

(12) 按照专利合作条约所公布的国际申请

(19) 世界知识产权组织
国际局

(43) 国际公布日
2025 年 2 月 20 日 (20.02.2025)



(10) 国际公布号
WO 2025/035678 A1

(51) 国际专利分类号:
G16C 60/00 (2019.01) *G16C 10/00* (2019.01)

南山区深圳大学城学苑大道 1068 号,
Guangdong 518055 (CN)。

(21) 国际申请号: PCT/CN2023/141308

(22) 国际申请日: 2023 年 12 月 23 日 (23.12.2023)

(25) 申请语言: 中文

(26) 公布语言: 中文

(30) 优先权:
202311010683.4 2023年8月11日 (11.08.2023) CN

(71) 申请人: 中国科学院深圳先进技术研究院 (SHENZHEN INSTITUTES OF
ADVANCED TECHNOLOGY CHINESE ACADEMY
OF SCIENCES) [CN/CN]; 中国广东省深圳市

(72) 发明人: 刘锋 (LIU, Feng); 中国广东省深圳市南山区深圳大学城学苑大道 1068 号, Guangdong 518055 (CN)。薛冬峰 (XUE, Dongfeng); 中国广东省深圳市南山区深圳大学城学苑大道 1068 号, Guangdong 518055 (CN)。陈昆峰 (CHEN, Kunfeng); 中国广东省深圳市南山区深圳大学城学苑大道 1068 号, Guangdong 518055 (CN)。

(74) 代理人: 北京中巡通大知识产权代理有限公司 (BEIJING ZHONG XUN TONG DA INTELLECTUAL PROPERTY AGENCY CO., LTD.); 中国北京市西城区西直门外大街 1 号院 2 号楼 7 层 7C1, Beijing 100044 (CN)。

(54) Title: CHARACTERIZATION AND ANALYSIS METHOD FOR DYNAMIC PROPERTIES OF CLUSTER, SYSTEM, ELECTRONIC DEVICE, AND STORAGE MEDIUM

(54) 发明名称: 一种团簇动力学性质的表征分析方法、系统、电子设备及存储介质

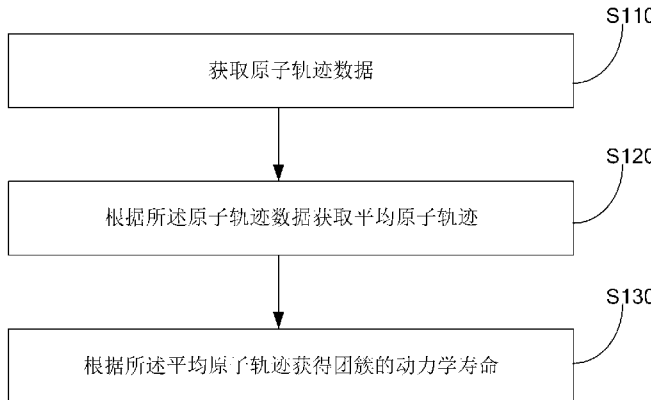


图 1

S110 Acquire atomic trajectory data

S120 Acquire an average atomic trajectory on the basis of the atomic trajectory data

S130 Obtain the dynamic lifetime of a cluster on the basis of the average atomic trajectory

(57) Abstract: A characterization and analysis method for the dynamic properties of a cluster, a system, an electronic device, and a computer readable storage medium. The method comprises: acquiring atomic trajectory data; acquiring an average atomic trajectory on the basis of the atomic trajectory data; and obtaining the dynamic lifetime of a cluster on the basis of the average atomic trajectory. By means of an atomic trajectory averaging method, transient detachment and bonding of atoms can be considered at the same time, so that the calculation of the dynamic lifetime of clusters is more accurate.

(57) 摘要: 一种团簇动力学性质的表征分析方法、系统、电子设备及计算机可读存储介质, 该方法包括: 获取原子轨迹数据; 根据原子轨迹数据获取平均原子轨迹; 根据平均原子轨迹获得团簇的动力学寿命。通过原子轨迹平均的方法可以同时考虑原子的短暂脱离和结合, 使得团簇动力学寿命的计算更加准确。

(81) 指定国(除另有指明, 要求每一种可提供的国家保护): AE, AG, AL, AM, AO, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BH, BN, BR, BW, BY, BZ, CA, CH, CL, CN, CO, CR, CU, CV, CZ, DE, DJ, DK, DM, DO, DZ, EC, EE, EG, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, GT, HN, HR, HU, ID, IL, IN, IQ, IR, IS, IT, JM, JO, JP, KE, KG, KH, KN, KP, KR, KW, KZ, LA, LC, LK, LR, LS, LU, LY, MA, MD, MG, MK, MN, MU, MW, MX, MY, MZ, NA, NG, NI, NO, NZ, OM, PA, PE, PG, PH, PL, PT, QA, RO, RS, RU, RW, SA, SC, SD, SE, SG, SK, SL, ST, SV, SY, TH, TJ, TM, TN, TR, TT, TZ, UA, UG, US, UZ, VC, VN, WS, ZA, ZM, ZW。

(84) 指定国(除另有指明, 要求每一种可提供的地区保护): ARIPO (BW, CV, GH, GM, KE, LR, LS, MW, MZ, NA, RW, SC, SD, SL, ST, SZ, TZ, UG, ZM, ZW), 欧亚 (AM, AZ, BY, KG, KZ, RU, TJ, TM), 欧洲 (AL, AT, BE, BG, CH, CY, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, FR, GB, GR, HR, HU, IE, IS, IT, LT, LU, LV, MC, ME, MK, MT, NL, NO, PL, PT, RO, RS, SE, SI, SK, SM, TR), OAPI (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GQ, GW, KM, ML, MR, NE, SN, TD, TG)。

本国际公布:

