

聚(*N,N*-二烯丙基-*N*-丁氧羰甲基氯化铵)的合成及其杀菌性能

刘立华* 肖体乐 陈金文 赵艳敏 刘俊峰

(湖南科技大学化学化工学院,理论化学与分子模拟省部共建教育部重点实验室,
分子构效关系湖南省普通高等学校重点实验室 湘潭 411201)

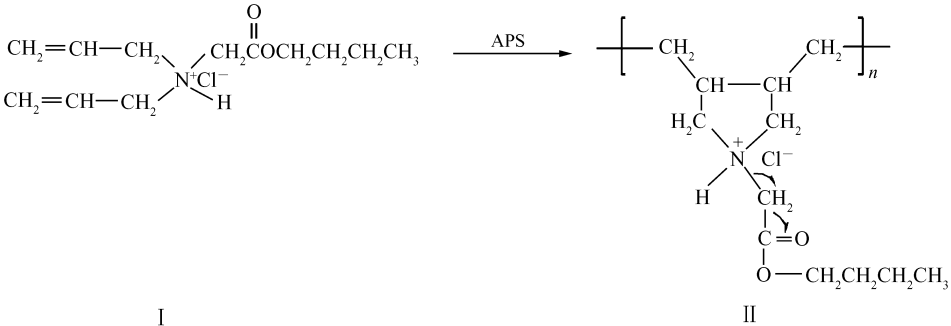
摘 要 以 *N,N*-二烯丙基-*N*-丁氧羰甲基氯化铵(DACBMAC)为单体,过硫酸铵为引发剂,采用水溶液聚合合成了聚(*N,N*-二烯丙基-*N*-丁氧羰甲基氯化铵)(PDACBMAC),用 FT-IR 和 ^1H NMR 测试技术对其结构进行了表征,并研究了其对大肠杆菌的杀菌性能和抗菌机理。结果表明,PDACBMAC 对大肠杆菌的杀菌能力明显高于聚二甲基二烯丙基氯化铵(PDMAAC),在剂量低于 20 mg/L 时,其杀菌能力稍高于十二烷基二甲基苄基氯化铵(DDBAC);其对大肠杆菌的杀菌率随特性粘数的增加而增加,当特性粘数为 1.371 dL/g,剂量为 30 mg/L 时,杀菌率可达 99.7%;其杀菌效果明显受 pH 值影响,在 pH 值为 4.7~6.7 时,杀菌率随 pH 值升高而增加,pH>6.7 时,其杀菌率随 pH 值升高而降低。浊度测定结果表明,PDACBMAC 具有优良的絮凝除浊能力。 β -半乳糖苷酶活性测定结果表明,PDACBMAC 的抗菌机理是基于杀菌作用。

关键词 聚(*N,N*-二烯丙基-*N*-丁氧羰甲基氯化铵),杀菌性能,抗菌机理,大肠杆菌

中图分类号:O632.6 文献标识码:A 文章编号:1000-0518(2010)08-0887-06
DOI:10.3724/SP.J.1095.2010.90684

将杀菌功能基团(如季铵离子基团)键合到高分子链上制成高分子杀菌剂,用其处理含菌水,既能强化对带负电细菌的吸附和杀灭作用,与细菌间的电中和又可使高分子链蜷曲而产生絮凝作用,使吸附的细菌转入絮体集中杀灭,同时杀菌剂也可进入絮体而得到分离。因此,这种高分子杀菌剂不仅能使杀菌和絮凝协同作用,而且还可克服小分子杀菌剂的残留以及对污泥、菌垢的剥离和洗涤差等问题,正引起广泛的关注^[1-4]。聚二甲基二烯丙基氯化铵(PDMAAC)是一种季铵盐型多功能水溶性高分子,对细菌、真菌和藻类等具有抑制和杀灭作用^[5-7]。虽然 PDMAAC 上有密集的正电荷,对细菌有较强的吸附能力,但其单体单元的吡咯五员环结构以及大分子链增加了扩散穿透细胞壁的阻力,同时季铵氮所连的甲基对改变微生物细胞壁的通透性或穿过细胞脂质膜深入细胞内影响细胞正常生理活动的作用不强^[8,9],因此,目前鲜有将 PDMAAC 作为杀菌剂使用的实例。

