

Pomocí simulací molekulové dynamiky bylo studováno rozložení vybraných aromatických molekul, jmenovitě benzoové kyseliny a neutrální a zwitterionové formy L-fenylalaninu, ve třech systémech modelujících povrch kapaliny: a) vrstva vodného roztoku organických molekul, b) monovrstva palmitové kyseliny v kondenzovaném kapalném stavu na vodném roztoku organických molekul a c) monovrstva palmitové kyseliny ve stavu koexistence mezi kondenzovanou kapalnou fází a plynnou fází na vodném roztoku organických molekul. Pro všechny studované aromatické molekuly byla potvrzena povrchová aktivita a tendence k agregaci zejména na rozhraní voda-vzduch a voda-palmitová kyselina. Výsledky simulace provedené pro monovrstvu palmitové kyseliny na vodném roztoku benzoové kyseliny byly porovnány s publikovanými výsledky podobných simulací s jinou parametrizací. Srovnání ukázalo, že chování aromatických molekul na rozhraní voda-monovrstva mastné kyseliny silně závisí na použitém modelu. Strukturní vlastnosti Langmuirovy monovrstvy palmitové kyseliny byly vyhodnoceny na základě distribucí úhlu náklonu uhlovodíkových řetězců a analýzy dihedrálních uhlů v oblasti hlaviček palmitové kyseliny v závislosti na povrchové hustotě filmu a adsorbovaných aromatických molekulách. Simulace napodobující izotermální stlačování smíšené monovrstvy v Langmuirově cele měla za následek vytvoření vysoce uspořádaného klastru L-fenylalaninu v póru uvnitř monovrstvy. Provedené simulace poskytly informace na molekulární úrovni relevantní pro nedávno publikované experimentální studie smíšených aromatických-alifatických povrchových filmů.