arXiv:2601.00591v1 [physics.atm-clus] 2 Jan 2026

质子化氩团簇中的配位驱动的幻数

Saajid Chowdhury, [1] Mar´ıa Judit Montes de Oca-Est´evez, [2] Florian Foitzik, [3] Elisabeth Gruber, [3]Paul Scheier, [3] Pablo Villarreal, [2] Rita Prosmiti, [2] Tom´as Gonz´alez-Lezana, [2] 以及 Jes´us P´erez-R´ıos[1]1 *Department of Physics and Astronomy*、 *Stony Brook University*、 *Stony Brook*、 *New York*、 *NY 11794*、 *USA*[2] *Instituto de Física Fundamental*、 *IFF-CSIC*、 *Serrano 123*、 *Madrid 28006*、 *Spain*[3] *Institut für Ionenphysik und Angewandte Physik*、*Universität Innsbruck*、 *Technikerstraße 25*、 *Innsbruck 6020*、 *Austria*（日期：2026年1月5日）

稀有气体团簇的结构性质主要可以通过简单的球堆积模型或两两相互作用来描述。值得注意的是，加入一个质子会产生一组庞大的幻数，而其成因至今仍未得到解释。在本快报中，我们将量子蒙特卡罗技术与能够正确捕捉质子配位环境的多体从头算势相结合，揭示了这些幻数的起源。借助这一方法，我们发现氩原子主要局域在经典极小值附近，因此表现出特别刚性的行为，这与较轻的稀有气体团簇形成鲜明对比。此外，随着团簇尺寸增大，我们确定了一个清晰的结构转变：体系从多体配位驱动的稳定性转变为由二体相互作用主导的状态，这反映了其潜在势能景观的重塑。

离子溶剂化是化学物理中的基本过程之一，指中性溶剂分子因溶剂—溶质相互作用而围绕带电溶质的机制。因此，溶质通常会嵌入溶剂分子之中，形成特定的壳层结构——溶剂化壳层，其性质取决于溶质和溶剂。离子溶剂化在诸多现象中都至关重要，从能量转换 [1] 到低温分子科学 [2–4]皆是如此。大多数有关溶剂化的文献采用宏观方法，运用热力学和化学动力学进行研究。然而，也可以且更适宜在微观层面解释溶剂化；在这一层面，只有完整的量子处理才有意义 [5–8], ，尽管原则上对于大型系统而言，经典方法被认为是唯一切实可行的选择 [9, 10]。沿着这一思路，已有大量关于溶剂化的研究，尤其是关于离子溶剂化的研究 [11–16], ，重点考察量子溶剂（原子或分子）存在时不同阳离子和阴离子的稳定性（结构）。因此，近期对掺杂氦团簇的研究聚焦于理解离子溶剂化的最初步骤 [17–22]，或离子周围大型有序溶剂化壳层的形成 [14, 23]。在实验上，不同离子—溶剂团簇的稳定性很容易测得，由此可得所谓的幻数，即最稳定且蒸发能最高的团簇中所含溶剂原子或溶剂分子的数目。

大多数关于离子溶剂化的实验数据都显示出一组有限的幻数，即使对于二价阳离子也是如此 [14, 23]。大多数研究表明，量子蒙特卡罗技术能够充分再现观测到的幻数序列，并解释团簇的性质。不过，一个例外是 Ar 团簇中的质子溶剂化：其中显示出一组数量众多的幻数 [24, 25]: 7、13、19、23、26、29、32、34、46、49 和 55；这些幻数有助于解释 Harris 等人对带电氩团簇的研究结果 [26, 27]。尽管进行了各种理论研究，但其中只有部分幻数——7、13 和 19——已通过量子化学计算得到证实 [24, 28–33]。其余幻数则根据质子化氩与 Lennard-琼斯团簇的幻数集合之间的相似性，借助球堆积论证进行了定性描述 [24, 25]。然而，这些结果忽略了离子的化学性质，而离子的化学性质体现在其配位数中，即离子形成的键的数量。换言之，迄今为止的大多数方法都未考虑离子的结合机制。事实上，已有研究提出，离子的配位数可能会极大影响离子溶剂化中的结构和幻数序列 [15]。

