

量子化学及计算化学

烷基芳基磺酸盐的分子动力学模拟与自由能微扰计算

丁伟, 刘国宇, 于涛, 曲广淼, 程杰成, 吴军政

大庆石油学院化学化工学院, 黑龙江 大庆 163318; 大庆油田有限责任公司科技发展部, 黑龙江 大庆 163453

摘要:

为研究不同结构的表面活性剂分子在溶液中胶束化能力的差异, 采用分子动力学方法模拟三种烷基芳基磺酸盐在真空和水溶液环境下的结构与相互作用. 利用自由能微扰(FEP)方法计算了水合自由能, 发现与用传统热力学表面张力法测定自制的烷基芳基磺酸盐结果一致. 研究表明: 烷基芳基磺酸盐在水溶液中的胶束化过程是自发进行的, 随着分子结构中芳环向长烷基链中间位置移动, 胶束化能力和胶束稳定性均下降; 疏水基周围水分子的“冰山结构”会影响胶束的稳定性, 而水分子中氢键的生存周期是反映冰山结构变化的重要指标; 同时, 亲水基与水分子间形成氢键的数目会增强或减弱分子脱离胶束体的趋势, 从而影响胶束结构的稳定性.

关键词: 分子动力学模拟 烷基芳基磺酸盐 胶束化 水合自由能

收稿日期 2009-09-28 修回日期 2009-12-30 网络版发布日期 2010-01-19

通讯作者: 丁伟 Email: dingwei40@126.com

本刊中的类似文章

1. 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
2. 于亚明; 王中华; 高保娇; 王蕊欣. 表面活性单体NaAMC14S的胶束化行为对共聚合过程的影响[J]. 物理化学学报, 2006, 22(04): 496-501
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. ZnCl₂ 熔盐的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 1995, 11(01): 71-73
5. 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
6. 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
7. 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
8. 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
9. 王海鹰, 柴立元, 吕春绪. 聚(2-丙烯酰胺甲基-6-十二烷基硼酸二乙醇胺酯)与十二烷基苯磺酸钠混合溶液的表面活性[J]. 物理化学学报, 2010, 26(01): 73-78
10. 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
11. 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
12. 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
13. 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
14. 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
15. 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
16. 侯廷军; 章威; 黄钦; 乔学斌; 徐筱杰. 基于原子表面的蛋白质水合自由能预测模型[J]. 物理化学学报, 2003, 19(08): 723-726
17. 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
18. 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

扩展功能

本文信息

PDF(1915KB)

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

▶ 烷基芳基磺酸盐

▶ 胶束化

▶ 水合自由能

本文作者相关文章

▶ 丁伟

▶ 刘国宇

▶ 于涛

▶ 曲广淼

▶ 程杰成

▶ 吴军政

19. 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
20. 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
21. 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
22. 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
23. 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
24. 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
25. 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
26. 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
27. 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
28. 顾健德,田安民,鄢国森.N₂,O₂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
29. 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
30. 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
31. 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
32. 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
33. 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
34. 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
35. 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
36. 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
37. 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
38. 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
39. 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
40. 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
41. 胡建平;柯国涛;常珊;陈恩祖;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
42. 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
43. 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
44. 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
45. 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
46. 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
47. 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
48. 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
49. 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
50. 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

51. 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
52. 计新娟;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
53. 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
54. 章威;侯廷军;乔学斌;徐筱杰.一组和AMBER力场配合的普适波恩模型参数[J]. 物理化学学报, 2003,19(04): 289-292
55. 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
56. 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
57. 程兆年;郑正明;张静;陈念贻.熔融CaF₂的径向分布函数[J]. 物理化学学报, 1993,9(04): 438-441
58. 程兆年;张静;郑正明;陈年贻.超离子导体CaF₂中的Ca²⁺亚晶格和F⁻亚晶格[J]. 物理化学学报, 1991,7(04): 390-393
59. 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
60. 高廷红, 刘让苏, 周丽丽, 田泽安, 谢泉.液态Ca₇Mg₃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
61. 于涛, 李钟, 丁伟, 罗石琼, 栾和鑫, 童维, 曲广淼, 程杰成.十四烷基芳基磺酸盐形成的分子有序组合体[J]. 物理化学学报, 2010,26(02): 317-323
62. 于涛, 李钟, 丁伟, 罗石琼, 栾和鑫, 童维, 曲广淼, 李安军, 程杰成.系列烷基芳基磺酸盐在水溶液中胶束化的焓-熵补偿现象[J]. 物理化学学报, 2010,26(03): 638-642