

混合量子-经典动力学方法研究反胶团水池中I₂分子的振动频率位移

周爱松, 周立川, 李慎敏

大连大学, 辽宁省生物有机化学重点实验室, 辽宁 大连 116622

摘要:

结合Monte Carlo模拟技术, 提出了一种反胶团溶液的快速数学建模新方法. 利用量子-经典动力学模拟方法, 考察了I₂分子受限于两个不同尺寸的反胶团水池中振动频率的诱导位移及谱分布. 结果表明, 相比于体相水, 受限于反胶团水池中I₂分子的诱导位移表现为蓝移, 且蓝移大小随水池尺寸变化不大. 通过对I₂分子与周围环境相互作用的分解分析, 得到了水池水、表面活性剂以及有机溶剂分子对I₂分子振动频率诱导位移的瞬态贡献, 揭示了I₂分子振动弛豫的微观作用机制. 此外, 对于受限水池中水分子的诱导贡献及空间分布的研究表明, I₂分子振动频率位移的诱导贡献主要来自于第一溶剂层, 它是由4个水分子蓝移贡献和2个水分子红移贡献组成.

关键词: 振动频率位移 混合量子-经典动力学 反胶团 受限水池 谱分布

收稿日期 2009-03-10 修回日期 2009-04-14 网络版发布日期 2009-05-22

通讯作者: 李慎敏 Email: shenmin@dl.cn

本刊中的类似文章

1. 郑欧; 赵剑曦; 付贤明. C₁₂-s-C₁₂•2Br在正庚烷中反胶团形成及增溶水特性[J]. 物理化学学报, 2006, 22(03): 322-325
2. 闫文飞; 廖华; 施鼐; 周维金; 吴瑾光; 徐光宪. 环烷酸锑-环烷酸钠微乳体系的荧光光谱[J]. 物理化学学报, 2000, 16(03): 269-272
3. 林翠英; 赵剑曦. NaBr对C₁₂-s-C₁₂•2Br/氯仿体系中反胶团增溶水能力的影响[J]. 物理化学学报, 2006, 22(12): 1501-1505
4. 郑欧; 颜华; 龙云霞; 赵剑曦; 高绍康. 庚烷中C₁₂-EO_x-C₁₂•2Br反胶团的形成[J]. 物理化学学报, 2007, 23(01): 64-67

扩展功能

本文信息

PDF(2110KB)

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

▶ 振动频率位移

▶ 混合量子-经典动力学

▶ 反胶团

▶ 受限水池

▶ 谱分布

本文作者相关文章

▶ 周爱松

▶ 周立川

▶ 李慎敏