在这篇快报中，我们结合实验与理论研究了质子化氩团簇。一方面，我们针对该体系开展了新的实验研究，作为对 Gatchell 等人 [24, 25]此前报道工作的延伸。另一方面，我们基于能够描述质子配位的高精度从头算 势能面（PES），采用量子蒙特卡罗方法对这些团簇的稳定性进行了全面的量子力学分析，并解释了实验观察到的所有幻数。我们发现，质子并非总是位于最稳定团簇的中心。此外，我们还表明，基于电荷周围层填充来判断幻数的经验法则并不适用。相反，随着幻数序列的推进，我们发现体系发生了结构转变：从五边形环填充几何结构转变为二十面体几何结构，后者将质子推至团簇中心轴的一侧。这种转变与配体-配体相互作用和离子-配体相互作用所起的作用有关，也体现了少体相互作用与多体相互作用重要性之间更深层次的变化。

本快报所呈现的新实验结果采用了文献{v1}中所述的实验装置获得。

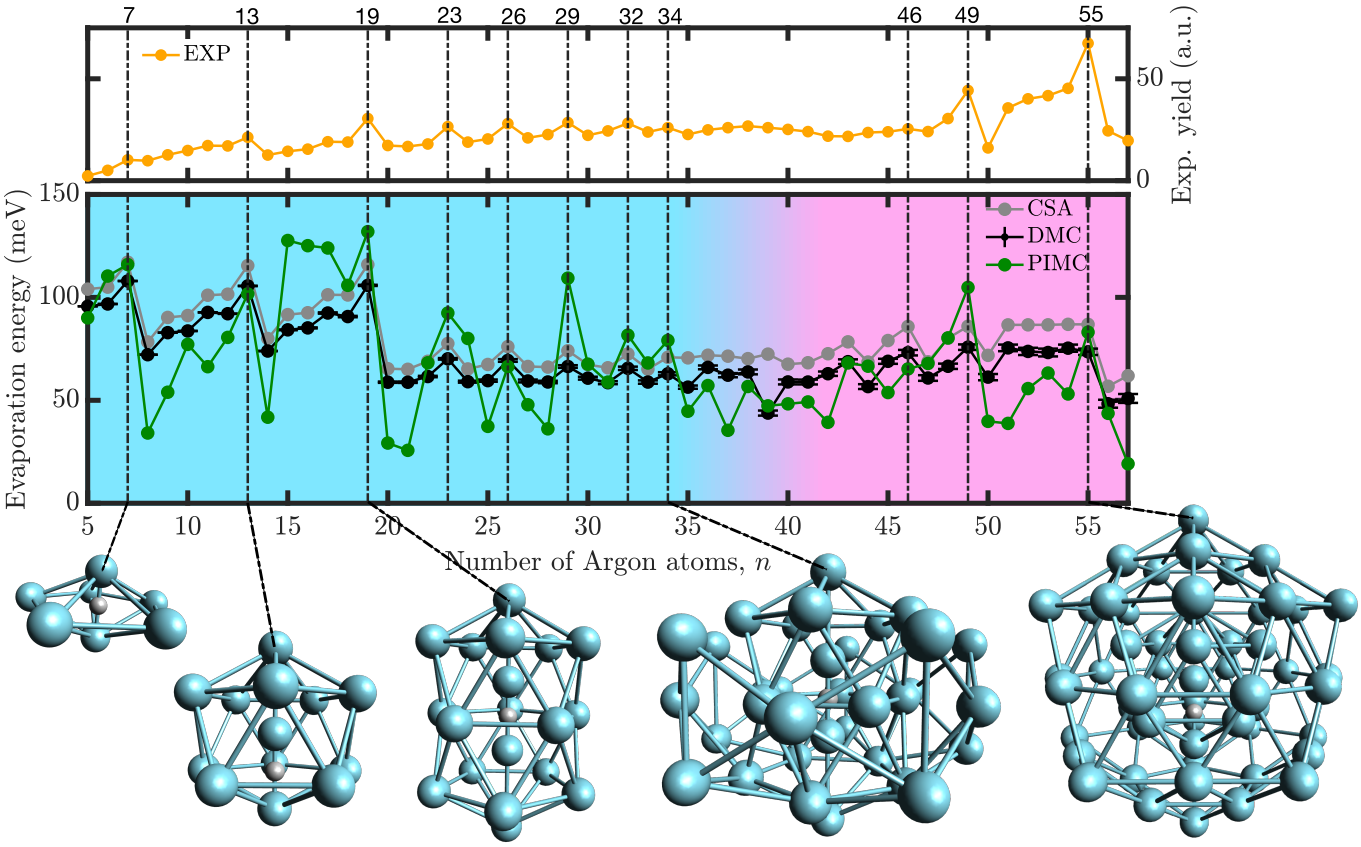

图 1。（上图）实验观测到的离子丰度随氩原子数目的变化。由于碎裂过程是自上而下的，这些丰度反映了团簇的相对稳定性。（下图）Ar_nH^+ 团簇蒸发能的绝对值。灰色点表示使用经典优化技术 CSA 计算的势能差 $V_n - V_{n-1}$。黑色点表示使用扩散蒙特卡罗计算的基态能量差 $E_n - E_{n-1}$，其中考虑了原子核振动运动的零点能。绿色点表示使用路径积分蒙特卡罗计算的能量差 $E_n - E_{n-1}$，其中还考虑了热分布。虚线表示实验观测到的 Ar_nH^+ 团簇幻数。蓝色区域中的 Ar_nH^+ 团簇具有由五边形环构成的第二壳层，而洋红色区域中的团簇具有二十面体第二壳层。这种结构变化与从多体效应（蓝色区域）向少体效应（洋红色区域）的转变相关。图中从左到右展示了 $n = 7$、13、19、34 和 55 个原子的经典结构。

简而言之，质子化氩团簇是在氦纳米液滴内部形成的。首先，将预电离的多重带电氦液滴 [35] 掺杂氢分子气体；氢分子气体被液滴表面另一侧的电荷吸引，并通过电荷转移发生电离，形成 $(H_2)_nH^+$。随后掺杂氩，会促使质子转移至每个 $(H_2)_nH^+$ 离子所遇到的第一个氩原子上 [36]。之后，额外的氩原子会溶剂化这些 ArH^+ 离子，形成 Ar_nH^+ 团簇离子。

新装置的一项关键优势是能够对这些团簇进行精确、可控的碎裂。为使 Ar_nH^+ 复合物脱离液滴，液滴会与室温氦气发生碰撞。这种可控碰撞会使液滴尺寸减小，并释放出单个由氦溶剂化的 Ar_nH^+ 团簇。通过将氦蒸发压力调节至足够高，我们不仅能去除剩余的氦原子还能去除结合较弱的氩原子，从而确保只有最稳定的团簇构型得以保留。这种自上而下的碎裂方式将观测到的离子丰度直接与蒸发能联系起来，进而与团簇稳定性相关；丰度越高，表明稳定性越强 [37]。所得氩系列通过飞行时间质谱法进行测量，并呈现于图 1 中。