— 包括国际检索报告(条约第21条(3))。

一种团簇动力学性质的表征分析方法、系统、电子设备及存储介质

技术领域

本申请涉及材料计算技术领域，特别涉及一种团簇动力学性质的表征分析方法、分析系统、电子设备及计算机可读存储介质。

背景技术

团簇是一种有几个到上千个原子组成的物质，在过去近 40 年的时间成为了一种纳米材料。由于强的量子限域效应，通过控制单个原子就能改变整个团簇的性质。相比块体材料而言，团簇的可调控空间十分巨大，在物理、化学、材料科学、生物学和医学等方面有着广泛的应用。因此，表征和分析团簇的各项性质和性能就成为了各个领域的焦点。团簇的动力学性质是团簇性质的重要一方面。

在团簇动力学性质表征方面目前常见方法如下：

在该方法中首先定义了一个函数 $P(t, t_n; t^*)$ ，该函数只有两个取值0和1。当团簇中的原子在 t_n 和 $t_n + t$ 时刻都没有离开团簇，且在这两个时刻之间所有原子都没有离开该团簇， $P = 1$ 。除此以外的情况， $P = 0$ 。该方法中考虑到热运动的存在，原子可能在某个瞬间会脱离该团簇，设置了容忍时间 t^* ，容忍时间表示在 t_n 和 $t_n + t$ 时刻之间可以允许原子在不超过容忍时间宽度时间内离开团簇，此时 $P = 1$ 仍旧成立。基于 P 的定义，建立一个新的函数 $n(t)$ ，如(1)式所示

$$n(t) = \frac{1}{N_t} \sum_{n=1}^{N_t} \sum_j P_j(t, t_n; t^*) \quad \#$$

$n(t)$ 是以指数形式衰减，可以表示为 $n(t) = n_0 \exp(-t/\tau)$ 。通过拟合 $n(t)$ 与 t 之间的函数关系式，可以获得团簇的动力学寿命 τ 。

以上的方法考虑了原子由于热运动短时间内脱离团簇这一物理现象，能较好的计算团簇的动力学寿命。但该方法存在一个明显的问题，在复杂环境下，团簇周边的原子由于热运动，也可短时间内结合到团簇中，增加团簇的原子数，改变原来团簇。短时间结合后原子可能会离开团簇，形成新的团簇（该团簇与原团簇原子数相同）。

发明内容

鉴于此，有必要针对现有存在的无法定量表征的技术缺陷提供一种实现团簇动力学性质的准确表征和分析的团簇动力学性质的表征分析方法、分析系统、电子设备及计算机可读存储介质。

为解决上述问题，本申请采用下述技术方案：

本申请目的之一，提供了一种团簇动力学性质的表征分析方法，包括下述步骤：

获取原子轨迹数据；

根据所述原子轨迹数据获取平均原子轨迹；

根据所述平均原子轨迹获得团簇的动力学寿命。

在其中一些实施例中，在获取原子轨迹数据的步骤中，具体包括下述步骤：利用分子动力学模拟方法获取原子轨迹数据。

在其中一些实施例中，在根据所述原子轨迹数据获取平均原子轨迹的步骤中，具体包括下述步骤：

根据所述原子轨迹数据，设置不同的平均宽度 Δt ，平均每个原子的三个坐标，平均第 j 个原子坐标的具体方法如下：

$$r_j(t_i) = \frac{1}{T_n} \sum_{t=t_i-\Delta t}^{t=t_i+\Delta t} r_j(t) \#$$

其中， t_i 表示第 i 个时刻， T_n 表示总的时间个数， $r_j(t)$ 表示 t 时刻第 j 个原子的坐标。

在其中一些实施例中，所述平均宽度 Δt 通过下述步骤实现：

计算原子间径向分布函数，所述原子间径向分布函数中的第一极小值为原子间的截断半径；

根据所述原子间的截断半径，以某一个原子为起始，搜索周边近邻原子，基于这些近邻原子搜索这些近邻原子的近邻原子，以此迭代直至搜索不到近邻原子，搜到的这些原子即为一个团簇；

跟踪所述团簇所示间的演变，从所述团簇出现开始计时，到团簇大小发生了改变结束，记为出现一次；

以此方法，计算不同大小团簇出现的频数，获得不同大小团簇出现的频数随平均宽度的变化曲线，所述变化曲线拐点位置对应着的平均宽度 Δt 。

在其中一些实施例中，在根据所述平均原子轨迹获得团簇的动力学寿命的

步骤中，具体包括下述步骤：

定义一个函数 $P(t, t_n)$ ，该函数只有两个取值0和1，其中 t_n 表示第 n 个时刻， t 表示时间间隔；

当所述团簇中的原子在 t_n 和 $t_n + t$ 时刻都没有离开团簇，且在这两个时刻之间所有原子都没有离开该团簇， $P = 1$ ；除此以外的情况， $P = 0$ ；

基于 P 的定义，建立一个新的函数 $n(t)$ ，如下式所示

$$n(t) = \frac{1}{N_t} \sum_{n=1}^{N_t} \sum_j P_j(t, t_n) \#;$$

其中 P_j 表示大小为 j 的团簇对应的 P 值， N_t 表示总的时间步长。

根据 $n(t) = n_0 \exp(-t/\tau)$ 的形式，通过拟合 $n(t)$ 与 t 之间的函数关系式，可以获得团簇的动力学寿命 τ 。

本申请目的之二，提供了一种所述的团簇动力学性质的表征分析方法的分析系统，包括：

原子轨迹构建单元，用于获取原子轨迹数据；

平均轨迹构建单元，用于根据所述原子轨迹数据获取平均原子轨迹；

动力学寿命单元，用于根据所述平均原子轨迹获得团簇的动力学寿命。

本申请目的之三，提供了一种电子设备，包括处理器、存储器和通信接口，所述存储器存储有一个或多个程序，并且所述一个或多个程序由所述处理器执行，所述一个或多个程序包括用于执行如任一项所述的方法中的步骤的指令。

本申请目的之四，提供一种计算机可读存储介质，所述计算机可读存储介质存储用于电子数据交换的计算机程序，其中，所述计算机程序使得计算机执行所述的方法的步骤。

本申请采用上述技术方案，其有益效果如下：

本申请提供的团簇动力学性质的表征分析方法、系统、电子设备及计算机可读存储介质，通过获取原子轨迹数据；根据所述原子轨迹数据获取平均原子轨迹；根据所述平均原子轨迹获得团簇的动力学寿命，相较于之前的定性表征方法，本申请解决了以前方法只考虑由于热运动引起的原子短暂脱离，而未考虑原子短暂结合的影响，使得计算结果不准确，本申请通过原子轨迹平均的方法可以同时考虑原子的短暂脱离和结合，使得团簇动力学寿命的计算更加准确，可以广泛应用于各类团簇的寿命计算，具有通用性，可适用于单质金属、多元

