

## 水溶性聚合物与方解石晶体相互作用的MD模拟

张曙光; 石文艳; 雷武; 夏明珠; 王风云

南京理工大学化学系, 南京 210094

### 摘要:

用分子动力学(MD)方法, 模拟计算了三种水溶性聚合物阻垢剂[聚丙烯酸(PAA)、聚甲基丙烯酸(PMAA)、丙烯酸-丙烯酸甲酯共聚物(AA-MA)]与方解石晶体的作用. 结果表明, 聚合物与方解石两晶面结合能的大小均为 $PAA > AA-MA > PMAA$ , 聚合物与(1 0)面的相互作用远比与(104)面的作用强. 对体系各种相互作用以及对关联函数 $g(r)$ 的分析表明, 结合能主要由库仑作用决定. 与方解石晶面结合的聚合物发生扭曲变形, (1 0)面上的形变能约为(104)面上的2倍, 但均远小于相应的非键作用能. 聚合物中不同位置羧基的动力学行为差别很大, 链端羧基的运动翻转比链中部羧基剧烈得多, 后者与方解石晶体的结合比前者牢固而能更有效地抑制垢晶体生长.

关键词: 分子动力学 水溶性聚合物 方解石 阻垢剂 结合能 对关联函数 形变能

收稿日期 2005-02-25 修回日期 2005-04-11 网络版发布日期 2005-11-15

通讯作者: 王风云 Email: wangfywater@yahoo.com.cn

### 本刊中的类似文章

1. 席海涛; 高亚军; 孙小强; 殷开梁; 陈正隆. 缺电子联吡啶环蕃与富电子苯醚链的结合能[J]. 物理化学学报, 2009, 25(02): 377-381
2. 程兆年; 丁弘; 雷雨; 许立. RbCl溶解的分子动力学模拟研究[J]. 物理化学学报, 1995, 11(10): 890-895
3. 周国荣; 吴佑实; 张川江; 赵芳. 二十面体准晶对非晶形成影响的模拟[J]. 物理化学学报, 2003, 19(01): 13-16
4. 黄世萍; 刘洪霖; 马彦会; 唐波; 陈念贻. ZnCl<sub>2</sub>熔盐的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 1995, 11(01): 71-73
5. 张红宇; 韦钰. Langmuir膜分子动力学模拟中的头基效应[J]. 物理化学学报, 1994, 10(11): 998-1003
6. 黄世萍; 马彦会; 唐波; 徐桦; 陈念贻. NaCl-NaBr系熔盐溶液的分子动力学研究[J]. 物理化学学报, 1994, 10(11): 1045-1048
7. 程兆年; 郝正明; 许立; 陈念贻. 熔融NaCaF<sub>3</sub>、Na<sub>2</sub>CaF<sub>4</sub>和Na<sub>3</sub>CaF<sub>5</sub>的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 1994, 10(08): 676-679
8. 吴晓萍; 刘志平; 汪文川. 分子模拟研究气体在室温离子液体中的溶解度[J]. 物理化学学报, 2005, 21(10): 1138-1142
9. 刘春莉; 李春华; 陈慰祖; 王存新. 用分子模拟方法研究HIV-1整合酶与咖啡酰基类抑制剂的相互作用[J]. 物理化学学报, 2005, 21(11): 1229-1234
10. 黄玉成; 胡应杰; 肖继军; 殷开梁; 肖鹤鸣. TATB基PBX结合能的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2005, 21(04): 425-429
11. 张爱龙; 刘让苏; 梁佳; 郑采星. 冷却速率对液态Ni凝固过程中微观结构演变影响的模拟研究[J]. 物理化学学报, 2005, 21(04): 347-353
12. 张毅; 谷廷坤; 齐元华. 熔体快速冷凝过程的微观结构演化[J]. 物理化学学报, 2005, 21(02): 173-176
13. 秦绪波; 张妍宁; 鲁剑林. 原子尺寸差异与非晶形成能力[J]. 物理化学学报, 2003, 19(12): 1163-1166
14. 白玉林; 陈向荣; 杨向东; 芦鹏飞. 硫团簇S<sub>n</sub> (n=2~8)结构的朗之万分子动力学计算[J]. 物理化学学报, 2003, 19(12): 1102-1107
15. 殷开梁; 徐端钧; 夏庆; 叶雅静; 邬国英; 陈正隆. 正十六烷体系凝固过程的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2004, 20(03): 302-305
16. 于永辉; 李春华; 卢本卓; 陈慰祖; 王存新. 从对接结构中挑选近天然构象的新方法[J]. 物理化学学报, 2003, 19(08): 757-761
17. 刘新; 孟长功; 刘长厚. 金属银在高温速率下的熔化和过热行为[J]. 物理化学学报, 2004, 20(03): 280-284
18. 邵俊; 徐桦; 陆文聪; 陈念贻. 高压Na<sub>2</sub>O-SiO<sub>2</sub>系输运性质反常的分子模拟[J]. 物理化学学报, 2004, 20(03): 237-239
19. 张毅; 张晓茹; 吴爱玲; 管立; 徐昌业. 金属铜升温熔化过程的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2003, 19(08): 709-713
20. 张荣; 谭载友; 郑敦胜; 罗三来; 李浩然. 特殊缔合体系TFE水溶液分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2008, 24