在本文报告的所有计算中，我们采用多体展开形式 [38]，以模拟随着 Ar_nH^+ 中氩原子数增加而产生的底层相互作用 [32]，

$$V \approx \sum_i V_i^{(1B)} + \sum_{i<j} V_{ij}^{(2B)} + \sum_{i<j<k} V_{ijk}^{(3B)} + \sum_{i<j<k<l} V_{ijkl}^{(4B)}, \quad (1)$$

其中，二体（2B）项（V_{ArH^+}, V_{Ar_2}）、三体（3B）项（$V_{Ar_2H^+}$）和四体（4B）项（$V_{Ar_3H^+}$）由机器学习势能表示

能量面基于金标准 CCSD(T)/CBS 和 CCSD(T)-F12/aug-cc-pVQZ 数据训练 [29, 30, 33]。这一展开框架能够准确描述势能面中的协同效应，并具有良好的可迁移性；它显式纳入了配位数为 2 的质子，从而考虑了四体（4B） [Ar–H–Ar]$^+$–Ar 相互作用。

我们从三个不同的理论层面研究质子化氩团簇的稳定性。首先，我们采用构象空间退火（CSA）方法 [39] 计算 Ar$_n$H$^+$ 的全局极小值；这是一种经典优化技术。该算法从一组随机生成的构型开始，通过交配、变异和梯度下降使这一构型群不断演化。为了保持局部极小值的多样性，算法采用了结构差异度量。对于每个 n，算法至少运行 25 次，每次运行最多进行两百万次局部极小化。另一方面，我们采用扩散蒙特卡罗（DMC）方法 [40], 计算每个团簇的基态能量，并计入原子围绕全局极小值振动所产生的零点能修正。对于每个 n，我们至少独立运行 DMC 25 次；每次运行中，20,000 个随机游走粒子都从 CSA 给出的构型出发。在 10,000 个时间步（$d\tau = 10$ 原子单位）内，随机游走粒子执行高斯随机步进，包括刚性 Ar–H–Ar 核心的旋转和平移 []$^+$ 。根据时间步前后的势能差，随机游走粒子会被消除，或最多复制 2 次。将最后 2500 个时间步中随机游走粒子的平均势能作为基态能量报告。最终，要探究给定团簇的稳定性，还需考虑温度效应；在本研究中，我们采用路径积分蒙特卡罗（PIMC）方法 [5]，以获得相应 Ar$_n$H$^+$ 团簇在 $T = 2$ K 下的能量和几何结构。我们同样从经典优化后的构型出发进行 10,000 步模拟，使用 400 至 500 个所谓的量子珠 M，并采用热力学能量估算器，方法与近期对离子掺杂氦团簇 [14, 18, 23]的研究相同。