金属、金属氧化物、非金属单质、非金属化合物等团簇材料的表征分析。

附图说明

为了更清楚地说明本申请实施例的技术方案，下面将对本申请实施例或现有技术描述中所需要使用的附图作简单地介绍，显而易见地，下面所描述的附图仅仅是本申请的一些实施例，对于本领域普通技术人员来讲，在不付出创造性劳动的前提下，还可以根据这些附图获得其他的附图。

图1为本发明实施例1提供的团簇动力学性质的表征分析方法的步骤流程图。

图2为本发明实施例1提供的氧化铝熔体中， AlO_n 团簇 $n=4、5$ 的团簇出现的频次随平均宽度 (T_n) 的变化。

图3为本发明实施例1提供的氧化铝熔体中， AlO_n 团簇 $n=4、5$ 的团簇寿命拟合结果。

图4为本发明实施例2提供的团簇动力学性质的表征分析系统的结构示意图。

图5为本发明实施例3提供的电子设备的结构示意图。

具体实施方式

下面详细描述本申请的实施例，所述实施例的示例在附图中示出，其中自始至终相同或类似的标号表示相同或类似的元件或具有相同或类似功能的元件。下面通过参考附图描述的实施例是示例性的，旨在用于解释本申请，而不能理解为对本申请的限制。

在本申请的描述中，需要理解的是，术语“上”、“下”、“水平”、“内”、“外”等指示的方位或位置关系为基于附图所示的方位或位置关系，仅是为了便于描述本申请和简化描述，而不是指示或暗示所指的装置或元件必须具有特定的方位、以特定的方位构造和操作，因此不能理解为对本申请的限制。

此外，术语“第一”、“第二”仅用于描述目的，而不能理解为指示或暗示相对重要性或者隐含指明所指示的技术特征的数量。由此，限定有“第一”、“第二”的特征可以明示或者隐含地包括一个或者更多个该特征。在本申请的描述中，“多个”的含义是两个或两个以上，除非另有明确具体的限定。

为了使本申请的目的、技术方案及优点更加清楚明白，以下结合附图及实施例，对本申请进行进一步详细说明。

实施例 1

请参阅图 1，为本实施例提供的团簇动力学性质的表征分析方法的步骤流程图，包括下述步骤 S110 至步骤 S130，以下详细说明各个步骤的具体实现方式。

步骤 S110：获取原子轨迹数据。

在本实施例中，在获取原子轨迹数据的步骤中，具体包括下述步骤：利用分子动力学模拟方法获取原子轨迹数据。

可以理解，在计算团簇寿命前，利用分子动力学模拟方法，设置模拟条件，例如温度和压强等，模拟体系。

具体地，首先通过恒温恒压系综对体系进行模拟，获得体系的平均体积。然后，调整模拟盒子体积到与平均体积相同，利用恒温恒体积系综进行模拟。模拟时长需要满足体系最大弛豫时间的 10~100 倍。分子模拟输出原子坐标的时间间隔是体系最快弛豫时间的十分之一，以确保采样完全。

步骤 S120：根据所述原子轨迹数据获取平均原子轨迹。

在本实施例中，在根据所述原子轨迹数据获取平均原子轨迹的步骤中，具体包括下述步骤：

根据所述原子轨迹数据，设置不同的平均宽度 Δt ，平均每个原子的三个坐标，平均第 j 个原子坐标的具体方法如下：

$$r_j(t_i) = \frac{1}{T_n} \sum_{t=t_i-\Delta t}^{t=t_i+\Delta t} r_j(t) \#$$

其中， t_i 表示第 i 个时刻， T_n 表示总的时间个数， $r_j(t)$ 表示 t 时刻第 j 个原子的坐标。

可以理解，本实施例所示的平均方法获取平均原子轨迹，可以使得团簇动力学寿命的计算更加真实。

在本实施例中，所述平均宽度 Δt 通过下述步骤实现：

计算原子间径向分布函数，所述原子间径向分布函数中的第一极小值为原子间的截断半径；根据所述原子间的截断半径，以某一个原子为起始，搜索周边近邻原子，基于这些近邻原子搜索这些近邻原子的近邻原子，以此迭代直至搜索不到近邻原子，搜到的这些原子即为一个团簇；跟踪所述团簇所示间的演变，从所述团簇出现开始计时，到团簇大小发生了改变结束，记为出现一次；以此方法，计算不同大小团簇出现的频数，获得不同大小团簇出现的频数随平均宽度的变化曲线，所述变化曲线拐点位置对应着的平均宽度 Δt 。

请参阅图2，为本实施例获得不同大小团簇出现的频数随平均宽度的变化曲

线，曲线拐点位置对应着最佳平均宽度。

步骤 S130：根据所述平均原子轨迹获得团簇的动力学寿命。

在本实施例中，在根据所述平均原子轨迹获得团簇的动力学寿命的步骤中，具体包括下述步骤：

定义一个函数 $P(t, t_n)$ ，该函数只有两个取值0和1，其中 t_n 表示第 n 个时刻， t 表示时间间隔；

当所述团簇中的原子在 t_n 和 $t_n + t$ 时刻都没有离开团簇，且在这两个时刻之间所有原子都没有离开该团簇， $P = 1$ ；除此以外的情况， $P = 0$ ；

