 王丽

▶ 边秀房

22. 潘国祥;倪哲明;王芳;王建国;李小年.二氟尼柳/水滑石插层组装结构、氢键及水合特性的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2009,25(02): 223-228
23. 陈聪 李维仲.甘油水溶液氢键特性的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2009,25(03): 507-512
24. 刘让苏;周群益;李基永.液态金属结构变化的分子动力学模拟研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(08): 755-757
25. 顾健德;田安民;鄢国森.N₂、O₂水溶液光谱的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 1995,11(08): 719-723
26. 周震;言天英;高学平.储能材料的模拟与设计[J]. 物理化学学报, 2006,22(09): 1168-1174
27. 吴晓萍;刘志平.室温离子液体[bmim][BF₄]和水混合物的计算机模拟研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(09): 1036-1041
28. 方美娟;骆书娜;王河清;刘万云;赵玉芬.磷酸化对丙氨酸与溶菌酶相互作用的影响[J]. 物理化学学报, 2005,21(09): 1042-1045
29. 刘迎春;王琦;吕玲红;章连众.疏水性微孔中水的结构和扩散性质的分子模拟[J]. 物理化学学报, 2005,21(01): 63-68
30. 孙浩 蒋勇军 俞庆森 邹建卫.分子动力学模拟方法研究结构水在糖原合成酶激酶-3 β 中的作用[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 635-639
31. 宋其圣, 郭新利, 苑世领, 刘成卜.十二烷基苯磺酸钠在SiO₂表面聚集的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2009,25(06): 1053-1058
32. 付一政, 刘亚青, 兰艳花.端羟基聚丁二烯/增塑剂共混物相容性的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2009,25(07): 1267-1272
33. 赵健伟, 刘洪梅, 倪文彬, 郭彦, 尹星.从分子水平研究电子传递[J]. 物理化学学报, 2009,25(07): 1472-1480
34. 李振泉;郭新利;王红艳;李青华;苑世领;徐桂英;刘成卜.阴离子表面活性剂在油水界面聚集的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 6-12
35. 蔡开聪 王建平.乙醇醛的分子动态结构[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 677-683
36. 陈莹;王秀英;赵俊卿.小尺寸金属团簇熔化过程的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 2042-2046
37. 胡建平;柯国涛;常珊;陈慰祖;王存新.HIV-1病毒DNA与整合酶结合后的构象变化[J]. 物理化学学报, 2008,24(10): 1803-1810
38. 付一政;刘亚青;梅林玉;兰艳花.HTPB与Al不同晶面结合能和力学性能的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 187-190
39. 李姝;刘磊;曹臻;汪继强;言天英.室温熔盐二(三氟甲基磺酸酐)亚胺锂-尿素体系的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2007,23(07): 983-986
40. 彭传校;王丽;张妍宁.应变率诱发镍纳米丝的非晶化[J]. 物理化学学报, 2007,23(04): 517-520
41. 丛红日;边秀房;李辉;王丽.液态Al₈₀Fe₂₀合金的中程有序结构[J]. 物理化学学报, 2002,18(01): 39-44
42. 徐桦;邵俊.氟代硼酸锂玻璃的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2002,18(01): 10-13
43. 王丽;衣粟;边秀房.Ni₃Al合金液态与非晶中的原子团簇 [J]. 物理化学学报, 2002,18(04): 297-301
44. 朱小蕾;周志华;卢文庆;黄锦凡;彭盘英.由CBr₄分子动力学研究观察到的可能的新的新相[J]. 物理化学学报, 1997,13(09): 815-821
45. 王丽;边秀房;李辉.金属Cu液固转变及晶体生长的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2000,16(09): 825-829
46. 侯怀宇;陈国良;陈光.金属Ni熔化前后结构变化的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2006,22(07): 771-776
47. 徐桦;邵俊.正磷酸铝高压下相变的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2000,16(06): 512-516
48. 计明娟;叶学其;杨鹏程.甲硫氨酸-脑啡肽的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 1999,15(11): 1011-1016
49. 李辉;边秀房;李玉忱;刘洪波;陈魁英.贵金属Au的液态结构分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 1998,14(07): 630-634
50. 刘新;孟长功;刘长厚.升温速率对金属铅的熔化和过热行为的影响[J]. 物理化学学报, 2003,19(08): 681-685
51. 雷雨;程兆年;唐鼎元.分子动力学模拟研究 β -BAB₂O₄熔体的结构[J]. 物理化学学报, 1996,12(06): 481-484
52. 程兆年;郑正明;张静;陈念贻.熔融CaF₂的径向分布函数[J]. 物理化学学报, 1993,9(04): 438-441
53. 程兆年;张静;郑正明;陈年贻.超离子导体CaF₂中的Ca²⁺亚晶格和F⁻亚晶格[J]. 物理化学学报, 1991,7(04): 390-393
54. 邵俊;汤正谔.LiCl急冷玻璃形成过程中局部结构的分子动力学模拟——基于周期性边界条件的Voronoi多面体计算[J]. 物理化学学报, 1991,7(05): 571-576