图 1 展示了蒸发能随团簇内原子数变化的理论预测结果，并与实验数据进行了对比（上图），其中竖直虚线标出了幻数。经典结果以灰色表示，扩散蒙特卡罗结果以黑色表示，路径积分蒙特卡罗结果以绿色表示。值得注意的是，经典结果再现了所有幻数。经典蒸发能与扩散蒙特卡罗蒸发能非常接近，表明质子化氩团簇具有刚性结构。路径积分蒙特卡罗结果最终证实了这一点，其与扩散蒙特卡罗结果仅存在细微偏差。第一个幻数 $n = 7$ （五角双锥）源于围绕配位复合物 [Ar-H-Ar]$^+$ 轴的五元环。

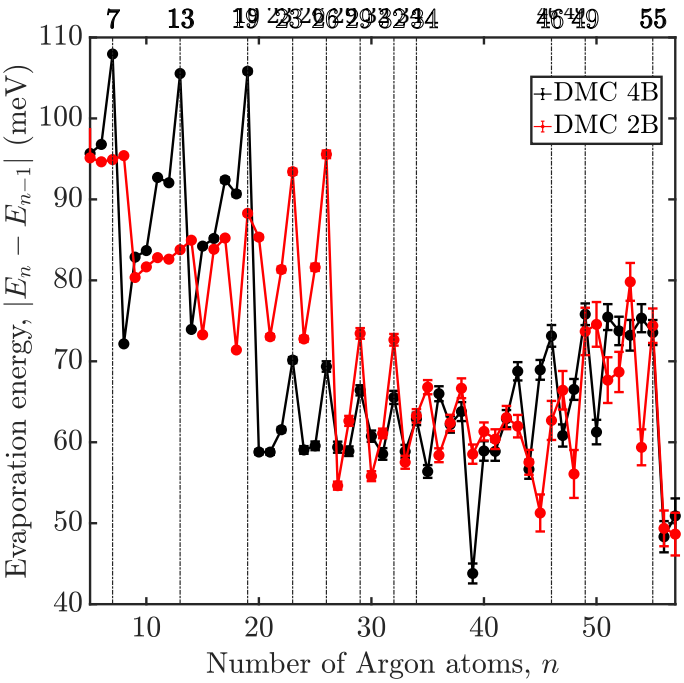

图 2. Ar$_n$H$^+$ 团簇的理论蒸发能。黑色数据点表示基态能量差 $E_n - E_{n-1}$，计入原子核振动运动的零点能，并通过扩散蒙特卡罗计算得出，其中包含三体项和四体项。红色数据点表示仅包含两两相互作用势的扩散蒙特卡罗计算结果。

下一个幻数 $n = 13$ 是第一个二十面体，这与 Lennard-琼斯团簇中的情况一致。值得注意的是，离子并不位于该团簇的中心。然而，对于下一个幻数 $n = 19$, 由于在 Ar$_7$H$^+$所呈现的五角双锥顶部和底部分别添加了两个五角锥，质子位于团簇中心。这三个幻数此前已通过量子化学计算和经典最小化方法 [24, 32]进行了表征。随后，出现了一组相差 3 和 2 个氩原子的数列（23、26、29、32 和 34）：随着更多氩原子围绕质子形成新的壳层，最终达到 $n = 39$，此时结构不同的半二十面体壳层完成（见补充信息（SI）中的图 4）。最后的幻数 $n = 46$、49 和 55 出现在完整的二十面体壳层于 $n = 55$ 围绕 $n = 13$二十面体完成之时。这组特殊幻数源于在公式（1）中纳入了最高达四体的多体相互作用。

这些多体项（最高至四体）的重要性体现在图2所示的比较中：图中将仅使用成对相互作用势描述（Ar-Ar 和 Ar-H$^+$相互作用取自 [41] [42]）所得的结果，与使用式（1）所述势能 [32], 所得的结果进行了比较。图中的蒸发能仅通过扩散蒙特卡罗计算获得，但相应的路径积分蒙特卡罗图同样清楚地展现了这两种势能面的不同表现。最显著的差异是最小幻数处的峰。因此，当模拟仅使用二体势时，$^+$,13 和 19 处的特征完全消失。这一反常现象使我们将质子化氩团簇区分为多体物理区间（至 -39）和少体物理区间（）。