基于 P 的定义，建立一个新的函数 $n(t)$ ，如下式所示

$$n(t) = \frac{1}{N_t} \sum_{n=1}^{N_t} \sum_j P_j(t, t_n) \#;$$

其中 P_j 表示大小为 j 的团簇对应的 P 值， N_t 表示总的时间步长。

根据 $n(t) = n_0 \exp(-t/\tau)$ 的形式，通过拟合 $n(t)$ 与 t 之间的函数关系式，可以获得团簇的动力学寿命 τ 。

采用本申请上述方法，在氧化铝熔体中进行了测试，该方法是可行。根据该方法，首先计算了晶体中铝离子和氧离子之间的径向分布函数，获得铝离子和氧原子之间的截断半径；然后，将坐标进行平均后，计算各个团簇出现频数与平均步长的关系，如图2所示。根据图2平均宽度在该体系中为60 ps；最后，计算了 $n(t)$ ，并进行了拟合，结果如图3所示。

相较于之前的定性表征方法，本申请实施例1解决了以前方法只考虑由于热运动引起的原子短暂脱离，而未考虑原子短暂结合的影响，使得计算结果不准确，本申请通过原子轨迹平均的方法可以同时考虑原子的短暂脱离和结合，使得团簇动力学寿命的计算更加准确，可以广泛应用于各类团簇的寿命计算，具有通用性，可适用于单质金属、多元金属、金属氧化物、非金属单质、非金属化合物等团簇材料的表征分析。

实施例2

请参阅图4，为本实施例2提供的团簇动力学性质的表征分析系统的结构示意图，包括原子轨迹构建单元110、平均轨迹构建单元120及动力学寿命单元130。以下详细说明各个步骤的具体实现方式。

体系构建单元 110 用于获取原子轨迹数据。

在本实施例中，体系构建单元 110 利用分子动力学模拟方法获取原子轨迹数据。

可以理解，在计算团簇寿命前，利用分子动力学模拟方法，设置模拟条件，例如温度和压强等，模拟体系。

具体地，首先通过恒温恒压系综对体系进行模拟，获得体系的平均体积。然后，调整模拟盒子体积到与平均体积相同，利用恒温恒体积系综进行模拟。模拟时长需要满足体系最大弛豫时间的 10~100 倍。分子模拟输出原子坐标的时间间隔是体系最快弛豫时间的十分之一，以确保采样完全。

界面疏密度分布单元 120 用于根据所述原子轨迹数据获取平均原子轨迹。

在本实施例中，界面疏密度分布单元 120 根据所述原子轨迹数据获取平均原子轨迹的步骤中，具体包括：

根据所述原子轨迹数据，设置不同的平均宽度 Δt ，平均每个原子的三个坐标，平均第 j 个原子坐标的具体方法如下：

$$r_j(t_i) = \frac{1}{T_n} \sum_{t=t_i-\Delta t}^{t=t_i+\Delta t} r_j(t) \#$$

其中， t_i 表示第 i 个时刻， T_n 表示总的时间个数， $r_j(t)$ 表示 t 时刻第 j 个原子的坐标。

可以理解，本实施例所示的平均方法获取平均原子轨迹，可以使得团簇动力学寿命的计算更加真实。

在本实施例中，所述平均宽度 Δt 通过下述步骤实现：

计算原子间径向分布函数，所述原子间径向分布函数中的第一极小值为原子间的截断半径；根据所述原子间的截断半径，以某一个原子为起始，搜索周边近邻原子，基于这些近邻原子搜索这些近邻原子的近邻原子，以此迭代直至搜索不到近邻原子，搜到的这些原子即为一个团簇；跟踪所述团簇所示间的演变，从所述团簇出现开始计时，到团簇大小发生了改变结束，记为出现一次；以此方法，计算不同大小团簇出现的频数，获得不同大小团簇出现的频数随平均宽度的变化曲线，所述变化曲线拐点位置对应着的平均宽度 Δt 。

请参阅图2，为本实施例获得不同大小团簇出现的频数随平均宽度的变化曲线，曲线拐点位置对应着最佳平均宽度。

动力学寿命单元 130 用于根据所述平均原子轨迹获得团簇的动力学寿命。

在本实施例中，动力学寿命单元 130 根据所述平均原子轨迹获得团簇的动力学寿命的步骤中，具体包括：

定义一个函数 $P(t, t_n)$ ，该函数只有两个取值0和1，其中 t_n 表示第 n 个时刻， t 表示时间间隔；

当所述团簇中的原子在 t_n 和 $t_n + t$ 时刻都没有离开团簇，且在这两个时刻之间所有原子都没有离开该团簇， $P = 1$ ；除此以外的情况， $P = 0$ ；

基于 P 的定义，建立一个新的函数 $n(t)$ ，如下式所示

$$n(t) = \frac{1}{N_t} \sum_{n=1}^{N_t} \sum_j P_j(t, t_n) \#;$$

其中 P_j 表示大小为 j 的团簇对应的 P 值， N_t 表示总的时间步长。

根据 $n(t) = n_0 \exp(-t/\tau)$ 的形式，通过拟合 $n(t)$ 与 t 之间的函数关系式，可以获得团簇的动力学寿命 τ 。

相较于之前的定性表征系统，本申请实施例2解决了以前方法只考虑由于热运动引起的原子短暂脱离，而未考虑原子短暂结合的影响，使得计算结果不准确，本申请通过原子轨迹平均的方法可以同时考虑原子的短暂脱离和结合，使得团簇动力学寿命的计算更加准确，可以广泛应用于各类团簇的寿命计算，具有通用性，可适用于单质金属、多元金属、金属氧化物、非金属单质、非金属化合物等团簇材料的表征分析。

实施例3

请参阅图5，图5是本申请实施例提供的一种电子设备的结构示意图，该医疗设备包括：一个或多个处理器、一个或多个存储器、一个或多个通信接口，以及一个或多个程序；所述一个或多个程序被存储在所述存储器中，并且被配置由所述一个或多个处理器执行。

上述程序包括用于执行以下步骤的指令：

获取原子轨迹数据；

根据所述原子轨迹数据获取平均原子轨迹；

根据所述平均原子轨迹获得团簇的动力学寿命。

其中，上述方法实施例涉及的所有相关内容均可以援引到对应功能模块的功能描述，在此不再赘述。

应理解，上述存储器可以包括只读存储器和随机存取存储器，并向处理器

提供指令和数据。存储器的一部分还可以包括非易失性随机存取存储器。例如，存储器还可以存储设备类型的信息。

在本申请实施例中，上述装置的处理器的可以是中央处理单元（Central Processing Unit, CPU），该处理器还可以是其他通用处理器、数字信号处理器（DSP）、专用集成电路（ASIC）、现场可编程门阵列（FPGA）或者其他可编程逻辑器件、分立门或者晶体管逻辑器件、分立硬件组件等。通用处理器可以是微处理器或者该处理器也可以是任何常规的处理器等。