本文将 PDMAAC 中季铵氮所连的甲基改为丁氧羰甲基,以增强高分子与微生物细胞的作用,提高对微生物细胞的杀灭作用。采用前文^[9]合成的单体 *N,N*-二烯丙基-*N*-丁氧羰甲基氯化铵(DACBMAC, Scheme 1 I),以过硫酸铵为引发剂,通过水溶液聚合合成了聚(*N,N*-二烯丙基-*N*-丁氧羰甲基氯化铵)



Scheme 1 Synthetic route to PDACBMAC

(PDACBMAC, Scheme 1 II), 研究了其对大肠杆菌的杀菌性能, 通过细菌的 β -半乳糖苷酶的活性测定, 初步探讨了其抗菌机理。

1 实验部分

1.1 试剂和仪器

N,N-二烯丙基-*N*-丁氧羰甲基氯化铵(DACBMAC)(自制^[9]); 甲醇、丙酮、过硫酸铵(APS)、氟化钾、EDTA和盐酸等均为分析纯试剂。大肠杆菌(湖南科技大学生命科学学院); 营养肉汤(江苏省疾病预防控制中心微生物试剂厂); 营养琼脂(杭州微生物试剂有限公司); 邻硝基苯酚 β -*D*-半乳糖苷(ONPG)(美国Aldrich); 十二烷基二甲基苄基氯化铵(DDBAC); 聚二甲基二烯丙基氯化铵(PDMAAC); 磷酸盐缓冲液(PBS), 自行配制(pH=6.86)。实验用水为去离子水。

76-1A型恒温玻璃水浴; D-2型无级恒速搅拌器; DZF-3型真空干燥箱; HJ-6型六联磁力搅拌器; LDZX-40SCI型不锈钢立式压力灭菌器; CJ-2S型洁净工作台; LRH-250-A型生化培养箱; XK97-A型菌落计数器; WZS-185型高浊度仪; PHS-2F型pH计; ZDJ-4A型自动电位滴定仪; 1229-HPCE型毛细管电泳仪; 乌氏粘度计, 毛细管内径 φ 为0.55~0.65, 测定温度为30℃, 样品溶解于1.0 mol/L的NaCl溶液中, 浓度为0.5 g/L; Lambda-35型紫外可见分光光度计(美国Perkin Elmer公司); Spectrum One(B)型FTIR红外光谱仪(美国Perkin Elmer公司), KBr压片; AVANCE II型超导核磁共振波谱仪(德国Bruker公司), 500 MHz, D_2O 为溶剂。

1.2 PDACBMAC的合成

取10 g DACBMAC用去离子水配成一定浓度的溶液, 加入到100 mL带机械搅拌、 N_2 气入口和恒压滴液漏斗的三颈瓶中, 再加入单体质量0.1%的EDTA和0.15%的KF, 溶解后通 N_2 气30 min, 置于一定温度的恒温水浴中, 在30 min内缓慢滴加APS总量的75%, 在 N_2 气气氛反应一段时间, 然后再加入余下的APS溶液, 继续反应一段时间。用甲醇稀释, 然后滴入无水丙酮中沉析, 反复4次后置于真空干燥箱中于60℃干燥至恒重, 得淡黄色吸湿性粉末即产物PDACBMAC。合成路线见Scheme 1。采用电位滴定法测定PDACBMAC的 pK_a ^[10]。

1.3 杀菌实验

按细菌繁殖体悬液的制备方法^[11], 将冻干大肠杆菌(*E. Coli*)活化, 取第3代接种于液体培养基上, 在30℃摇床上培养24 h, 得细菌总数约为 10^8 个/mL的浓菌液, 用无菌水将浓菌液稀释100倍, 得菌量约 10^6 个/mL的模拟含菌水样。在一系列已灭菌的100 mL烧杯中分别加入50 mL上述含菌水样, 置于六联磁力搅拌器上, 分别加入杀菌剂, 在200 r/min下搅拌10 min, 使药剂分散均匀, 然后恒温放置1 h, 按照GB/T 5750.12-2006中规定的平皿菌落计数法测定各烧杯中的活菌量, 以未加杀菌剂的烧杯中菌液作为空白样, 按下式计算杀菌率:

$$\text{杀菌率}(\%) = \frac{\text{空白样含菌量} - \text{试验样含菌量}}{\text{空白样含菌量}} \times 100\%$$