因此，当前结果表明，实验离子产额中观察到的这三种氩$_7$H$^+$、氩$_{13}$H$^+$ 和氩$_{19}$H$^+$ 团簇的峰，只有在采用明确包含最高至四体效应的势能面计算蒸发能时，才会作为反常特征在理论计算的蒸发能中重现，相关讨论见式（1）。事实上，这三种团簇直接源于 [Ar-H-Ar]$^+$ 配位复合物的结构和性质。随后，通过添加氩原子形成负责 $n = 23, 26, 29, 32,$ 以及最后 34 处峰值的构型，从而形成由更多五角锥构成的赤道屏蔽层。更大的幻数也遵循同样的规律，直至 $n = 55$，从而完成二十面体壳层。

另一方面，路径积分蒙特卡罗模拟表明，氩团簇并未明显偏离用于启动量子计算的经典优化构型中的位置。图 3 绘出了由 CSA 构型和路径积分蒙特卡罗计算得到的 $n = 19$ 和 $n = 34$ 团簇的 Ar-H$^+$ 距离分布。比较这两种分布可以看出，量子结果的范围并未明显超出经典分布的峰值。图 3 还插入了两个团簇的路径积分蒙特卡罗分布。SI 中为 $n = 34$ 提供的动画进一步展示了模拟过程中氩原子的运动。因此，在 Ar$_{39}$H$^+$ 处经历显著的结构变化后，才形成更大的团簇。在这一特定尺寸之前，团簇结构由一个内核组成，其几何形状与上文讨论的 Ar$_{19}$H$^+$ 中观察到的结构相同，外侧则环绕着三圈赤道位置的原子五元环。但恰恰在 Ar$_{39}$H$^+$ 中，内核中的一个五元环（最初与中心含有质子的五元环反平行）移入了平行位置。超过这一尺寸后，这种新的排列成为最终形成大型二十面体对称有序结构的基础，这种结构见于 Ar$_{55}$H$^+$。在补充信息（SI）的图 3–5 中，我们展示了 Ar$_{19}$H$^+$、Ar$_{39}$H$^+$ 和 Ar$_{55}$H$^+$ 团簇的几何结构，并着重指出 Ar 原子位置的这种变化。对所有这些构型的分析表明，围绕 H$^+$ 构建 Ar 溶剂化层的方式是：在某些尺寸下，内部质子不一定占据中心位置，这与某些其他掺杂氦团簇 [14, 23]的情况相反。

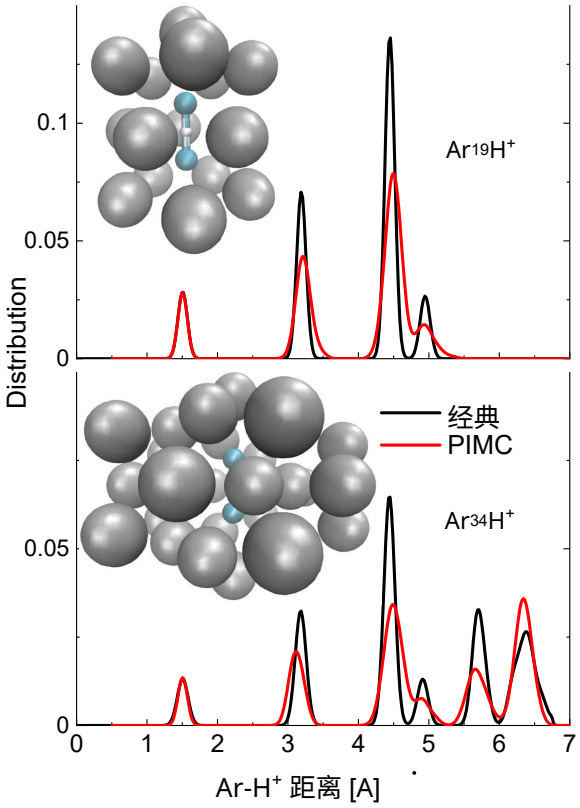

图 3. 用于启动量子力学模拟的经典构型（黑色）以及通过路径积分蒙特卡罗计算（红色）得到的 Ar-H$^+$ 距离分布，分别对应 Ar$_{19}$H$^+$（上）和 Ar$_{34}$H$^+$（下）团簇。插图展示了这两种团簇的概率分布。