应理解，本申请实施例中涉及的“至少一个”是指一个或者多个，“多个”是指两个或两个以上。“和/或”，描述关联对象的关联关系，表示可以存在三种关系，例如，A 和/或 B，可以表示：单独存在 A，同时存在 A 和 B，单独存在 B 的情况，其中 A、B 可以是单数或者复数。字符“/”一般表示前后关联对象是一种“或”的关系。“以下至少一项(个)”或其类似表达，是指的这些项中的任意组合，包括单项(个)或复数项(个)的任意组合。例如，a、b、或 c 中的至少一项(个)，可以表示：a、b、c、a-b、a-c、b-c、或 a-b-c，其中 a、b、c 可以是单个，也可以是多个。

以及，除非有相反的说明，本申请实施例提及“第一”、“第二”等序数词是用于对多个对象进行区分，不用于限定多个对象的顺序、时序、优先级或者重要程度。例如，第一信息和第二信息，只是为了区分不同的信息，而并不是表示这两种信息的内容、优先级、发送顺序或者重要程度等的不同。

在实现过程中，上述方法的各步骤可以通过处理器中的硬件的集成逻辑电路或者软件形式的指令完成。结合本申请实施例所公开的方法的步骤可以直接体现为硬件处理器执行完成，或者用处理器中的硬件及软件单元组合执行完成。软件单元可以位于随机存储器，闪存、只读存储器，可编程只读存储器或者电可擦写可编程存储器、寄存器等本领域成熟的存储介质中。该存储介质位于存储器，处理器执行存储器中的指令，结合其硬件完成上述方法的步骤。为避免重复，这里不再详细描述。

本申请实施例还提供一种计算机存储介质，其中，该计算机存储介质存储用于电子数据交换的计算机程序，该计算机程序使得计算机执行如上述方法实施例中记载的任一方法的部分或全部步骤。

本申请实施例还提供一种计算机程序产品，上述计算机程序产品包括存储了计算机程序的非瞬时性计算机可读存储介质，上述计算机程序可操作来使计算机执行如上述方法实施例中记载的任一方法的部分或全部步骤。该计算机程序产品可以为一个软件安装包。

需要说明的是，对于前述的各方法实施例，为了简单描述，故将其都表述为一系列的动作组合，但是本领域技术人员应该知悉，本申请并不受所描述的动作顺序的限制，因为依据本申请，某些步骤可以采用其他顺序或者同时进行。

其次，本领域技术人员也应该知悉，说明书中所描述的实施例均属于优选实施例，所涉及的动作和模块并不一定是本申请所必须的。

在上述实施例中，对各个实施例的描述都各有侧重，某个实施例中沒有详述的部分，可以参见其他实施例的相关描述。

在本申请所提供的几个实施例中，应该理解到，所揭露的装置，可通过其它的方式实现。例如，以上所描述的装置实施例仅是示意性的，例如上述单元的划分，仅仅为一种逻辑功能划分，实际实现时可以有另外的划分方式，例如多个单元或组件可以结合或者可以集成到另一个系统，或一些特征可以忽略，或不执行。另一点，所显示或讨论的相互之间的耦合或直接耦合或通信连接可以是通过一些接口，装置或单元的间接耦合或通信连接，可以是电性或其它的形式。

上述作为分离部件说明的单元可以是或者也可以不是物理上分开的，作为单元显示的部件可以是或者也可以不是物理单元，即可以位于一个地方，或者也可以分布到多个网络单元上。可以根据实际的需要选择其中的部分或者全部单元来实现本申请实施例方案的目的。

另外，在本申请各个实施例中的各功能单元可以集成在一个处理单元中，也可以是各个单元单独物理存在，也可以两个或两个以上单元集成在一个单元中。上述集成的单元既可以采用硬件的形式实现，也可以采用软件功能单元的形式实现。

上述集成的单元如果以软件功能单元的形式实现并作为独立的产品销售或使用时，可以存储在一个计算机可读取存储器中。基于这样的理解，本申请的技术方案本质上或者说对现有技术做出贡献的部分或者该技术方案的全部或部分可以以软件产品的形式体现出来，该计算机软件产品存储在一个存储器中，包括若干指令用以使得一台计算机设备（可为个人计算机、服务器或者 TRP 等）执行本申请各个实施例方法的全部或部分步骤。而前述的存储器包括：U 盘、只读存储器（ROM，Read-Only Memory）、随机存取存储器（RAM，Random Access Memory）、移动硬盘、磁碟或者光盘等各种可以存储程序代码的介质。

本领域普通技术人员可以理解上述实施例的各种方法中的全部或部分步骤是可以通过程序来指令相关的硬件来完成，该程序可以存储于一计算机可读存储器中，存储器可以包括：闪存盘、ROM、RAM、磁盘或光盘等。

可以理解，以上所述实施例的各技术特征可以进行任意的组合，为使描述简洁，未对上述实施例中的各个技术特征所有可能的组合都进行描述，然而，只要这些技术特征的组合不存在矛盾，都应当认为是本说明书记载的范围。

以上仅为本申请的较佳实施例而已，仅具体描述了本申请的技术原理，这些描述只是为了解释本申请的原理，不能以任何方式解释为对本申请保护范围的限制。基于此处解释，凡在本申请的精神和原则之内所作的任何修改、等同