扩展功能

本文信息

PDF(718KB)

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

▶ 分子动力学  
▶ 水溶性聚合物  
▶ 方解石  
▶ 阻垢剂  
▶ 结合能  
▶ 对关联函数  
▶ 形变能

本文作者相关文章

▶ 张曙光  
▶ 石文艳  
▶ 雷武  
▶ 夏明珠  
▶ 王风云

(03): 428-432

21. 耿春宇; 丁丽颖; 韩清珍; 温浩. 气体分子对甲烷水合物稳定性的影响[J]. 物理化学学报, 2008,24(04): 595-600
22. 丁元法; 张跃; 张凡伟; 张大海; 李仲平. 石英玻璃高温分子动力学模拟中的势函数[J]. 物理化学学报, 2008,24(05): 788-792
23. 崔宝秋; 官利东; 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
24. 张军; 赵卫民; 郭文跃; 王勇; 李中谱. 苯并咪唑类缓蚀剂缓蚀性能的理论评价[J]. 物理化学学报, 2008,24(07): 1239-1244
25. 毛荣荣; 吕洋; 周立川; 李钦宁; 李慎敏. 分子动力学模拟纳米尺寸限制体系下氙溶液中I<sub>2</sub>的振动能量弛豫[J]. 物理化学学报, 2008,24(08): 1451-1458
26. 沈秋婵; 梁婉春; 胡兴邦; 李浩然. 甲酰胺水溶液的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2008,24(07): 1169-1174
27. 吴晓敏; 祖元刚; 杨志伟; 付玉杰; 周丽君; 杨刚. 温控分子动力学研究微管蛋白活性肽链的折叠机制[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 773-782
28. 沈新媛; 吕洋; 李慎敏. 人体端粒中(3+1)混合结构G-四链体稳定性的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 783-791
29. 崔巍; 张怀; 计明娟. 新型二氟甲基磷酸类酪氨酸蛋白磷酸酯酶1B抑制剂的分子动力学模拟和结合自由能计算[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 668-676
30. 赵勇山; 郑清川; 张红星; 楚慧郢; 孙家钟. 人类丝氨酸消旋酶的同源模建及其与多肽类抑制剂的分子对接[J]. 物理化学学报, 2009,25(03): 417-422
31. 潘国祥; 倪哲明; 王芳; 王建国; 李小年. 二氟尼柳/水滑石插层组装结构、氢键及水合特性的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2009,25(02): 223-228
32. 陈聪; 李维仲. 甘油水溶液氢键特性的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2009,25(03): 507-512
33. 骆兆文; 邓巧临; 来鲁华; 徐筱杰; 唐有祺. 磷脂酶A<sub>2</sub>及其复合物的分子动力学研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(07): 622-626
34. 刘让苏; 周群益; 李基永. 液态金属结构变化的分子动力学模拟研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(08): 755-757
35. 顾健德; 田安民; 鄢国森. N<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>水溶液光谱的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 1995,11(08): 719-723
36. 王俊梅; 胡照林; 叶学其. 亮氨酸脑啡肽构象的分子动力学方法研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(08): 673-677
