

论文

苯并三氮唑及其衍生物与氧化亚铜晶体相互作用的MD模拟

张曙光;陈瑜;王风云;雷武;夏明珠

山东理工大学化工学院

摘要:

用分子动力学(MD)方法,模拟计算了4种铜缓蚀剂[苯并三氮唑(BTA)、5-羧甲基苯并三氮唑(CBTAH-ME)、5-羧丁基苯并三氮唑(CBTAH-BU)、5-羧辛基苯并三氮唑(CBTAH-OC)]与Cu2O晶体的相互作用。结果发现,缓蚀剂分子与Cu2O晶体的结合能排序为CBTAH-OC>CBTAH-BU>CBTAH-ME>BTA。对体系各种相互作用以及对关联函数g(r)的分析表明,体系结合能主要来自库仑作用的贡献。在与Cu2O(001)晶面结合过程中,BTA及其衍生物分子发生了扭曲变形,且分子中的N原子与Cu2O晶体中的Cu原子之间形成了配位键。

关键词: 分子动力学 苯并三氮唑及其衍生物 氧化亚铜

Molecular Dynamics Simulation of Interaction between Cuprous Oxide Crystal and Benzotriazole Derivatives

;;;

山东理工大学化工学院

Abstract:

The interactions between corrosion inhibitors, i.e. benzotriazole (BTA), methyl of carboxybenzotriazole (CBTAH-ME), butyl of carboxybenzotriazole (CBTAH-BU), octyl of carboxybenzotriazole (CBTAH-OC) and Cu2O crystal have been simulated by molecular dynamics (MD). Results show that the order of binding energies of corrosion inhibitors with Cu2O crystal is as follows: CBTAH-OC>CBTAH-BU>CBTAH-ME>BTA. The analysis of various interactions and pair correlation functions of all systems indicates that binding energies are mainly determined by coulomb interaction. Benzotriazole and its derivatives are deformed during their combining with the (001) face of Cu2O crystal, and coordination bonds are formed between the copper atoms in Cu2O crystal and the nitrogen atoms in corrosion inhibitors.

Keywords: molecular dynamics benzotriazole and its derivatives cuprous oxide corrosion inhibitors binding ener

收稿日期 2007-01-22 修回日期 2007-05-14 网络版发布日期 2007-12-25

DOI:

基金项目:

通讯作者: 张曙光

作者简介:

本刊中的类似文章

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF(337KB)

[HTML全文](1KB)

参考文献[PDF]

参考文献

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

▶ 苯并三氮唑及其衍生物

▶ 氧化亚铜

本文作者相关文章

▶ 张曙光

▶ 陈瑜

▶ 王风云

▶ 雷武

▶ 夏明珠