شبیه سازی دینامیک مولکولی اثر آب بر دینامیک مایع یونی کولینیوم گلایسینات

خرمی، فرزاد؛ کوثری، محمدحسین

گروه شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه
گاوازنگ، زنجان

مقدمه

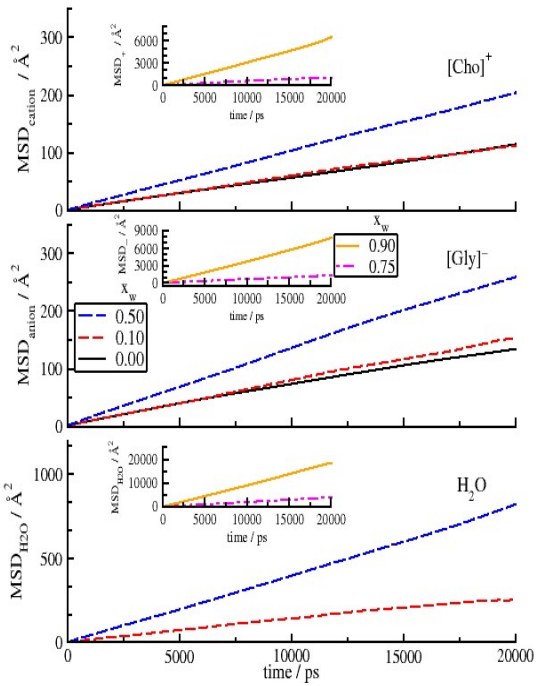
بیشتر مایعات یونی می توانند مقدار قابل توجهی آب را از اتمسفر جذب کنند. البته آب همیشه به عنوان ناخالصی مزاحم همراه با مایع یونی به شمار نمی رود. از نقطه نظر کاربردی، مخلوط نمودن مایع یونی با مقادیر دلخواه آب روشی موثر و آسان برای کنترل و تنظیم خواص مایع یونی است که می تواند هم گرانروی و هم هزینه استفاده از مایع یونی در فرایندها را کاهش دهد. بنابراین در این مقاله با استفاده از روش شبیه سازی دینامیک مولکولی، به مطالعه ی خواص دینامیکی مایع یونی کولینیوم گلایسینات و مخلوط دوتایی آن با آب در کسرهای مولی مختلف پرداخته شده است تا به جزییات نقش غلظت آب در تنظیم رفتار دینامیکی مایع یونی و افزایش سیالیت آن پی برده شود.

روش

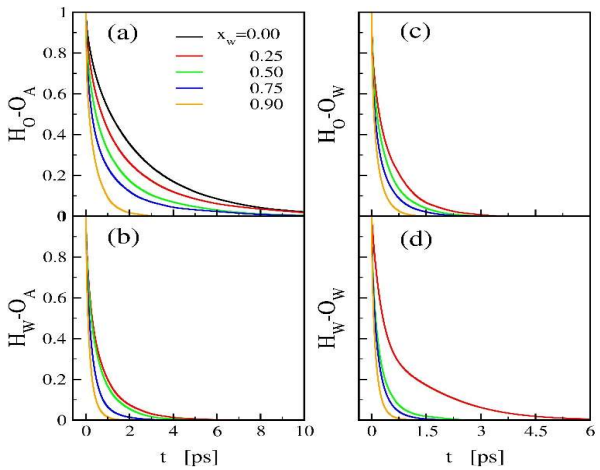
در این مطالعه از روش شبیه‌سازی دینامیک مولکولی مبتنی بر حل عددی معادلات حرکت نیوتونی، استفاده شده است. اولین گام در شبیه سازی مولکولی انتخاب ساختار مولکولی و مدل پتانسیل برهمکنش است که بتواند به بهترین شکل، سامانه مورد نظر را شبیه سازی کند. برای تهیه ساختار اولیه از نرم افزار مولدن و پکمول استفاده شد. شبیه سازی با حدود۱۰۰–۲۸۰ جفت مایع یونی و ضریب کاهش بار ۰/۸ با نرم افزار DL_POLY-classic و در فشار،گام زمانی و شعاع قطع به ترتیب ۱ اتمسفر ، ۱ فمتوثانیه و ۱۵ آنگستروم در دمای ۳۵۳ کلوین انجام شد. در این شبیه‌سازی برای مایع یونی از میدان نیروی توسعه یافته توسط هررا و همکاران[۱] استفاده شد و مدل SPC/E برای مولکولهای آب استفاده گردید. برای هر کسر مولی شبیه سازی ها در مجموعه NPT از دمای ۵۵۰ کلوین آغاز و با کاهش مرحله ای تا ۳۵۳ کلوین انجام شدند تا سامانه به تعادل رسانده شود. سپس برای آنالیز داده‌ها و محاسبه کمیت های مورد نظر، برای هر یک از سامانه های به تعادل رسیده، شبیه سازی برای ایجاد فایل مسیر با مدت زمان ns ۲۰ انجام گرفت. از نرم افزار ترویس برای آنالیز فایل مسیر تحول سامانه استفاده شد.