替换和改进，及本领域的技术人员不需要付出创造性的劳动即可联想到本申请的其他具体实施方式，均应包含在本申请的保护范围之内。

权 利 要 求 书

1.一种团簇动力学性质的表征分析方法，其特征在于，包括下述步骤：

获取原子轨迹数据；

根据所述原子轨迹数据获取平均原子轨迹；

根据所述平均原子轨迹获得团簇的动力学寿命。

2.如权利要求1所述的团簇动力学性质的表征分析方法，其特征在于，在获取原子轨迹数据的步骤中，具体包括下述步骤：利用分子动力学模拟方法获取原子轨迹数据。

3.如权利要求1所述的团簇动力学性质的表征分析方法，其特征在于，在根据所述原子轨迹数据获取平均原子轨迹的步骤中，具体包括下述步骤：

根据所述原子轨迹数据，设置不同的平均宽度 Δt ，平均每个原子的三个坐标，平均第 j 个原子坐标的具体方法如下：

$$r_j(t_i) = \frac{1}{T_n} \sum_{t=t_i-\Delta t}^{t=t_i+\Delta t} r_j(t) \#$$

其中， t_i 表示第 i 个时刻， T_n 表示总的时间个数， $r_j(t)$ 表示 t 时刻第 j 个原子的坐标。

4.如权利要求3所述的团簇动力学性质的表征分析方法，其特征在于，所述平均宽度 Δt 通过下述步骤实现：

计算原子间径向分布函数，所述原子间径向分布函数中的第一极小值为原子间的截断半径；

根据所述原子间的截断半径，以某一个原子为起始，搜索周边近邻原子，基于这些近邻原子搜索这些近邻原子的近邻原子，以此迭代直至搜索不到近邻原子，搜到的这些原子即为一个团簇；

跟踪所述团簇所示间的演变，从所述团簇出现开始计时，到团簇大小发生了改变结束，记为出现一次；

以此方法，计算不同大小团簇出现的频数，获得不同大小团簇出现的频数随平均宽度的变化曲线，所述变化曲线拐点位置对应着的平均宽度 Δt 。

5.如权利要求1所述的团簇动力学性质的表征分析方法，其特征在于，在根据所述平均原子轨迹获得团簇的动力学寿命的步骤中，具体包括下述步骤：

定义一个函数 $P(t, t_n)$ ，该函数只有两个取值0和1，其中 t_n 表示第 n 个时刻， t 表示时间间隔；

当所述团簇中的原子在 t_n 和 $t_n + t$ 时刻都没有离开团簇，且在这两个时刻之间所有原子都没有离开该团簇， $P = 1$ ；除此以外的情况， $P = 0$ ；

基于 P 的定义，建立一个新的函数 $n(t)$ ，如下式所示

$$n(t) = \frac{1}{N_t} \sum_{n=1}^{N_t} \sum_j P_j(t, t_n) \#;$$

其中： P_j 表示大小为 j 的团簇对应的 P 值， N_t 表示总的时间步长；

根据 $n(t) = n_0 \exp(-t/\tau)$ 的形式，通过拟合 $n(t)$ 与 t 之间的函数关系式，可以获得团簇的动力学寿命 τ 。

6.一种如权利要求 1 所述的团簇动力学性质的表征分析方法的分析系统，其特征在于，包括：

原子轨迹构建单元，用于获取原子轨迹数据；

平均轨迹构建单元，用于根据所述原子轨迹数据获取平均原子轨迹；

动力学寿命单元，用于根据所述平均原子轨迹获得团簇的动力学寿命。

7.一种电子设备，其特征在于，包括处理器、存储器和通信接口，所述存储器存储有一个或多个程序，并且所述一个或多个程序由所述处理器执行，所述一个或多个程序包括用于执行如权利要求 1-5 任一项所述的方法中的步骤的指令。

8.一种计算机可读存储介质，其特征在于，所述计算机可读存储介质存储用于电子数据交换的计算机程序，其中，所述计算机程序使得计算机执行如权利要求 1-5 任一项所述的方法的步骤。