测定液面下1 cm处液体的浊度。采用毛细管等电聚焦电泳法测定大肠杆菌的等电点 pI ^[12]。

1.4 β -半乳糖苷酶活性测定

参照文献[1]方法, 在室温下, 于5支比色管中分别加入5.5 mL PBS缓冲液(pH=6.86), 再分别加入1 mL 10^7 个/mL的大肠杆菌菌液和0.75 mL 25 mmol/L的ONPG溶液, 振荡15 min后, 在其中4支比色管中分别加入1 mL 0.3 g/L的不同杀菌剂溶液, 用PBS溶液将5支比色管中溶液总体积调至10 mL作试液, 以未加杀菌剂的试液作参比, 在紫外可见分光光度计上测定各试液在420 nm处吸光度随时间的变化。

2 结果与讨论

2.1 PDACBMAC的合成与结构表征

PDACBMAC的合成条件与结果如表1所列, 每次实验DACBMAC的质量为10.0 g。

表 1 PDACBMAC 的合成条件与结果

Table 1 Synthetic conditions and results of PDACBMAC (the mass of monomer is 10 g)

$c(\text{Monomer})/(\text{mol}\cdot\text{L}^{-1})$	$m(\text{Initiator})/\text{mg}$	First stage		Second stage		Yield/%	Intrinsic viscosity/ ($\text{dL}\cdot\text{g}^{-1}$)
		Temp./ $^{\circ}\text{C}$	Time/h	Temp./ $^{\circ}\text{C}$	Time/h		
3.0	120	60	5	70	1	23.7	0.172
3.0	120	65	4	65	2	27.9	0.157
3.0	160	60	6	60	3	31.2	0.324
3.6	160	65	5	70	1	79.4	0.573
3.6	200	55	4	65	3	85.4	0.752
3.6	200	55	6	70	2	89.7	0.737
4.0	120	55	4	70	2	86.5	1.043
4.0	120	65	6	65	1	89.1	0.975
4.0	160	55	5	60	3	98.2	1.371
4.5	160	60	4	70	1	98.7	1.268
4.5	200	55	6	65	2	99.1	1.287
4.5	200	60	5	60	3	98.5	1.302

可见,单体 DACBMAC 浓度 $\geq 4.0\text{ mol/L}$,引发剂的用量为单体质量的 1.6%~2.0%,第一段反应温度为 55~60℃,时间为 4~6 h,第二段反应温度为 60~70℃,时间为 1~3 h 时,合成得到的 PDACBMAC 有较高的收率和特性粘数。

