

## 高岭石-水体系中水分子结构的分子动力学模拟

牛继南, 强颖怀

中国矿业大学材料科学与工程学院, 江苏 徐州 221116

摘要:

以Hendricks模型为初始结构, 利用CLAYFF力场对高岭石-水体系进行无晶体学限制的分子动力学模拟. 结果表明, 层间水有三种类型: I型类似于Costanzo提出的“洞水”分子, 其HH矢量(水分子中从一个氢原子位置指向另一个氢原子位置的方向矢量)平行于(001)平面, 而C2轴稍微倾斜于(001)面法线; II型类似于“连接水”, 一个氢氧键指向临近的层间四面体氧形成氢键, 另一个氢氧键与(001)面近似平行; III型水分子在层间近似保持为竖直状, 一个氢与层间四面体氧形成氢键, 而另一个氢与对面层的羟基氧形成氢键. 高岭石羟基氢沿(001)晶面法线的浓度曲线显示一部分羟基指向变为近似平行于(001)面, 羟基氧因此能够暴露出来与层间水分子氢形成氢键. 此外, 模拟中还观察到部分II型水分子氧偏离于层间的平均位置而更靠近四面体层, 这和Costanzo的实验结果一致, 可能是X射线谱图中(002)弱衍射峰出现的原因.

关键词: 力场 高岭石 水 分子动力学

收稿日期 2009-01-02 修回日期 2009-03-05 网络版发布日期 2009-03-30

通讯作者: 强颖怀 Email: yhqiang@cumt.edu.cn

### 本刊中的类似文章

1. 张强;张霞;杨忠志.环多肽晶体的浮动电荷极化力场模拟[J]. 物理化学学报, 2006,22(10): 1243-1247
2. 张兵;邹建卫;郑柯文;刘海春;曾敏;俞庆森.基于5-芳基乙内酰胺类化合物的CoMFA和HQSAR研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(10): 1204-1210
3. 丁俊杰;丁晓琴;赵立峰;陈冀胜.二氢吡啶类化合物的三维定量构效关系[J]. 物理化学学报, 2003,19(12): 1108-1113
4. 崔宝秋;宫利东;赵东霞.微过氧化物酶水溶液的ABEEM/MM动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2008,24(06): 1035-1040
5. 黄常康;高莹;刘振明;刘莹;来鲁华.吡咯烷类胞液型磷脂酶A2抑制剂的比较分子力场分析[J]. 物理化学学报, 2003,19(01): 79-81
6. 王宝雷;马宁;王建国;马翼;李正名;李永红.新磺酰胺类化合物除草活性的3D-QSAR分析[J]. 物理化学学报, 2004,20(06): 577-581
7. 陆爱军;刘冰;刘海波;周家驹.GABA<sub>A</sub>五种亚型受体与BZ配基的3D-QSAR研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(05): 488-493
8. 刘冰;陆爱军;廖晨钟;刘海波;周家驹.磺胺基羟胺类HDAC抑制剂三维定量构效关系[J]. 物理化学学报, 2005,21(03): 333-337
9. 孙倪悦 陆涛 陈亚东 郝兰虎 许岩 李瑞君.3D-QSAR和分子对接研究咪唑唑类细胞周期蛋白激酶抑制剂的选择性[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 645-654
10. 魏卓 张怀 崔巍 计明娟.马来酰胺类糖原合成酶激酶-3β抑制剂的分子对接和三维定量构效关系[J]. 物理化学学报, 2009,25(05): 890-896
11. 蔡开聪 王建平.乙醇醛的分子动态结构[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 677-683
12. 蒋玉仁;秦伟.苯并噻酮衍生物的3D-QSAR分析[J]. 物理化学学报, 2008,24(10): 1859-1863
13. 李晓锋;赵立峰;孙淮.GEMC和GDI方法计算流体气液相平衡的比较[J]. 物理化学学报, 2008,24(10): 1824-1830
14. 张强;杨忠志.水分子团簇分子力场方法的比较研究[J]. 物理化学学报, 2007,23(10): 1565-1571
15. 杨忠志;崔宝秋.血红素近轴侧基氢键的ABEEM/MM分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2007,23(09): 1332-1336
16. 杨光富;刘华银;杨秀凤;杨华铮.1,2,4-三唑并[1, 5-a]嘧啶-2-磺酰胺类除草剂的CoMFA研究[J]. 物理化学学报, 1999,15(02): 190-192
17. 薛英;谢代前;鄢国森.氟磺酸氟振动光谱的从头算[J]. 物理化学学报, 1999,15(02): 138-142
18. 邹霞娟;来鲁华;金桂玉;黄桂琴.新型含噻嗪酮基双酰胺类化合物的3D-QSAR研究[J]. 物理化学学报, 2002,18(06): 513-516
19. 钱萍;杨忠志.应用ABEEM/MM模型研究水分子团簇(H<sub>2</sub>O)<sub>n</sub> (n=11~16)的性质[J]. 物理化学学报, 2006,22

扩展功能

本文信息

Supporting info

[PDF\(507KB\)](#)

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

▶ 力场

▶ 高岭石

▶ 水

▶ 分子动力学

本文作者相关文章

▶ 牛继南

▶ 强颖怀

(05): 561-568

20. 钱力;沈勇;陈锦灿;郑康成 .抗癌性吡啶唑啉生物3D-QSAR研究及其分子设计[J]. 物理化学学报, 2006,22(11): 1372-1376

---

Copyright © 物理化学学报