

特殊缔合体系TFE水溶液分子动力学模拟

张荣; 谭载友; 郑敦胜; 罗三来; 李浩然

广东药学院药科学院, 物理化学教研室, 广州 510006; 浙江大学化学系, 杭州 310027

摘要:

三氟乙醇(TFE)水溶液是一类特殊的缔合体系. 采用分子动力学模拟方法结合核磁共振化学位移研究了TFE水溶液体系全浓度范围的氢键网络, 并对动力学模拟结果和核磁共振化学位移进行了比较. 从径向分布函数(RDF)发现, TFE水溶液中存在着强氢键, 而体系中的C—H...O弱相互作用较为明显, 也不能忽略. 氢键网络分析发现TFE水溶液体系的氢键大致分为以下三个区域: 在水富集区域, 水分子倾向于自身缔合形成稳定的簇结构, 随着TFE浓度的增加, 水的有序结构受到破坏, 水分子和TFE分子发生交叉缔合作用形成氢键; 在TFE富集区域, 水分子较少, TFE分子自身通过氢键形成多缔体结构. 此外, 分子动力学统计的平均氢键数的变化和文献报导的核磁共振化学位移变化趋势相同, 实验和理论的结果吻合较好.

关键词: TFE水溶液 分子动力学模拟 核磁共振化学位移 氢键网络

收稿日期 2007-09-10 修回日期 2007-11-17 网络版发布日期 2008-01-22

通讯作者: 张荣 Email: zhangr@china.com.cn

本刊中的类似文章

Copyright © 物理化学学报

扩展功能

本文信息

PDF(429KB)

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

▶ TFE水溶液

▶ 分子动力学模拟

▶ 核磁共振化学位移

▶ 氢键网络

本文作者相关文章

▶ 张荣

▶ 谭载友

▶ 郑敦胜

▶ 罗三来

▶ 李浩然