电位滴定法测得 PDACBMAC 的 $\text{pK}_a=8.97$ 。产物的 IR 和 ^1H NMR 谱图分别如图 1 和图 2 所示。

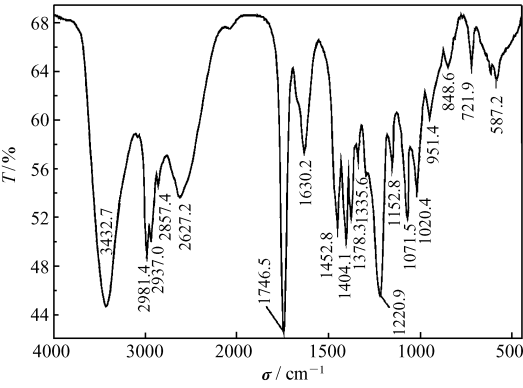


图 1 产物的红外光谱
Fig. 1 IR spectrum of product

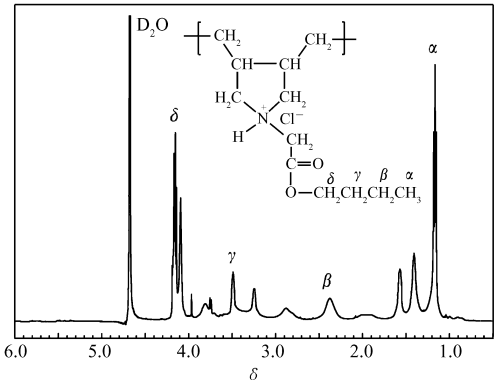


图 2 产物的 ^1H NMR 谱
Fig. 2 ^1H NMR spectrum of product

图 1 中 3432.7 cm^{-1} 处强峰为 H_2O 中 —OH 的伸缩振动峰 $\nu(\text{O—H})$, 这是样品易吸收空气中的水分所致; 2627.2 cm^{-1} 处的宽峰为叔胺盐 $\text{N}^+\text{—H}$ 的伸缩振动峰 $\nu(\text{N}^+\text{—H})$, 2981.3 和 2857.4 cm^{-1} 分别为 $\text{CH}_3\text{—}$ 的不对称伸缩振动峰 $\nu_{\text{as}}(\text{C—H})$ 和对称伸缩振动峰 $\nu_{\text{s}}(\text{C—H})$, 2937.0 cm^{-1} 为 $\text{—CH}_2\text{—}$ 的不对称伸缩振动峰 $\nu_{\text{as}}(\text{C—H})$, 1746.5 cm^{-1} 为酯基中 C=O 伸缩振动峰 $\nu(\text{C=O})$, 1630.2 cm^{-1} 可能为 $\text{N}^+\text{—H}$ 的弯曲振动峰 $\delta(\text{N}^+\text{—H})$ 和水分的吸收峰 $\delta(\text{O—H})$ 的重叠, 1452.8 cm^{-1} 可能为 $\text{CH}_3\text{—}$ 不对称弯曲振动峰 $\delta_{\text{as}}(\text{C—H})$ 和 $\text{—CH}_2\text{—}$ 的剪式振动峰 $\delta_{\text{s}}(\text{C—H})$ 的重叠, 1404.1 cm^{-1} 为 $\text{—CH}_2\text{—CO}$ 的弯曲振动峰 $\delta(\text{C—H})$, 1378.2 cm^{-1} 为 $\text{CH}_3\text{—}$ 的对称弯曲振动峰 $\delta_{\text{s}}(\text{C—H})$, 1335.6 cm^{-1} 为 $\text{—CH}_2\text{—}$ 的不对称弯曲振动峰 $\delta_{\text{as}}(\text{C—H})$, 1220.9 cm^{-1} 强峰为酯基 C—C(O)—O 中 C—O 的伸缩振动峰 $\nu(\text{C—O})$, 1071.5 和 1020.4 cm^{-1} 为 O—C—C 中 C—O 的伸缩振动峰 $\nu(\text{C—O})$, 1152.8 cm^{-1} 为 C—N 伸缩振动峰 $\nu(\text{C—N})$, 721.9 cm^{-1} 为 $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{—}$ 的面内摇摆振动峰 $\gamma(\text{—CH}_2\text{—})$ 。图 2 中各峰归属 (500 MHz, D_2O), δ : 4.68 (D_2O), 1.15~1.18 (α), 4.14~4.17 (δ), 4.09 ($\text{N}^+\text{—CH}_2\text{—CO—}$), 3.96 ($\text{N}^+\text{—H}$), 3.78~3.81 ($\text{N}^+\text{—CH}_2\text{—CH}$), 3.48 (γ), 2.37 (β), 1.57 (主链中 >CH—), 1.41 (主链中 $\text{—CH}_2\text{—}$)。对照文献^[9]中的 IR 和 ^1H NMR 谱图可见, 单体 DACBMAC 分子中不饱和基团 $\text{CH}_2=\text{CH—}$ 在 IR 谱中位于 $3000\sim 3100\text{ cm}^{-1}$ 处的特征峰和 ^1H NMR 谱中位于 $\delta 5.00\sim 6.00$ 处吸收峰消失, 表明 DACBMAC 已聚合

成 PDACBMAC;IR 谱中 1746.5 cm^{-1} 处强吸收峰和 721.6 cm^{-1} 处吸收峰表明 PDACBMAC 分子中仍保留有丁氧羰甲基。