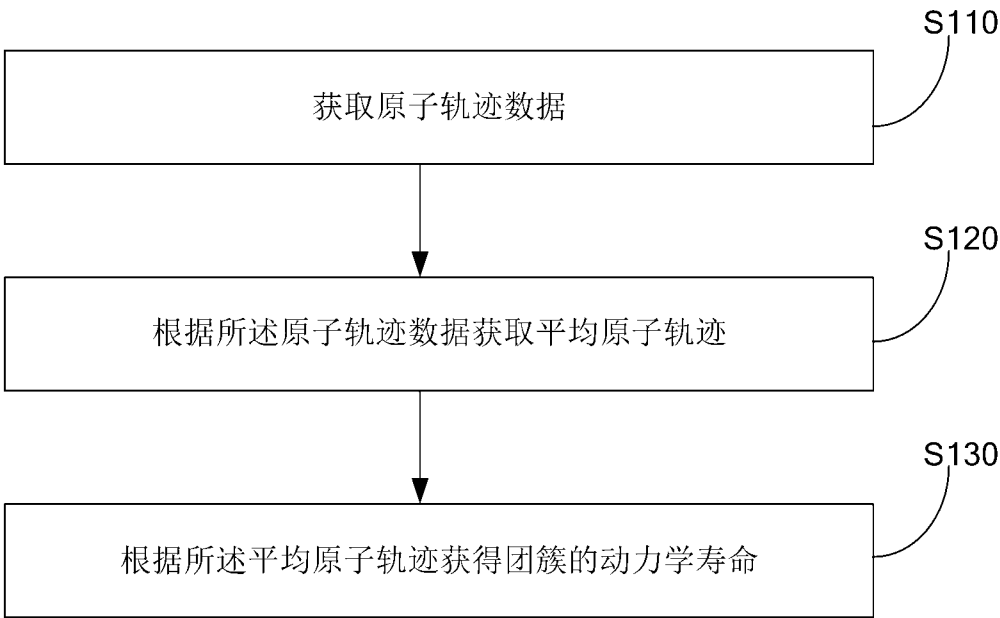


图 1

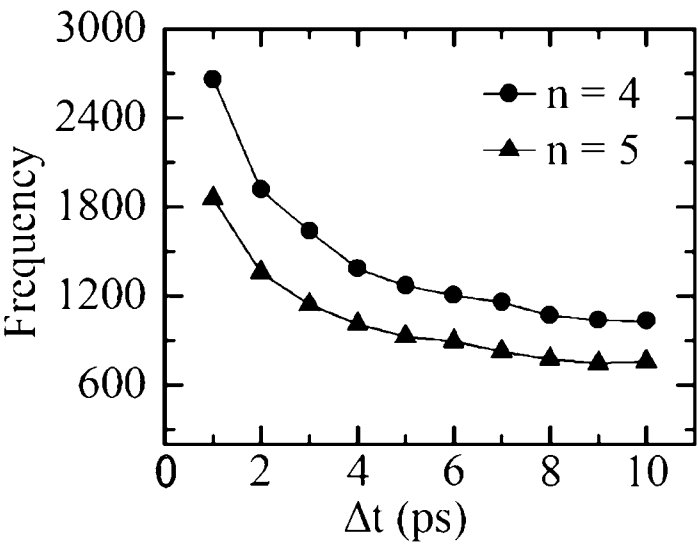


图 2

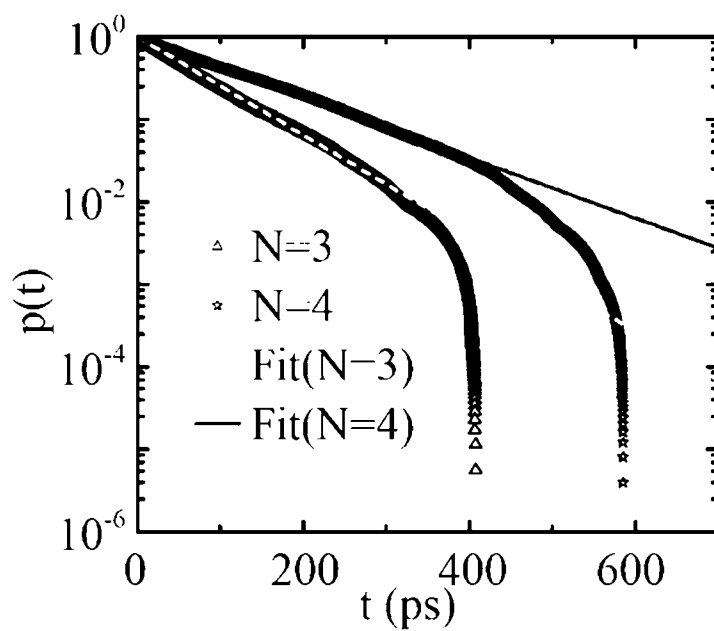


图 3

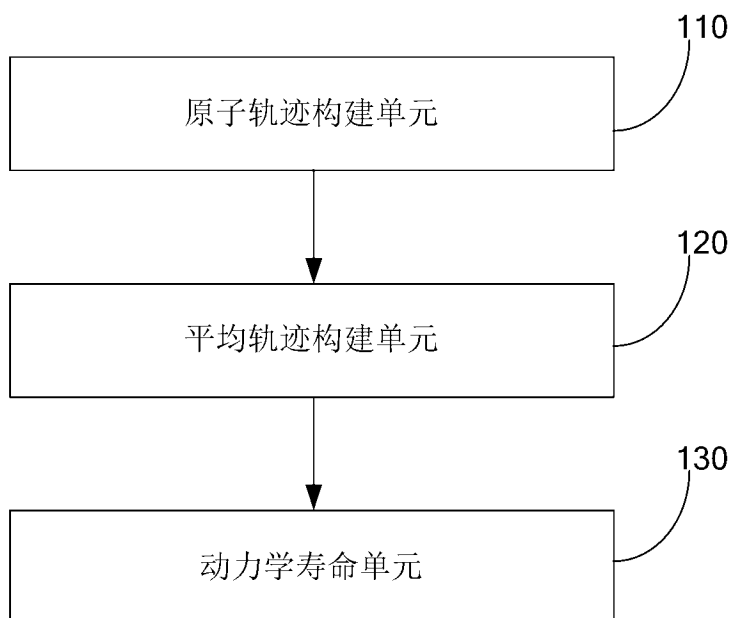


图 4

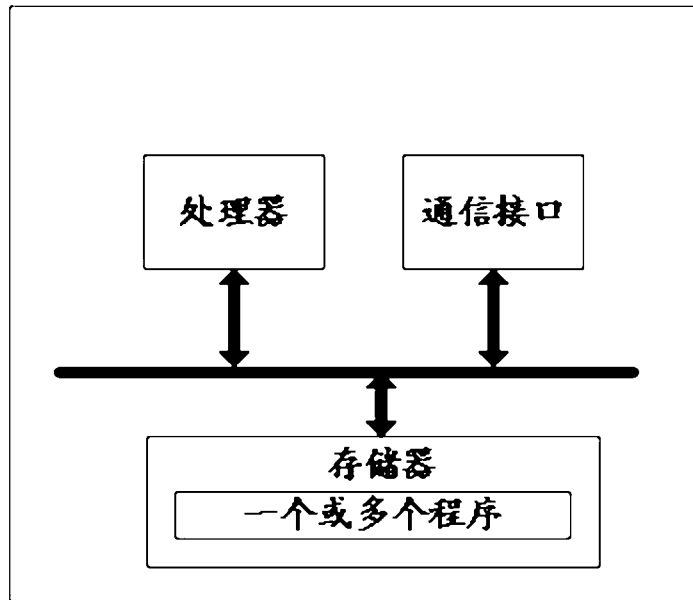


图 5

INTERNATIONAL SEARCH REPORT

International application No.

