

论文

聚乙烯链在碳纳米管侧壁吸附的动力学模拟研究

刘佳, 赵莉, 吕中元, 李泽生

吉林大学理论化学研究所, 理论计算国家化学重点实验室, 长春 130023

摘要:

利用经典的分子动力学模拟方法对聚乙烯(PE)分子在两种不同类型的碳纳米管(CNT)中的吸附进行了研究. 计算了两者之间的扩散系数和相互作用能; 利用PE链自身的扭转角分布和取向参数对PE链构象进行了分析. 结果表明, PE链可以在CNT上很好的吸附, 且PE的构象和吸附位置主要与温度和CNT的半径有关, 与管的类型关系不大.

关键词: 碳纳米管 聚乙烯 吸附 动力学模拟

Molecular Dynamics Simulation of Adsorption of a Polyethylene Chain on Carbon Nanotube

LIU Jia, ZHAO Li, L Zhong-Yuan, LI Ze-Sheng*

State Key Laboratory of Theoretical and Computational Chemistry, Institute of Theoretical Chemistry, Jilin University, Changchun 130023, China

Abstract:

The adsorption of a polyethylene(PE) chain on two kinds of carbon nanotubes(CNTs) was studied by classic molecular dynamics simulation. The diffusion coefficient and interaction energy of PE chain and CNT were calculated. The structure of the PE chain was analyzed by the dihedral distributing function and the order parameters. The results show that the PE chain is adsorbed firmly on the CNT, and the structure and the position of the PE chain mostly depend on the temperature and radius of the CNT.

Keywords: Carbon nanotube Polyethylene Adsorption Molecular dynamics simulation

收稿日期 2008-09-10 修回日期 1900-01-01 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

通讯作者: 李泽生

作者简介:

参考文献:

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF(428KB)

[HTML全文](0KB)

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

▶ 碳纳米管

▶ 聚乙烯

▶ 吸附

▶ 动力学模拟

本文作者相关文章

▶ 刘佳

▶ 赵莉

▶ 吕中元

▶ 李泽生

▶ 刘佳

▶ 赵莉

▶ 吕中元

▶ 李泽生

PubMed

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

Article by

- Iijima S.. Nature[J], 1991, 354: 56—58
- Dalton A. B., Collins S., Muñoz E., et al.. Nature[J], 2003, 423: 703
- Guo H. N., Sreekumar T. V., Liu T., et al.. Polymer[J], 2005, 46: 3001—3005
- WANG Zhang-Yu(王章郁), WANG Qi(王琪), CHEN Ying-Hong(陈英红), et al.. Chem. J. Chinese Universities(高等学校化学学报)[J], 2007, 28(3): 571—574
- Sreekumar T. V., Liu T., Min B. G., et al.. Adv. Mater. [J], 2004, 16: 58—61
- LI Wen-Chun(李文春), SHEN Lie(沈列), ZHENG Qiang(郑强). Chem. J. Chinese Universities(高等学校化学学报)[J], 2005, 26(2): 382—384
- ZHANG Xiong-Wei(张雄伟), CHU Wei(储伟), ZHUANG Hui-Xiang(庄慧祥), et al.. Chem. J. Chinese Universities(高等学校化学学报)[J], 2005, 26(3): 493—496
- ZHAO Li(赵莉), YANG Hua(杨华), LI Zhuo(李卓), et al.. Chem. J. Chinese Universities(高等学校化学学报)[J], 2006, 27(7): 1340—1342
- Ebbesen T. W., Lezec H., Hiura H., et al.. Nature[J], 1996, 382: 54—56
- Liu J., Wang X.L., Zhao L., et al.. J. Poly. Sci.: Part B[J], 2008, 46: 272—280
- Sun H.. J. Phys. Chem. B[J], 1998, 102: 7338—7364
- Sun H., Ren P., Fried J. R.. Comp. & Theor. Polym. Sci. [J], 1998, 8: 229—246
- Hans C. Andersen.. J. Chem. Phys. [J], 1980, 72(4): 2384—2393
- McNally T., Potschke P., Halley P., et al.. Polymer[J], 2005, 46: 8222—8232
- Wei C. Y., Srivastava D.. Phys. Rev. Lett. [J], 2003, 91: 235901(1—4)
- Yang H., Liu Y., Zhang H., et al.. Polymer[J], 2006, 47: 7607—7610