2.2 杀菌性能

2.2.1 剂量对杀菌效果的影响 图 3 给出了特性粘数为 1.371 dL/g 的 PDACBMAC 和特性粘数为 1.412 dL/g 的 PDMDAAC 在不同剂量时的杀菌效果,并与 DACBMAC 和 DDBAC 进行比较。

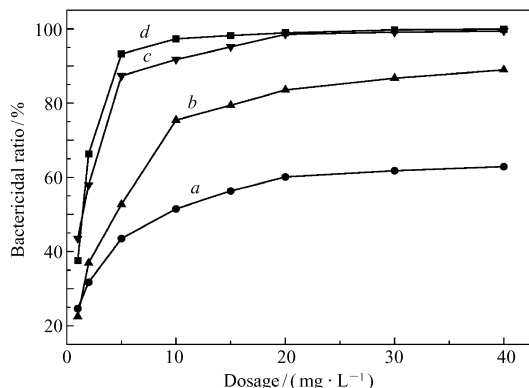


图 3 剂量对大肠杆菌杀菌率的影响

Fig. 3 Effect of dosage on the bactericidal ratio against *Escherichia coli* (*E. coli*)
Added drug: a. DACBMAC; b. PDMDAAC;
c. DDBAC; d. PDACBMAC

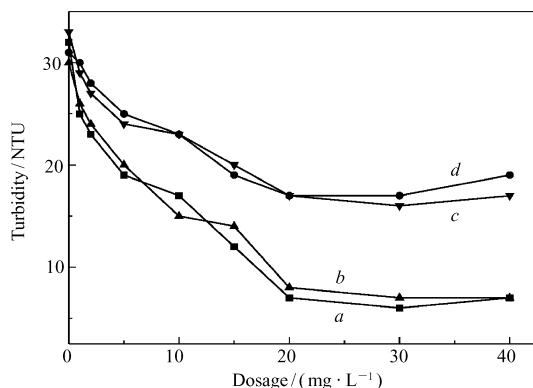


图 4 剂量对处理水样的浊度的影响

Fig. 4 Effect of dosage on the turbidity of treated water sample
Added drug: a. PDACBMAC;
b. PDMDAAC; c. DDBAC; d. DACBMAC

从图 3 可知, DACBMAC 聚合为 PDACBMAC 后, 杀菌力明显提高, 且比特性粘数相近的 PDMDAAC 提高较多。这是因为 PDACBMAC 分子链上正电荷更加集中, 增强了对大肠杆菌的吸附和捕捉能力。在细菌表面吸附的正电荷越多, 对细胞壁通透性的改变和细胞膜的破坏作用越强, 菌体细胞内组分越易漏出而死亡^[13-14]。虽然 PDACBMAC 与 PDMDAAC 的高分子链骨架相同, 但前者的侧基为较长的线型丁氧羰甲基, 其羰基通过吸电子诱导作用使 N 原子的正电性增强 (如 Scheme 1 II 所示), 从而增强了对大肠杆菌的吸附力; 而其酯基易与细菌细胞壁上极性物质产生亲和作用, 较长的丁基则有利于穿过细胞质膜的磷脂双分子层而与胞内物质作用^[15], 这些因素的协同作用提高了它对细菌的杀灭作用。从图 3 还可以看出, 在剂量低于 20 mg/L 时, PDACBMAC 的杀菌效果稍高于 DDBAC, 在大于 20 mg/L 时, 二者杀菌效果很接近, 且随用量增加变化不大; 用量为 30 mg/L 时, PDACBMAC、PDMDAAC、DACBMAC 和 DDBAC 的杀菌率分别为 99.7% 、 86.7% 、 61.8% 和 99.1% 。对杀菌后水样的浊度测定结果 (图 4) 表明, PDACBMAC 和 PDMDAAC 处理的水样浊度比 DDBAC 和 DACBMAC 处理的低得多, PDACBMAC 处理的又比 PDMDAAC 处理的稍低。在实验中可观察到 PDACBMAC 和 PDMDAAC 处理的烧杯底部有少量松散絮体, 说明二者还具有较好的絮凝效果。因此, PDACBMAC 兼具优良的絮凝效果和杀菌性能。