37. 周震; 言天英; 高学平. 储能材料的模拟与设计[J]. 物理化学学报, 2006,22(09): 1168-1174
38. 张妍宁; 王丽; 边秀房. 中介尺度Au纳米团簇熔化的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2003,19(01): 35-39
39. 秦星; 张秉坚; 张晖; 胡文暄. 硅酸盐岩石微孔中流体混合物扩散系数的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2005,21(03): 315-318
40. 吴晓萍; 刘志平. 室温离子液体[bmim][BF<sub>4</sub>]和水混合物的计算机模拟研究[J]. 物理化学学报, 2005,21(09): 1036-1041
41. 方美娟; 骆书娜; 王河清; 刘万云; 赵玉芬. 磷酸化对丙氨酸与溶菌酶相互作用的影响[J]. 物理化学学报, 2005,21(09): 1042-1045
42. 刘迎春; 王琦; 吕玲红; 章连众. 疏水性微孔中水的结构和扩散性质的分子模拟[J]. 物理化学学报, 2005,21(01): 63-68
43. 解辉; 刘朝; 刘彬武. 纳米通道内混合气体流动的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2009,25(05): 994-998
44. 孙浩; 蒋勇军; 俞庆森; 邹建卫. 分子动力学模拟方法研究结构水在糖原合成酶激酶-3β中的作用[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 635-639
45. 牛继南; 强颖怀. 高岭石-水体系中水分子结构的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2009,25(06): 1167-1172
46. 宋其圣; 郭新利; 苑世领; 刘成卜. 十二烷基苯磺酸钠在SiO<sub>2</sub>表面聚集的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2009,25(06): 1053-1058
47. 付一政; 刘亚青; 兰艳花. 端羟基聚丁二烯/增塑剂共混物相容性的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2009,25(07): 1267-1272
48. 陶长贵; 冯海军; 周健; 吕玲红; 陆小华. 氧气在聚丙烯内吸附和扩散的分子模拟[J]. 物理化学学报, 2009,25(07): 1373-1378
49. 赵健伟; 刘洪梅; 倪文彬; 郭彦; 尹星. 从分子水平研究电子传递[J]. 物理化学学报, 2009,25(07): 1472-1480
50. 李向富; 陈宏善; 孟凡顺; 刘百幸. (AgI)<sub>n</sub>团簇熔化行为的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 103-106
51. 李振泉; 郭新利; 王红艳; 李青华; 苑世领; 徐桂英; 刘成卜. 阴离子表面活性剂在油水界面聚集的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 6-12
52. 万丽华; 颜克凤; 李小森; 樊栓狮. 热力学抑制剂作用下甲烷水合物分解过程的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2009,25(03): 486-494
53. 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
54. 李军; 冯杰; 李文英; 常海洲; 谢克昌. 强弱还原煤聚集态对其可溶性影响的分子力学和分子动力学分析[J]. 物理化学学报, 2008,24(12): 2297-2303
55. 陈莹; 王秀英; 赵俊卿. 小尺寸金属团簇熔化过程的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 2042-2046