PCT/CN2023/141308

A. CLASSIFICATION OF SUBJECT MATTER

G16C 60/00(2019.01)i; G16C 10/00(2019.01)i

According to International Patent Classification (IPC) or to both national classification and IPC

B. FIELDS SEARCHED

Minimum documentation searched (classification system followed by classification symbols)

IPC: G16C

Documentation searched other than minimum documentation to the extent that such documents are included in the fields searched

Electronic data base consulted during the international search (name of data base and, where practicable, search terms used)

CNTXT; CNABS; CNKI; VEN; USTXT; WOTXT; EPTXT: 团簇, 动力学, 原子, 轨迹, 平均, 寿命, 宽度, 半径, cluster, dynamic, atomic, trajectory, average, life, width, radius

C. DOCUMENTS CONSIDERED TO BE RELEVANT

Category*	Citation of document, with indication, where appropriate, of the relevant passages	Relevant to claim No.
PX	CN 117012314 A (SHENZHEN INSTITUTES OF ADVANCED TECHNOLOGY, CHINESE ACADEMY OF SCIENCES) 07 November 2023 (2023-11-07) the claims, pages 1-8, and description, paragraphs [0009]-[0118]	1-8
Y	CN 112669911 A (GUANGXI UNIVERSITY OF CHINESE MEDICINE) 16 April 2021 (2021-04-16) description, paragraphs [0004]-[0056]	1-8
Y	刘锋 (LIU, Feng). "离子晶体-溶液界面的分子动力学研究 (Non-official translation: Research on Molecular Dynamics of Ionic Crystal-Solution Interface)" 中国博士学位论文全文数据库 工程科技I辑 (China Doctoral Dissertations Full-Text Database, Engineering Science and Technology I), No. 08, 15 August 2021 (2021-08-15), ISSN: 1674-022X, text, pages 73-87	1-8
A	CN 113270149 A (SHANGHAI UNIVERSITY) 17 August 2021 (2021-08-17) entire document	1-8

☐ Further documents are listed in the continuation of Box C.☒ See patent family annex.

* Special categories of cited documents:

"A" document defining the general state of the art which is not considered to be of particular relevance

"D" document cited by the applicant in the international application

"E" earlier application or patent but published on or after the international filing date

"L" document which may throw doubts on priority claim(s) or which is cited to establish the publication date of another citation or other special reason (as specified)

"O" document referring to an oral disclosure, use, exhibition or other means

"P" document published prior to the international filing date but later than the priority date claimed

"T" later document published after the international filing date or priority date and not in conflict with the application but cited to understand the principle or theory underlying the invention

"X" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered novel or cannot be considered to involve an inventive step when the document is taken alone

"Y" document of particular relevance; the claimed invention cannot be considered to involve an inventive step when the document is combined with one or more other such documents, such combination being obvious to a person skilled in the art

"&" document member of the same patent family

Date of the actual completion of the international search

29 February 2024

Date of mailing of the international search report

17 March 2024

Name and mailing address of the ISA/CN

China National Intellectual Property Administration (ISA/
CN)
China No. 6, Xitucheng Road, Jimenqiao, Haidian District,
Beijing 100088

Authorized officer

Telephone No.

INTERNATIONAL SEARCH REPORT
Information on patent family members

International application No.
PCT/CN2023/141308

Patent document cited in search report			Publication date (day/month/year)	Patent family member(s)			Publication date (day/month/year)
CN	117012314	A	07 November 2023	None			
CN	112669911	A	16 April 2021	CN	112669911	B	23 September 2022
CN	113270149	A	17 August 2021	CN	113270149	B	04 October 2022

A. 主题的分类

G16C 60/00(2019.01)i; G16C 10/00(2019.01)i

按照国际专利分类(IPC)或者同时按照国家分类和IPC两种分类

B. 检索领域

检索的最低限度文献(标明分类系统和分类号)

IPC: G16C

包含在检索领域中的除最低限度文献以外的检索文献

在国际检索时查阅的电子数据库(数据库的名称, 和使用的检索词(如使用))

CNTEXT;CNABS;CNKI;VEN;USTXT;WOTXT;EPTXT: 团簇, 动力学, 原子, 轨迹, 平均, 寿命, 宽度, 半径, cluster, dynamic, atomic, trajectory, average, life, width, radius

C. 相关文件

类型*	引用文件, 必要时, 指明相关段落	相关的权利要求
PX	CN 117012314 A (中国科学院深圳先进技术研究院) 2023年11月7日 (2023 - 11 - 07) 权利要求第1-8页, 说明书第[0009]-[0118]段	1-8
Y	CN 112669911 A (广西中医药大学) 2021年4月16日 (2021 - 04 - 16) 说明书第[0004]-[0056]段	1-8
Y	刘锋. "离子晶体-溶液界面的分子动力学研究" 中国博士学位论文全文数据库工程科技I辑, 第08期, 2021年8月15日 (2021 - 08 - 15), ISSN: 1674-022X, 正文第73-87页	1-8
A	CN 113270149 A (上海大学) 2021年8月17日 (2021 - 08 - 17) 全文	1-8

☐ 其余文件在C栏的续页中列出。

☒ 见同族专利附件。

* 引用文件的具体类型:

"A" 认为不特别相关的表示了现有技术一般状态的文件

"D" 申请人在国际申请中引证的文件

"E" 在国际申请日的当天或之后公布的在先申请或专利

"L" 可能对优先权要求构成怀疑的文件, 或为确定另一篇引用文件的公布日而引用的或者因其他特殊理由而引用的文件(如具体说明的)

"O" 涉及口头公开、使用、展览或其他方式公开的文件

"P" 公布日先于国际申请日但迟于所要求的优先权日的文件

"T" 在申请日或优先权日之后公布, 与申请不相抵触, 但为了理解发明之理论或原理的在后文件

"X" 特别相关的文件, 单独考虑该文件, 认定要求保护的发明不是新颖的或不具有创造性

"Y" 特别相关的文件, 当该文件与另一篇或者多篇该类文件结合并且这种结合对于本领域技术人员为显而易见时, 要求保护的发明不具有创造性

"&" 同族专利的文件

国际检索实际完成的日期

2024年2月29日

国际检索报告邮寄日期

2024年3月17日

ISA/CN的名称和邮寄地址

中国国家知识产权局
中国北京市海淀区蓟门桥西土城路6号 100088

授权官员

徐晓艳

电话号码 (+86) 0512-88995723

PCT/ISA/210 表(第2页) (2022年7月)

国际检索报告
关于同族专利的信息

国际申请号
PCT/CN2023/141308

检索报告引用的专利文件			公布日 (年/月/日)	同族专利	公布日 (年/月/日)
CN	117012314	A	2023年11月7日	无	
CN	112669911	A	2021年4月16日	CN	112669911 B 2022年9月23日
CN	113270149	A	2021年8月17日	CN	113270149 B 2022年10月4日