2.2.2 特性粘数对杀菌效果的影响 图 5 是剂量为 30 mg/L 的不同特性粘数的 PDACBMAC 对大肠杆菌的杀菌效果。从图 5 可见, 在剂量相同时, 特性粘数越大, 其杀菌效率越高。因为随着特性粘数增加, 分子量增大, 分子链上的正电荷增加并更加集中, 更易吸附带负电的大肠杆菌细胞, 对细胞壁通透性的改变和细胞膜的破坏作用^[13,14] 更显著, 从而增强了对大肠杆菌的杀灭作用, 这与文献^[4] 的结论一致。

2.2.3 pH 值对杀菌效果的影响 图 6 为以特性粘数 1.371 dL/g 的 PDACBMAC 为药剂, 剂量为 30 mg/L 时 pH 值对杀菌效果的影响。从图 6 可见, 在 pH 值为 $4.1\sim 4.7$ 时, 杀菌率很低; pH 值低于 4.1 时, 杀菌率随 pH 值降低而升高; 在 pH 值为 $4.7\sim 5.7$ 时, 杀菌率随 pH 值升高而很快增加; pH 值为 $5.7\sim 7.0$ 时, 杀菌率随 pH 值升高变化不大; pH > 7.5 时, 杀菌率很快下降。这是因为大肠杆菌等微生物的细胞壁由蛋白质构成, 有等电点, pH 值对杀菌效果的影响主要是改变了细菌表面的带电性, 从而改变了杀菌剂与菌体间的相互作用。pH 值低于 4.1 时, 菌体带正电荷, 与阳离子型杀菌剂相排斥而不利于杀菌, 随着 pH 值降低, 菌体上正电荷改变了细菌细胞壁的渗透性, 从而抑制细菌的繁殖与生长, 甚至

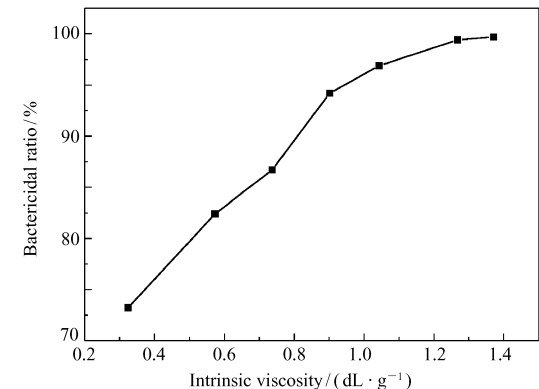


图 5 特性粘度对杀菌率的影响

Fig. 5 Effect of intrinsic viscosity of PDACBMAC on bactericidal ratio against *E. coli*