56. 杨振; 杨晓宁; 徐志军. 金纳米颗粒周围水的结构和动力学性质的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 2047-2052
57. 胡建平; 柯国涛; 常珊; 陈慰祖; 王存新. HIV-1病毒DNA与整合酶结合后的构象变化[J]. 物理化学学报, 2008,24(10): 1803-1810
58. 付一政; 刘亚青; 梅林玉; 兰艳花. HTPB与AI不同晶面结合能和力学性能的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2009,25(01): 187-190
59. 杨晓峰; 秦张峰; 王建国. 分子在纯硅 $\beta$ 分子筛内扩散的随机行走模型[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 2128-2132
60. 侯吉旋 司黎明. 流体系统模拟中邻区列表算法的优化理论[J]. 物理化学学报, 2009,25(03): 430-434
61. 李姝; 刘磊; 曹臻; 汪继强; 言天英. 室温熔盐二(三氟甲基磺酸酐)亚胺锂-尿素体系的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2007,23(07): 983-986
62. 延辉; 苑世领; 刘成卜. 烯烃分子在氢终止Si(100)-2 $\times$ 1表面的自由基链反应[J]. 物理化学学报, 2008,24(01): 8-12
63. 袁剑辉; 程玉民. 接枝羧基对单壁碳纳米管弹性性质的影响[J]. 物理化学学报, 2007,23(06): 889-894
64. 彭传校; 王丽; 张妍宁. 应变率诱发镍纳米丝的非晶化[J]. 物理化学学报, 2007,23(04): 517-520
65. 丛红日; 边秀房; 李辉; 王丽. 液态Al<sub>80</sub>Fe<sub>20</sub>合金的中程有序结构[J]. 物理化学学报, 2002,18(01): 39-44
66. 徐桦; 邵俊. 氟代硼酸锂玻璃的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2002,18(01): 10-13
67. 王丽; 衣粟; 边秀房. Ni<sub>3</sub>Al合金液态与非晶中的原子团簇 [J]. 物理化学学报, 2002,18(04): 297-301
68. 侯廷军; 安钰; 茹炳根; 徐筱杰. 三种金属硫蛋白动力学稳定性的理论研究[J]. 物理化学学报, 2000,16(03): 221-225
69. 周健; 朱宇; 汪文川; 陆小华; 王延儒; 时钧. 超临界NaCl水溶液的分子动力学模拟 [J]. 物理化学学报, 2002,18(03): 207-212
70. 朱小蕾; 周志华; 卢文庆; 黄锦凡; 彭盘英. 由CBr<sub>4</sub>分子动力学研究观察到的可能的新的新相[J]. 物理化学学报, 1997,13(09): 815-821
71. 叶雅静; 张立同; 成来飞; 徐永东. 分子动力学模拟无定形BCN体系结构特征[J]. 物理化学学报, 2006,22(07): 878-882
72. 王丽; 边秀房; 李辉. 金属Cu液固转变及晶体生长的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2000,16(09): 825-829
73. 侯怀宇; 陈国良; 陈光. 金属Ni熔化前后结构变化的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2006,22(07): 771-776
74. 侯廷军; 朱丽荔; 徐筱杰; 计明娟; 叶学其. MCM-22型分子筛中苯分子吸附行为的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2000,16(08): 701-707
75. 徐桦; 邵俊. 正磷酸铝高压下相变的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2000,16(06): 512-516
76. 计明娟; 叶学其; 杨鹏程. 甲硫氨酸-脑啡肽的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 1999,15(11): 1011-1016
77. 周健; 陆小华; 王延儒; 时钧. 超临界水的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 1999,15(11): 1017-1022
78. 李辉; 边秀房; 李玉忱; 刘洪波; 陈魁英. 贵金属Au的液态结构分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 1998,14(07): 630-634
79. 张晖; 张秉坚; 梁世强; 路映红; 胡文暄. 微孔中简单流体粘度的分子动力学模拟及关联模型[J]. 物理化学学报, 2003,19(04): 352-355
80. 刘新; 孟长功; 刘长厚. 升温速率对金属铅的熔化和过热行为的影响[J]. 物理化学学报, 2003,19(08): 681-685
81. 丛红日; 边秀房; 李喜珍; 李辉. 液态Al<sub>80</sub>Fe<sub>20</sub>在快速冷却中的MD模拟 [J]. 物理化学学报, 2002,18(05): 414-419
82. 雷雨; 程兆年; 唐鼎元. 分子动力学模拟研究 $\beta$ -BAB<sub>2</sub>O<sub>4</sub>熔体的结构[J]. 物理化学学报, 1996,12(06): 481-484
83. 程兆年; 郑正明; 张静; 陈念贻. 熔融CaF<sub>2</sub>的径向分布函数[J]. 物理化学学报, 1993,9(04): 438-441
84. 王海龙; 王秀喜; 王宇; 梁海弋. 金属Cu低指数表面熔化行为的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2006,22(11): 1367-1371
85. 程兆年; 张静; 郑正明; 陈年贻. 超离子导体CaF<sub>2</sub>中的Ca<sup>2+</sup>亚晶格和F<sup>-</sup>亚晶格[J]. 物理化学学报, 1991,7(04): 390-393
86. 邵俊; 汤正谔. LiCl急冷玻璃形成过程中局部结构的分子动力学模拟——基于周期性边界条件的Voronoi多面体计算[J]. 物理化学学报, 1991,7(05): 571-576
87. 那平; 张帆; 李艳妮. 水化Na-蒙脱石和Na/Mg-蒙脱石的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2006,22(09): 1137-1142
88. 吕雯; 吕炜; 牛彦; 雷小平. 毒蕈碱型M<sub>1</sub>受体的同源模建和分子对接[J]. 物理化学学报, 2009,25(07): 1259-1266