本刊中的类似文章

1. 田华雨,夏加亮,林浩,陈磊,陈学思,李悦生,景遐斌. 两亲性线性-超支化多臂共聚物在水溶液中自组装为阳离子囊泡的研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(9): 1771-1774
2. 唐亚文,曹爽,陈煜,包建春,陆天虹. 碳纳米管结构对碳纳米管载Pt催化剂电催化性能的影响[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(5): 936-939
3. 魏忠,黄微,李纪红,袁直. 吸附剂结构的计算机辅助设计及吸附机理[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(9): 1735-1738
4. 祁玉冬,叶光斗,李守群,徐建军. 无乳化剂乳液聚合制备高分子量聚乙烯醇[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(11): 2214-2218
5. 陈怡,袁帅,施利毅,朱焕扬,张剑平. 高性能光催化降解聚乙烯薄膜的研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(3): 554-558
6. 刘亮,董德明,路永正,花修艺,高秋菊. 自然水体悬浮颗粒物中主要化学组分对铅、铜的吸附作用——实验室模拟吸附特征与水环境中富集特征的比较[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(5): 851-855
7. 钟起玲,张兵,饶贵仕,丁月敏,王国富,蒋玉雄,任斌,田中群. Pt-CNTs 修饰玻碳电极(Pt-CNTs/GC)电氧化活性的研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(6): 1135-1138
8. 陈捷,刘延,黄磊,冯威,熊德琪. 焙烧温度对TiO₂柱撑膨润土结构、吸附及光催化性能的影响[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(7): 1406-1411
9. 付红霞,张登松,施利毅,,方建慧. 基于碳纳米管的氧化铈纳米管的合成及表征[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(4): 617-620
10. 金莲姬,张珉,苏忠民,史丽丽,赵亮. 单壁碳纳米管内包含有机小分子(乙炔、乙烯和乙烷)结构的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(4): 755-759
11. 郭卓,袁悦. 介孔碳CMK-3对苯酚的吸附动力学和热力学研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(2): 289-292
12. 刘洪玲,李军. 肿瘤靶向PEI包覆磁性纳米凝胶的光化学制备及表征[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(8): 1703-1706
13. 孙向英,周政,刘斌.

二西基锡分子印迹聚合物的合成与性能研究

- [J]. 高等学校化学学报, 2006,27(8): 1443-1447
14. 范闯光,方金龙,周龙昌,李望良,李斌,邢建民,刘自力. CuHY分子筛中铜离子的分布与吸附脱硫性能[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(9): 1834-1840
 15. 张红霞,吴霞琴,后雯璟,陆中庆,谢文,王荣,李和兴. 氯过氧化物酶修饰电极对一氯二甲酮的催化氯化[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(9): 1863-1865
 16. 孟洁,宋礼,孟洁,孔桦,王朝英,朱广瑾,徐樾华,解思深,许海燕. 细胞在单壁碳纳米管无纺膜支架上的生长行为[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(3): 476-480
 17. 汪晓,张晨,刘演新,李从举,杜中杰,励杭泉. 聚氨酯接枝多壁碳纳米管的制备及表征[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(2): 366-370
 18. 王国建;董玥;邱军;刘琳. 聚苯乙烯修饰碳纳米管表面的研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(6): 1157-1161
 19. 王章郁,王琪,陈英红,夏和生. 超声辐照原位乳液聚合制备聚苯乙烯包覆碳纳米管复合材料的结构与性能[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(3): 571-574
 20. 李响,赵一阳,卢晓峰,王海鹰,王策. 聚乙烯吡咯烷酮/四氧化三铁复合纳米纤维的制备与表征[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(10): 2002-2004
 21. 王国建,董玥,刘琳,许乾慰. 超支化聚对氯甲基苯乙烯修饰碳纳米管表面的研究[J]. 高等学校化学学报,