نتایج

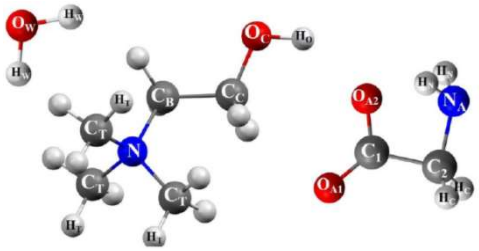
هدف اصلی از این شبیه‌سازی‌ها، مطالعه‌ی جزییات رفتار دینامیکی گونه‌ها در کسر مولی‌های مختلف آب با محاسبه کمیت‌هایی مانند میانگین مربع جابجایی (MSD)، تابع خود همبستگی سرعتی (VACF)، ضرایب انتقالی و توابع همبستگی زمانی مرتبط با پیوند هیدروژنی بود.



شکل (۱) روند تغییرات میانگین مربع جابجایی (MSD) برای مراکز جرم گونه‌ها با افزایش کسر مولی آب که نشان دهنده‌ی افزایش سیالیت سامانه با افزایش کسر مولی آب است.



شکل (۲) روند تغییرات تابع خودهمبستگی زمانی پیوسته برای پیوند هیدروژنی (a) کاتیون-آنیون، (b) آنیون-آب (c) کاتیون-آب و (d) آب-آب در کسرهای مولی مختلف



شکل (۳) ساختار کلی آنیون گلایسینات، کاتیون کولینیوم و مولکول آب

تحلیل نتایج

مطالعات شبیه سازی نشان داد ترتیب اندازه‌ی میانگین مربع جابجایی (MSD) به صورت $[H_2O] > [Gly]^- > [Cho]^+$ برای مراکز جرم گونه‌ها است و با افزایش کسر مولی آب بواسطه افزایش دینامیک سامانه، مقدار MSD برای هر سه گونه افزایش می‌یابد. خلاصه نتایج MSD محاسبه شده در شکل (۱) نشان داده شده است. به تازگی بررسی‌های ساختاری انجام شده نشان داده است که بین گروه کربوکسیل آنیون و هیدروکسیل کاتیون و همچنین بین گروه کربوکسیل آنیون و هیدروژن‌های گروه‌های متیل کاتیون، پیوند هیدروژنی وجود دارد و با احتمال کمتر امکان تشکیل پیوند هیدروژنی بین گروه کربوکسیل و هیدروژن‌های کربن مرکزی دو گلایسینات مجاور وجود دارد [۲]. قید زاویه‌ای از روی توابع توزیع ساختاری و قید فاصله‌ای بصورت مجموع شعاع واندروالسی هیدروژن و اتم پذیرنده بعلاوه ۰/۵ آنگستروم در نظر گرفته می‌شود [۳] که معمولاً توافق خوبی با اولین کمینه تابع توزیع شعاعی هیدرژن و اتم پذیرنده پیوند هیدروژنی دارد. دینامیک پیوند هیدروژنی توسط تابع همبستگی زمانی پیوسته بررسی گردید که نتایج حاصل نشان دهنده کاهش مقدار زمان آسایش تشکیل پیوند هیدروژنی با افزایش کسر مولی آب بود. شکل(۲) روند تغییرات تابع خودهمبستگی زمانی پیوسته برای پیوند هیدروژنی های موجود در سامانه، در کسرهای مولی مختلف را نشان می دهد.

مرجع‌ها

[1] C. Herrera; R. Alcalde; M. Atilhan and S. Aparicio; *J. Phys. Chem. C*, **118**, (2014) 9741-9757.

[2] F. Khorrami and M. H. Kowsari; *J. Phys. Chem. B* **124**, (2020) 3770-3783.

[3] S. J. Grabowski, (Ed.); *"Hydrogen Bonding-New Insights"*; Springer Netherlands: 2006.