

研究论文

水合氢离子团簇从头算和ABEEM/MM的理论研究

杨忠志*, 孟祥凤, 赵东霞, 宫利东

大连: 辽宁师范大学化学系

收稿日期 2008-11-26 修回日期 2009-1-5 网络版发布日期 2009-10-14 接受日期 2009-10-14

摘要 本文应用高水平的从头计算方法 and ABEEM/MM 模型, 研究了水合氢离子团簇 $H_3O^+(H_2O)_n (n=1-6)$, 优化得到了低能构象, 探讨了其结合能和稳定性, 显示出 $H_3O^+(H_2O)_3$ 局域结构的优势存在, 并对 $H_3O^+(H_2O)_6$ VIa 团簇的 ABEEM 电荷分布进行分析. 结果表明, ABEEM/MM 方法计算的结果和从头算得到的结果存在很好的一致性.

关键词 [水合氢离子](#) [从头计算方法](#) [ABEEM/MM模型](#)

分类号

DOI:

通讯作者:

杨忠志 zzyang@lnnu.edu.cn

作者个人主页: 杨忠志*; 孟祥凤; 赵东霞; 宫利东

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF \(428KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\] \(0KB\)](#)
- ▶ [参考文献 \[PDF\]](#)
- ▶ [参考文献](#)

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](#)

相关信息

- ▶ [本刊中包含“水合氢离子”的相关文章](#)
- ▶ [本文作者相关文章](#)
- ▶ [杨忠志*, 孟祥凤, 赵东霞, 宫利东](#)