

分子动力学模拟纳米尺寸限制体系下氩溶液中I₂的振动能量弛豫

毛荣荣; 吕洋; 周立川; 李钦宁; 李慎敏

大连大学, 辽宁省生物有机重点实验室, 辽宁 大连 116622

摘要:

利用平衡态分子动力学方法(EMD)模拟了纳米尺寸限制球壳内I₂在Ar溶液中的振动能量转移. 计算并讨论了I₂振动能量弛豫时间T₁随球壳半径、溶剂密度的变化规律. 通过分子间相互作用分析, 在原子、分子水平上, 揭示了随着球壳半径的减小, T₁呈逐渐增大趋势的原因. 结果表明, 球壳的几何限制效应和表面作用对受限溶液密度分布的影响较大, 从而导致溶质振动弛豫的显著变化. 此外, 非限制体系模拟显示, 非平衡态分子动力学(NEMD)方法可以得到与平衡态分子动力学方法较一致的振动能量弛豫时间T₁.

关键词: 纳米限制溶液 平衡态分子动力学 振动能量弛豫时间 径向密度分布 非平衡态分子动力学

收稿日期 2008-02-26 修回日期 2008-04-30 网络版发布日期 2008-06-18

通讯作者: 李慎敏 Email: shenmin@dl.cn

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

PDF(366KB)

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

▶ 纳米限制溶液

▶ 平衡态分子动力学

▶ 振动能量弛豫时间

▶ 径向密度分布

▶ 非平衡态分子动力学

本文作者相关文章

▶ 毛荣荣

▶ 吕洋

▶ 周立川

▶ 李钦宁

▶ 李慎敏