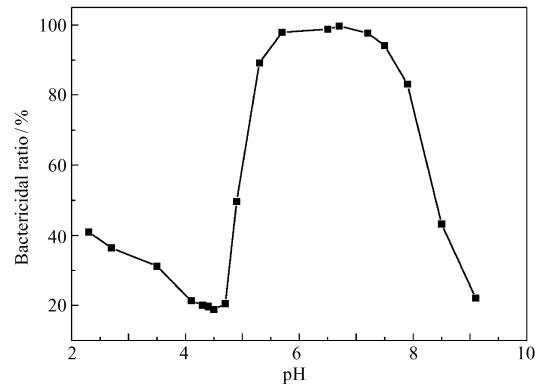


图 6 pH 值对杀菌效果的影响

Fig. 6 Effect of pH value on bactericidal ratio

导致其死亡; pH 值为 4.1~4.7 时,处于所测得大肠杆菌菌体蛋白等电点 pI 值 4.4 的附近,菌体基本上呈电中性,与阳离子型杀菌剂之间基本上没有静电吸引力,因此杀菌剂难以在菌体表面吸附。当 pH 值大于大肠杆菌的 pI 值时,带负电荷菌体数量随 pH 值的升高而增多,有利于增强与带正电荷的 PDACBMAC 间的相互作用;但与此同时,随着 pH 值升高,PDACBMAC 上的 H^+ 逐渐被 OH^- 中和转变为叔胺而削弱与大肠杆菌间的相互作用。因此,pH 值的影响取决于其中占优势的因素。根据前述测定的 pK_a 值,用量为 30 mg/L,pH = 6.7 时,PDACBMAC 分子链上转变为叔胺的单体单元数量在 0.6% 以内,因此 pH 值为 4.7~6.7 时,以带负电荷菌体数量增长为主,PDACBMAC 与大肠杆菌间的静电吸引力随 pH 值升高而增强,杀菌率随之增加;而当 $\text{pH} > 6.7$ 以后,菌体所带负电荷增多所产生的增强作用小于因 PDACBMAC 中的 H^+ 被中和而产生的削弱作用,PDACBMAC 与细菌间的吸附作用随 pH 值升高而降低,杀菌率随之下降,特别是 $\text{pH} > 7.5$ 以后,这种影响更明显,杀菌率下降得更快。

2.3 抗菌机理

图 7 为 β -半乳糖苷酶活性测定的试液在 420 nm 处的吸光度 (A) 随时间的变化曲线,其中大肠杆菌菌数约为 10^6 个/mL,各药剂的用量均为 30 mg/L。从图 7 可看出,不加杀菌剂的试液吸光度几乎为零,表明活细菌细胞内膜完好,没有释放 β -半乳糖苷酶,因此不能催化溶液中 ONPG 发生水解反应而生成邻硝基苯酚 (ONP)^[1]。而加杀菌剂的试液,其吸光度均随时间的延长而逐渐增大,其中加入 PDACBMAC 和 DDBAC 的试液变化较为明显;各药剂使试液吸光度的增加与其杀菌效果顺序相一致。表明上述 4 种药剂均能破坏细胞内膜使之释放出 β -半乳糖苷酶,从而催化 ONPG 发生水解产生 ONP 导致吸光度增加;在相同时间内吸光度越大,抗菌能力越强。以上结果表明,PDACBMAC 抗菌作用的实质是杀菌,与一般季铵盐的抗菌机理相类似^[16]。

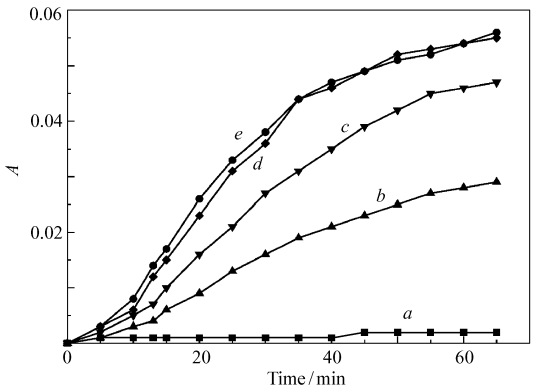


图 7 试液的吸光度随时间的变化关系

Fig. 7 Absorbance of sample solution vs time
Added drug: a. 0; b. DACBMAC;
c. PDMDAAC; d. DDBAC; e. PDACBMAC