总之，通过对相互作用势进行多体展开，并纳入最高至 4B 阶的项，以明确考虑质子的配位数，我们解释了含有一个溶剂化于氩中的质子的团簇中完整的幻数序列。幻数的变化源于 Ar$_n$H$^+$ 中的结构转变，其驱动力是多体相互作用与二体相互作用相对重要性的变化。含有两个 Ar 原子的质子–氩配位复合物，对于理解所有尺寸不超过 $n = 34$ 的幻数团簇的结构与稳定性至关重要，同时也为更大尺寸下观测到的二十面体基元的生长奠定基础。然而，超过 $n = 34$ 后，配位复合物不再起主导作用，Ar–Ar相互作用转而占据主导地位，而有效的二体势能够准确描述由此形成的二十面体结构。此外，我们的量子计算表明，Ar 原子仅在其经典位置附近发生微乎其微的运动，说明所有团簇都具有很高的刚性。这些发现对杂质物理具有直接意义，尤其是对量子简并气体中的离子杂

质而言；在这类系统中，预计会形成多体束缚态和极化子 [3, 4, 43]。此类系统中配位复合物的作用直到最近才开始受到研究，迄今为止主要是从二体视角出发 [2]。类似地，极性气体中的单个离子为研究奇异量子物质提供了新的可能性 [44]。然而，在超冷区域，离子-分子复合物稳定性的理论研究仍然不足；在此条件下，配位以及离子杂质的化学性质可能至关重要。因此，我们的结果表明，明确纳入配位复合物会显著影响对超冷气体中带电杂质的结构与动力学的预测。

S. C. 和 J. P.-R. 感谢美国空军科学研究办公室的支持，[资助编号为 FA9550-23-1-0202]。M.J.M.O.E.、R.P.、P.V. 和 T.G.L. 感谢获得 MICIU/AIE/10.13039/501100011033 PID2024- 155666NB-I00 项目以及马德里自治区 INVESTIGO 项目（编号：INV23-IFF-M2-09）的资助。本研究部分由奥地利科学基金（FWF）[10.55776/I6221, 10.55776/P34563, 10.55776/V1035]资助。

