

甘油水溶液氢键特性的分子动力学模拟

陈聪 李维仲

大连理工大学, 海洋能源利用与节能教育部重点实验室, 辽宁 大连 116024

摘要:

为了研究低温保护剂溶液的结构和物理化学特性, 以甘油为保护剂, 采用分子动力学方法, 对不同浓度的甘油和水的二元体系进行了模拟. 得到了不同浓度的甘油水溶液在2 ns内的分子动力学运动轨迹, 通过对后1 ns内运动轨迹的分析, 得到了各个原子对的径向分布函数和甘油分子的构型分布. 根据氢键的图形定义, 分析了氢键的结构和动力学特性. 计算了不同浓度下体系中平均每个原子(O和H)和分子(甘油和水)参与氢键个数的百分比分布及其平均值. 同时还计算了所有氢键、水分子之间的氢键以及甘油与水分子之间的氢键的生存周期.

关键词: 分子动力学模拟 径向分布函数 低温保护剂 水溶液

收稿日期 2008-09-23 修回日期 2008-11-06 网络版发布日期 2008-12-08

通讯作者: 陈聪 Email: chencongboy2008@yahoo.com.cn

本刊中的类似文章

1. 程兆年, 丁弘, 雷雨, 许立. RbCl熔解的分子动力学模拟研究[J]. 物理化学学报, 1995, 11(10): 890-895
2. 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
3. 黄世萍, 刘洪霖, 马彦会, 唐波, 陈念贻. ZnCl₂熔盐的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 1995, 11(01): 71-73
4. 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
5. 程兆年; 郝正明; 许立; 陈念贻. 熔融NaCaF₃、Na₂CaF₄和Na₃CaF₅的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 1994, 10(08): 676-679
6. 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
7. 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
8. 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
9. 张弢; 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
10. 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
11. 殷开梁; 徐端钧; 夏庆; 叶雅静; 郭国英; 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
12. 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
13. 邵俊; 徐桦; 陆文聪; 陈念贻. 高压Na₂O-SiO₂系输运性质反常的分子模拟[J]. 物理化学学报, 2004, 20(03): 237-239
14. 张弢; 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
15. 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(03): 428-432
16. 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
17. 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
18. 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

扩展功能

本文信息

PDF(219KB)

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

▶ 分子动力学模拟

▶ 径向分布函数

▶ 低温保护剂

▶ 水溶液

本文作者相关文章

▶ 陈聪

▶ 李维仲

19. 沈新媛 吕洋 李慎敏. 人体微粒中(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
20. 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
21. 赵勇山 郑清川 张红星 楚慧鄂 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
22. 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
23. 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
24. 顾健德,田安民,鄢国森. N_2, O_2 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
25. 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
26. 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
27. 吴晓萍;刘志平. 室温离子液体[bmim][BF₄]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
28. 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
29. 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
30. 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-3 β 中的作用[J]. 物理化学学报, 2009,25(04): 635-639
31. 宋其圣, 郭新利, 苑世领, 刘成卜. 十二烷基苯磺酸钠在SiO₂表面聚集的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 2009,25(06): 1053-1058
32. 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
33. 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
34. 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
35. 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
36. 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
37. 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
38. 付一政;刘亚青;梅林玉;兰艳花. HTPB与Al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
39. 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
40. 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
41. 丛红日;边秀房;李辉;王丽. 液态Al₈₀Fe₂₀合金的中程有序结构[J]. 物理化学学报, 2002,18(01): 39-44
42. 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
43. 王丽;衣粟;边秀房. Ni₃Al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
44. 朱小蕾;周志华;卢文庆;黄锦凡;彭盘英. 由CBr₄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
45. 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
46. 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
47. 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
48. 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
49. 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
50. 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
51. 雷雨;程兆年;唐鼎元. 分子动力学模拟研究 β -BAB₂O₄熔体的结构[J]. 物理化学学报, 1996,12(06): 481-484

52. 程兆年; 郑正明; 张静; 陈念贻. 熔融 CaF_2 的径向分布函数[J]. 物理化学学报, 1993,9(04): 438-441
53. 程兆年; 张静; 郑正明; 陈年贻. 超离子导体 CaF_2 中的 Ca^{2+} 亚晶格和 F^- 亚晶格[J]. 物理化学学报, 1991,7(04): 390-393
54. 邵俊; 汤正途. 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
55. 高廷红, 刘让苏, 周丽丽, 田泽安, 谢泉. 液态 Ca_7Mg_3 合金快速凝固过程中团簇结构的形成特性[J]. 物理化学学报, 2009,25(10): 2093-2100
-