

计算机模拟原子簇的稳定构型和能量性质

谭凯,林梦海,王南钦,张乾二

厦门大学化学系

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 接受日期

**摘要** 用密度泛函(DFT)方法研究了铜原子簇Cu~n(n=2,3,4,6)的稳定几何构型和电子结构。通过拟合从头算势能面构造铜原子簇势能函数的双体、三体及四体项,并利用该函数和全局优化“Basin-Hopping”算法得到较大铜原子簇(n=13~56)能量极小的结构,计算结果与实验及其它计算结果相一致。

**关键词** [计算机模拟](#) [铜](#) [原子簇](#) [密度泛函理论](#) [势能](#) [构型](#) [从头计算法](#) [电子结构](#) [国家自然科学基金](#)

分类号 [0641](#) [06-39](#)

## Copper cluster structural stability and energetic-calculations and simulations

TAN KAI,LIN MENGHAI,WANG NANQIN,ZHANG QIANER

**Abstract** Equilibrium geometries and electronic properties of Cu~n(n=2, 3, 4, 6) clusters are determined via DFT calculations. We construct potential function with parameters fitted to ab initio potential energy surfaces, and use a global minima“basin-hopping” algorithm to obtain minimum-energy structures of Cu clusters for n=13~56. The results are in good agreement with experiments and other calculations.

**Key words** [COMPUTERIZED SIMULATION](#) [COPPER](#) [POTENTIAL ENERGY](#) [CONFIGURATION](#) [AB INITIO CALCULATION](#) [ELECTRONIC STRUCTURE](#) [NSFC](#)

DOI:

通讯作者

扩展功能

本文信息

▶ [Supporting info](#)

▶ [PDF\(0KB\)](#)

▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)

▶ [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](#)

▶ [复制索引](#)

▶ [Email Alert](#)

▶ [文章反馈](#)

▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

▶ [本刊中 包含“计算机模拟”的  
相关文章](#)

▶ 本文作者相关文章

- [谭凯](#)
- [林梦海](#)
- [王南钦](#)
- [张乾二](#)