CSA 和扩散蒙特卡罗的数据与代码，以及团簇几何结构，可在 [45] 获取。

[1] C. G. Rodellar、J. Gisbert-Gonzalez、F. Sarabia、B. Roldan Cuenya 和 S. Z. Oener，《双极膜及电解质-金属界面中的离子溶剂化动力学》，《自然·能源》**9**, 548 (2024)。[2] S. Chowdhury 和 J. Perez-R´ıos，《原子浴中的离子溶剂化：从雪球到极化子》，Nat. Sci. **4**, e20240006 (2024)。[3] G. E. Astrakharchik、L. A. P. Ardila、R. Schmidt、K. Jachymski 和 A. Negretti，《玻色-爱因斯坦凝聚体中的离子极化子》，Comm. Phys. **4**, 94 (2021)。[4] E. R. Christensen、A. Camacho-Guardian 和 G. M. Bruun，《玻色-爱因斯坦凝聚体中的带电极化子和分子》，Phys. Rev. Lett. **126**, 243001 (2021)。[5] R. Rodr´ıguez-Cantano、T. Gonz´alez-Lezana 和 P. Vil- larreal，《掺杂氦团簇的路径积分蒙特卡罗研究》，《国际物理化学评论》**35**, 37 (2016)。[6] G. Alagona、C. Ghio 和 P. Kollman，《离子溶剂化的蒙特卡罗模拟研究。1. 乙酸根阴离子和甲铵阳离子》，J. Am. Chem. Soc. **108**, 185 1986( )。[7] M. A. Morales、R. Clay、C. Pierleoni 和 D. M. Ceperley，《第一性原理方法：量子蒙特卡罗的视角》，Entropy **16**, 287 (2014)。[8] E. Garc´ıa-Alfonso、M. Barranco、D. A. Bonhommeau、N. Halberstadt、M. Pi 和 F. Calvo，《纯氦纳米团簇与掺杂氦纳米团簇中的团簇形成、碰撞和弛豫动力学：基于密度的方法与基于粒子的方法》，J. Chem. Phys. **157**, 014106 (2022)。[9] C. Lin、X. He、C. Xi、Q. Zhang 和 L.-W. Wang，基于第一性原理分子动力学热力学积分的离子溶剂化自由能计算，《化学物理杂志》160，184115（2024）。[10] C. Xi、F. Zheng、G. Gao、Z. Song、B. Zhang、C. Dong、X.-W. Du 和 L.-W. Wang，采用混合溶剂模型的从头算分子动力学离子溶剂化自由能计算，《化学理论与计算杂志》18，6878（2022）。[11] M. Bartolomei、P. Martini、R. P´erez de Tudela、T. Gonz´alez-Lezana、M. I. Hern´andez、J. Campos-Mart´ınez、J. Hern´andez-Rojas、J. Bret´on 和 P. Scheier，氦团簇中溶剂化的 Ca^+ 离子，《Molecules》26，3642（2021）。[12] T. Gonz´alez-Lezana、O. Echt、M. Gatchell、M. Bar-tolomei、J. Campos-Mart´ınez 和 P. Scheier，离子在氦中的溶剂化，《国际物理化学评论》39，465（2020）。[13] J. Ortiz de Z´arate、M. Bartolomei、T. Gonz´alez-Lezana、J. Campos-Mart´ınez、M. I. Hern´andez、R. P´erez de Tudela、J. Hern´andez-Rojas、J. Bret´on、F. Pirani、L. Kranabetter、P. Martini、M. Kuhn、F. Laimer 和 P. Scheier，分子氢和氘中 Cs^+ 溶剂化的雪球形成，《物理化学化学物理》21，15662（2019）。[14] E. Zunzunegui-Bru、E. Gruber、T. L´azaro、M. Bar-tolomei、M. I. Hern´andez、J. Campos-Mart´ınez、T. Gonz´alez-Lezana、S. Bergmeister、F. Zappa、P. Scheier、R. P´erez de Tudela、J. Hern´andez-Rojas 和 J. Bret´on，在掺杂氦液滴中观测到多个有序溶剂化壳层：以 He_NCa^{2+}为例，《物理化学快报》14，3126（2023）。[15] S. Roszak 和 J. Leszczynski，离子微溶剂化的从头算研究，《物理化学杂志 A》107，949（2003）。[16] M. Rastogi、C. Leidlmair、L. An der Lan、J. Or-tiz de Z´arate、R. P´erez de Tudela、M. Bartolomei、M. I. Hern´andez、J. Campos-Mart´ınez、T. Gonz´alez-Lezana、J. Hern´andez-Rojas、J. Bret´on、P. Scheier 和 M. Gatchell，氦中溶剂化的锂离子，《物理化学化学物理》20，25569（2018）。[17] S. H. Albrechtsen、C. A. Schouder、A. Vi˜nas Mu˜noz、J. K. Christensen、C. Engelbrecht Petersen、M. Pi、M. Bar-ranco 和 H. Stapelfeldt，观测氦液滴中离子溶剂化的初始步骤，《自然》623，319（2023）。[18] S. H. Albrechtsen、J. K. Christensen、C. E. Petersen、C. A. Schouder、P. J. Carchi-Villalta、I. S´anchez-P´erez、M. Bartolomei、T. Gonz´alez-Lezana、F. Pirani 和 H. Stapelfeldt，氦纳米液滴中 Na^+ 离子的飞秒及原子分辨溶剂化动力学，《化学物理杂志》162，174309（2025）。[19] E. Garc´ıa-Alonso、M. Barranco、N. Halberstadt 和 M. Pi，超流氦纳米液滴中碱金属离子的时间分辨溶剂化，《计算物理学杂志》160，164308（2024）。[20] F. Calvo，氦纳米液滴中钠离子的时间分辨溶剂化与库仑喷射的并发过程，《化学物理杂志》161，121101（2024）。[21] R. Yanes-Rodr´ıguez、P. Villarreal 和 R. Prosmiti，氦中阳离子碱金属二聚体的微溶剂化：量子离域及氦壳层的类固体／类液体行为，《物理化学化学物理》27，8259（2025）。[22] M. J. M. de Oca-Est´evez、P. Villarreal、J. Hern´andez-Rojas、J. Bret´on、A. Sarsa 和 R. Prosmiti，数据驱动相互作用模型与氢掺杂氦纳米团簇的生长模式，《化学物理快报》877，142242（2025）。[23] F. Foitzik、M. Bartolomei、J. Campos-Mart´ınez、F. Pi-