- 2007,28(1): 164-168
22. 李鱼,王晓丽,张正,郭书海.表层沉积物(生物膜)非残渣态组分的选择性萃取分离及其吸附铜/锌的特性[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(12): 2285-2290
23. 邱瑾,陈声培,田利,曾冬梅,甄春花,孙世刚.碱性介质中L-赖氨酸在纳米金膜电极上的吸附和氧化过程[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(9): 1841-1845
24. 王海鹰,杨洋,卢晓峰,王策.硫化锌掺锰/聚乙烯醇复合纳米纤维的制备与表征[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(9): 1785-1787
25. 赵莉;杨华;李卓;李泽生;孙家锤.聚苯乙烯在石墨表面吸附的分子动力学模拟[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(7): 1340-1342
26. 李志,巩前明,王野,梁吉,黄启忠,黄伯云.ACNT/C纳米复合材料导热性能及其机理的初步研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(10): 1819-1822
27. 李巧霞,严彦刚,徐群杰,蔡文斌.镉电极上的衰减全反射表面增强红外光谱[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(12): 2414-2416
28. 杜富滢,黄卫华,吴文展,王宗礼,程介克.新型微盘传感器的研制及用于单细胞释放NO监测[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(6): 1069-1071
29. 谢福中,胡华荣,乔明华,闫世润,范康年,雷浩,谭大力,包信和,宗保宁,张晓昕.噻吩在猝冷骨架Ni上吸附脱硫的XPS研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(9): 1729-1732
30. 尹勇,陈海涵,孔令东,陈建民.NaCl与Fe₂O₃混合物对SO₂的有效吸收[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(7): 1337-1341
31. 廖红东,袁丽,童春义,朱咏华,李杜,刘选明.基于聚乙烯醇/Fe₂O₃纳米颗粒的纤维素酶固定化[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(8): 1564-1568
32. 赵琨,宋海燕,常竹,庄淑琪,何品刚,方禹之.铂纳米颗粒修饰直立碳纳米管电极的葡萄糖生物传感器[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(7): 1251-
33. 尹勇,陈海涵,孔令东,陈建民.NaCl与Fe₂O₃混合物对SO₂的有效吸收[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(7): 1337-1341
34. 郑超,刘照胜,高如瑜,张玉奎.前沿分析法研究对-羟基苯甲酸印迹整体柱的热力学行为[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(8): 1443-1448
35. 王迎军,徐红,郑裕东,任力.层状水凝胶仿生软骨的制备与性能[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(7): 1488-1491
36. 那立艳,姜慧明,杨宝灵,海华,宁桂玲.三维开放骨架铜系金属有机配位聚合物Tm(BTC)(DMF)(DMSO)的合成、结构和性质[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(8): 1437-1439
37. 常玉广,马放,郭静波,张金凤.絮凝基因的克隆及其絮凝形态表征[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(9): 1685-1689
38. 林翼,蔡文生,邵学广.改进的紧束缚势蒙特卡罗方法及其在碳纳米豆荚中的应用[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(9): 1751-1755
39. 周虹,孙长青.基于多壁碳纳米管/二茂铁接枝壳聚糖的核/壳结构组合物多层膜电极的组装及其电催化[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(11): 2159-2163
40. 辛志荣,赵郁霞,侯万国,尹立刚,邱召明,刘晓丽,柳婵,殷敬华.新型聚乙烯接枝共聚物的制备与表征[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(10): 1990-1994
41. 康春莉;苏春彦;郭平;赵宇侠;董德明.自然水体生物膜胞外蛋白质吸附铅和镉的研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(7): 1245-1246
42. 彭爱平,张浩,,王志永,施祖进,顾镇南,曹高萍,高立军.裂解酞菁铁和乙烯制备取向碳纳米管阵列[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(12): 2229-2233
43. 金卫华,曹军卫,王友亮,熊贵光,姚保利,雷铭.细菌视紫红质多重突变体结构变化及其中间态的寿命[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(12): 2321-2326
44. 董永全,张林,侯同刚,陈欢林,高从培.聚丙烯酰胺/蒙脱土纳米复合物-聚乙烯醇共混膜的制备及其渗透汽化性能[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(12): 2422-2426
45. 王晓丽,李鱼,王一喆,董德明,李绪谦.选择性萃取对沉积物非残渣态、粘土矿物结构及吸附特性的影响[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(2): 288-293
46. 聂福德,刘建,李金山,赵晓平,李越生,范仲勇.VDF-CTFE共聚物在TATB表面吸附链构象的分子动力学模拟[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(3): 605-610
47. 褚效中,徐继明.氢同位素吸附容量与吸附剂比表面积的关系[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(4): 775-778
48. 杜卓,张娜,王建华.多壁碳纳米管固相萃取-在线提取蛋清中的溶菌酶[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(5): 902-905
49. 孙晓岩,李建伟,余海清,李英霞,陈标华.苯与丙烯在MCM-22型分子筛内吸附行为的Monte Carlo研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(5): 949-953
50. 叶平伟,栾志强,张敬畅,张忠良,李凯,李岩,马兰,曹维良.活性炭的高温脱氧改性及其床层对全氟异丁烯的吸附动力学研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(5): 954-958
51. 周明松,邱学青,杨东杰.木质素系和萘系分散剂在煤水界面的吸附性能[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(5): 987-992
52. 李纪红,张原玮,杨眉,张静,马翼,袁直.寡肽吸附剂的制备及吸附机理[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(6): 1159-1162
53. 邹强;张之圣;李海燕;胡明;秦玉香;刘志刚.聚乙烯醇辅助合成ZnO纳米带及其表征[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(7): 1211-1213
54. 徐乃库,肖长发,封严.甲基丙烯酸正丁酯/甲基丙烯酸β羟乙酯共聚吸附功能纤维的制备及表征[J]. 高等学校化