参 考 文 献

1 ZHANG Xin(张昕),GAO Bao-Jiao(高保娇),ZHU Yong(朱勇),LIU Qing(刘青). *Acta Polym Sin*(高分子学报)[J],2007,(7):627

2 Kenawy E R,Abdel-Hay F I,El-Magd A A,Mahmoud Y. *React Funct Polym*[J],2006,**66**:419

3 Dizman B,Elasri M O,Mathias L J. *J Appl Polym Sci*[J],2004,**94**:635

4 WANG Xin-Rui(王欣蕊),GAO Bao-Jiao(高保娇),GUO Jian-Feng(郭建峰),HE San-Xiong(何三雄). *Chem J*

- Chinese Univ*(高等学校化学学报)[J],2005,**26**(9):1774
- 5 Francis S X,Thomas M R. US 4361548[P],1982
- 6 ZHAO Xiao-Lei(赵晓蕾),ZHANG Yue-Jun(张跃军),ZHU Ling-Ling(朱玲玲). *Chinese J Appl Chem*(应用化学)[J],2009,**26**(1):27
- 7 ZHAO Xiao-Lei(赵晓蕾),LIU Cheng(刘程),ZHANG Yue-Jun(张跃军). *Fine Chem*(精细化工)[J],2007,**24**(6):604
- 8 JIANG Shan(江山),WANG Li(王立),YU Hao-Jie(俞豪杰),CHEN Ying(陈英). *Chinese Polym Bull*(高分子通报)[J],2002,(6):57
- 9 LIU Li-Hua(刘立华),XIAO Ti-Le(肖体乐),WU Jun(吴俊),ZHAO Yan-Min(赵艳敏). *Fine Chem*(精细化工)[J],2009,**26**(7):702
- 10 ZHANG Jian-Rong(张剑荣),QI Ling(戚苓),FANG Hui-Qun(方惠群). *Instrumental Analysis Experiments*(仪器分析实验)[M]. Beijing(北京):Science Press(科学出版社),1999:148
- 11 CHEN Yi-Ben(陈仪本),OUYANG You-Sheng(欧阳友生),HUANG Xiao-Mo(黄小茉),XIE Xiao-Bao(谢小保),PENG Hong(彭红). *Industry Bactericide*(工业杀菌剂)[M]. Beijing(北京):Chemical Industry Press(化学工业出版社),2001:44
- 12 CAO Cheng-Xi(曹成喜). *Analytical Biochemistry Techniques*(分析生物化学技术)[M]. Beijing(北京):Chemical Industry Press(化学工业出版社),2008:195
- 13 Lin J,Qiu S Y,Lewis K,Klibanov A M. *Biotechnol Bioeng*[J],2003,**83**(2):168
- 14 Milović N M,Wang J,Lewis K,Klibanov A M. *Biotechnol Bioeng*[J],2005,**90**(6):715
- 15 Ikeda T,Tazuke S,Suzuki Y. *Makromol Chem*[J],1984,**185**:869
- 16 Ohta Y,Kondo Y,Kawada K,Teranaka T,Yoshino N. *J Oleo Sci*[J],2008,**57**(8):445

Synthesis and Sterilizing Property of Poly(*N,N*-diallyl-*N*-carbobutoxymethylammonium Chloride)

LIU Li-Hua*, XIAO Ti-Le, CHEN Jin-Wen, ZHAO Yan-Min, LIU Jun-Feng

(Key Laboratory of Theoretical Chemistry and Molecular Simulation of Ministry of Education and Hunan Province, Hunan Province College Key Laboratory of QSAR/QSPR, School of Chemistry and Chemical Engineering, Hunan University of Science and Technology, Xiangtan 411201)

Abstract Poly(*N,N*-diallyl-*N*-carbobutoxymethylammonium chloride) (PDACBMAC) was prepared from *N,N*-diallyl-*N*-carbobutoxymethylammonium chloride (DACBMAC) as monomer and ammonium peroxydisulfate (APS) as initiator in water solution, and its structure was characterized by FT-IR and ¹H NMR. The sterilizing property of PDACBMAC against *Escherichia coli* (*E. coli*) and its antimicrobial mechanism were also studied. The results show that the sterilizing potency of PDACBMAC against *E. coli* is obviously higher than that of poly (dimethyldiallylammonium chloride) (PMDAAC) and slightly higher than that of dodecyldimethylbenzylammonium chloride (DDBAC) when the dosage is below 20 mg/L, and the bactericidal ratio is up to 99.7% when the intrinsic viscosity of PDACBMAC is 1.371 dL/g and the dosage is 30 mg/L. The bactericidal ratio is affected obviously by pH value, which increases with increasing pH in a range of 4.7~6.7, and decreases with increasing pH when pH>6.7. The results of testing turbidity for the treated water sample show that PDACBMAC still possesses an excellent coagulation property. The results of measuring activities of the enzyme of β -D-galactosidase show that the antimicrobial mechanism of PDACBMAC is based on a sterilization action.

Keywords poly (*N,N*-diallyl-*N*-carbobutoxymethylammonium chloride), sterilizing property, antimicrobial mechanism, *Escherichia coli*