rani、S. Bergmeister、L. Ganner、I. Stromberg、F. Zappa、M. Mahmoodi-Darian、T. Gonz´alez-Lezana 和 E. Gru-ber，围绕多重带电物种形成大型有序氦溶剂化壳层：He_NHo^{2+} 和 He_NBi^{2+}，《Small Struct.》6，2500094（2025）。[24] M. Gatchell、P. Martini、L. Kranabetter、B. Rasul 和 P. Scheier，阳离子及质子化氩团簇的幻数尺寸，《物理评论 A》98，022519（2018）。[25] M. Gatchell、P. Martini、A. Schiller 和 P. Scheier，氖和氪的质子化团簇，《J. Am. Soc. Mass Spectrom.》30，2632（2019）。[26] I. Harris、K. Norman、R. Mulkern 和 J. Northby，大型带电氩团簇的二十面体结构，《化学物理快报》130，316（1986）。[27] I. A. Harris、R. S. Kidwell 和 J. A. Northby，自由射流膨胀中形成的带电氩团簇结构，《物理评论快报》53，2390（1984）。[28] I. McDonald、D. C.、D. T. Mauney、D. Leicht、J. H. Marks、J. A. Tan、J.-L. Kuo 和 M. A. Duncan，通讯：在氩中俘获一个质子：质子键合氩二聚体及其溶剂化的光谱学与理论，《化学物理杂志》145，231101（2016）。[29] M. J. Montes de Oca-Est´evez、A. Vald´es 和 R. Prosmiti，阳离子 Ar 氢化物（Ar_2H^+）的基于核的机器学习势与量子振动态分析，《物理化学化学物理》26，7060–7071（2024）。[30] M. J. Montes de Oca-Est´evez、A. Vald´es、D. Koner、T. Gonz´alez-Lezana 和 R. Prosmiti，质子键合稀有气体 Ar_2H^+ 复合物新型神经网络势的量子计算：同位素效应，《化学物理快报》856，141641（2024）。[31] K. T. Giju、S. Roszak 和 J. Leszczynski，质子化氩团簇的理论研究：Ar_nH^+ ($n = 1$-7)，《化学物理杂志》117，4803（2002）。[32] M. J. Montes de Oca-Est´evez 和 R. Prosmiti，氩原子对质子的微溶剂化：Ar_nH^+ 团簇的结构与能量学，《Molecules》29，4084（2024）。[33] M. J. Montes de Oca-Est´evez 和 R. Prosmiti，天体物理物种的计算表征：稀有气体氢化物阳离子，《Frontiers in Chemistry》**9**，187（2021）。[34] S. Bergmeister、L. Ganner、J. Locher、F. Zappa、P. Scheier 和 E. Gruber，氦标记分子离子的光谱学——新型实验装置的研制，《Rev. Sci. Instr.》**94**（2023）。[35] F. Laimer、L. Kranabetter、L. Tiefenthaler、S. Albertini、F. Zappa、A. M. Ellis、M. Gatchell 和 P. Scheier，超流氦的高带电液滴，《Phys. Rev. Lett.》**123**，165301（2019）。[36] L. Tiefenthaler、S. Kollotzek、A. M. Ellis、P. Scheier 和 O. Echt，亚开尔文温度下的质子转移，《Phys Chem Chem Phys》**22**，28165（2020）。[37] K. Hansen 和 U. N¨aher，蒸发与团簇丰度谱，《Phys. Rev. A》**60**，1240（1999）。[38] J. N. Murrell, *Molecular potential energy functions*（Wiley，1984）。[39] J. Lee、I.-H. Lee 和 J. Lee，使用构象空间退火方法对 Lennard-琼斯团簇进行无偏全局优化，《Phys. Rev. Lett.》**91**，080201（2003）。[40] I. Kosztin、B. Faber 和 K. Schulten，扩散蒙特卡罗方法导论，《Am. J. Phys.》**64**，633（1996）。[41] O. C. F. Brown、D. Vrinceanu、V. Kharchenko 和 H. R. Sadeghpour，质子种子诱导的氩团簇形成，《Mol. Phys.》**118**，e1767813（2020）。[42]使用参考文献 [46]中的相互作用势时，幻数和团簇结构几乎完全相同。[43] R. Cˆot´e、V. Kharchenko 和 M. D. Lukin，玻色-爱因斯坦凝聚体中的介观分子离子，《Phys. Rev. Lett.》**89**，093001（2002）。[44] L. Karpa 和 O. Dulieu，离子与极性分子之间的超冷相互作用，《Phys. Rev. Res.》**7**，021002（2025）。[45] S. Chowdhury，supplementArgon，https://github.com/saajidchowdhury/supplementArgon/tree/main（2025）。[46] T. Xiao-Fei、Y. Chuan-Lu、X. Jing、W. Mei-Shan 和 M. Xiao-Guang，氦、氖和氩的络合物的理论研究，《Chin. Phys. B》**19**，123102（2010）。