- 学学报, 2008,29(8): 1677-1683
55. 夏树伟,马骁楠,于良民,潘纲. Zn(II)/ γ -MnOOH体系化学吸附的密度泛函理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(9): 1804-1809
56. 李倩,岳钦艳,高宝玉,刘莉莉. 阳离子膨润土对分散染料的吸附动力学研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(6): 1113-1117
57. 于华荣,成荣明,徐学诚,陈奕卫. 聚乙烯醇对碳纳米管负载氧化铁影响的研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(6): 1003-1006
58. 王燕铭,张振方,于琦,王连永,孔德领,俞耀庭. 胆固醇修饰的低分子量聚乙烯亚胺接枝化聚[L-天冬酰胺-co-L-赖氨酸]作为基因载体的性能研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(10): 2011-2014
59. 蒋远媛,阙正波,王晓东,黄培. 聚酰亚胺的微球化[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(10): 2091-2095
60. 薛冰纯,蔡文生,邵学广. 有限长Y型碳纳米管结构和性质的第一性原理研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(12): 2407-2412
61. 宋海燕,李艳楠,赵琨,叶晓燕,何品刚,孙卓,方禹之. 低压下酞菁裂解法制备定向碳纳米管阵列[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(9): 1622-1627
62. 张霞,赵月,周春彬,孙挺. 纳米TiO₂对Ag(I)配合物的吸附[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(1): 121-124
63. 王津南,李爱民,周友冬,张全兴. 弱碱性大孔吸附树脂对腐殖酸的吸附[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(1): 181-184
64. 冉茂飞,储伟,文婕,李延芳. 助剂铬对Ni/MgO催化剂CVD法制备碳纳米管的促进作用[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(2): 231-235
65. 庄占兴,路福绥,陈甜甜,刘月,罗万春. 苯乙烯丙烯酸共聚物分散剂在氟铃脲颗粒界面的吸附性能[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(2): 332-336
66. 杨玉环,潘纲,马骁楠,陈灏,张美一,何广智,李薇. Zn(II)在TiO₂表面上的微观吸附模式研究[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(2): 387-390
67. 付群,吴明红,焦正,王德庆. 碳纳米管的快速糖基化及用于糖-凝集素特异性识别作用的研究[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(3): 525-529
68. 叶社房,钟李明,吴艺晖,张其清. 多壁碳纳米管诱导A549细胞氧化应激与去极化线粒体膜电位[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(3): 497-501
69. 米万良,苏庆泉. 多孔基体负载的碳纳米管复合膜制备及其气体渗透性能[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(3): 544-548
70. 薛严冰,唐祯安. CO在SnO₂(110)面吸附特性的密度泛函研究[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(3): 583-587
71. 周湘文,朱跃峰,熊国平,梁吉,于溯源. 高填充量碳纳米管/丁苯粉末橡胶机械混炼的物理化学机制[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(3): 601-606
72. 李纪红,俞玫,王慧彦,袁直,马翼. 计算机模拟内毒素吸附剂吸附机理的研究[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(6): 1066-1069
73. 毛蕾蕾,王宗花,邢琳琳,闫永臣,陈悦. 羧基化碳纳米管在荧光酮光度法测定铅中的应用[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(5): 830-833
74. 张涛,范宏亮,周建光,刘国良,金钦汉. 重要传感材料荧光共轭聚合物PPESO₃的一种新的简便合成路线[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(5): 853-855
75. 曹优明,王志永,牛芳,宋卫国,施祖进,顾镇南. 单壁碳纳米管自还原法制备负载Pt催化剂及其催化性能[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(4): 741-745

文章评论

序号	时间	反馈人	邮箱	标题	内容
					ugg online ugg boot online buy ugg boots sale ugg boots cardy ugg boots l cardy tall ugg ugg boots ugg knightsb