

本期目录 | 下期目录 | 过刊浏览 | 高级检索

[打印本页] [关闭]

论文

低聚乙烯链在碳纳米管侧壁上的图案化吸附

刘佳, 赵莉, 吕中元, 李泽生

吉林大学理论化学研究所, 国家理论计算重点实验室, 长春 130023

摘要:

本文利用经典动力学模拟, 在纳米尺度上对低聚乙烯链(PE)在含有异质结的CNTs上的吸附进行了研究. 模拟计算结果表明, PE链在CNTs侧壁吸附所形成的构象与它和CNTs的尺寸匹配度有很大关系, 仅当PE链与CNTs的尺寸相匹配时, 才能形成规整的图案化构象, 成为良好的自组装结构. 这对纳米尺度的图案化控制很有意义.

关键词: 尺寸匹配度 碳纳米管 低聚乙烯 吸附 分子动力学模拟 异质结

Patterning Adsorption of Polyethylene Oligomer on the Side-wall Carbon Nanotubes

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

State Key Laboratory of Theoretical and Computational Chemistry, Institute of Theoretical Chemistry, Jilin University, Changchun 130061, China

Abstract:

The patterning adsorption of the polyethylene oligomer(PE) on the side-wall of carbon nanotubes(CNTs) composed of CNT(5,5), CNT(10,0) and heterojunction was researched using the classical molecular dynamic simulation. The configuration of the PE chains on the side-wall of the CNTs depended on the dimensional matching of PE and CNT mostly. The patterning adsorption was presented when the length of the PE chains and the pure CNT part matched.

Keywords: Dimensional matching Carbon nanotube Polyethylene Adsorption Molecular dynamics simulation Heterojunction

收稿日期 2009-01-13 修回日期 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

国家自然科学基金(批准号: 20333050, 20303007) 资助.

通讯作者: 李泽生, 男, 博士, 教授, 博士生导师, 主要从事理论化学基础理论及应用研究. E-mail:

zeshengli@hit.edu.cn

作者简介:

参考文献:

- [1]Iijima S.. Nature[J], 1991, 354: 56—58
- [2]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
- [3]Chico L., Crespi V. H., Benedict L. X., *et al.*. Phys. Rev. Lett.[J], 1996, 76: 971—974
- [4]Mayo S. L., Olafson B. D., Goddard W. A.. J. Phys. Chem.[J], 1990, 94: 8897—8909
- [5]Sun H.. J. Phys. Chem. B[J], 1998, 102: 7338—7364
- [6]LIU Jia(刘佳), ZHAO Li(赵莉), LÜ Zhong-Yuan(吕中元), *et al.*. Chem. J. Chinese Universities(高等学校化学学报)[J], 2008, 29(12): 2389—2392

本刊中的类似文章

1. 金美花, 廖明义, 江雷. 超疏水性聚二甲基硅氧烷膜的制备及其表面吸附性研究[J]. 高等学校化学学报, 2007, 28(5): 996-998
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

扩展功能

本文信息

Supporting info

PDF(371KB)

[HTML全文]

[\({article.html_WenJianDaXiao} KB\)](#)

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

▶ 尺寸匹配度

▶ 碳纳米管

▶ 低聚乙烯

▶ 吸附

▶ 分子动力学模拟

▶ 异质结

本文作者相关文章

PubMed

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. 夏树伟, 徐香, 于红, 张慧玲. 丙烯腈在Cu(111)面上化学吸附的密度泛函研究及NBO分析[J]. 高等学校化学学报, 2007, 28(4): 751-754
5. 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
6. 李奕杰, 魏东山, 金熹高, 韩志超, 廖琦. 受限状态聚合物熔体的分子动力学模拟[J]. 高等学校化学学报, 2007, 28(5): 992-995
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. 李小森. 用分子动力学模拟水合物储氢[J]. 高等学校化学学报, 2007, 28(3): 552-555
10. 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
11. 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
12. 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
13. 陈沛全, 孙宏伟, 李正名, 王建国, 马翼, 赖城明. 单噻磺隆晶体-活性构象转换的分子动力学模拟[J]. 高等学校化学学报, 2007, 28(2): 278-282
14. 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

15. 范闽光, 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
16. 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
17. 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
18. 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
19. 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
20. 周艳霞, 张勇, 谭宏伟, 贾宗超, 陈光巨. 苏氨酸在昆虫抗冻蛋白抗冻活性中的作用[J]. 高等学校化学学报, 2007, 28(3): 526-529
21. 石剑, 张敏华, 董秀芹. 超临界CO₂中甲醇和乙醇无限稀释扩散系数的分子动力学模拟与实验测定[J]. 高等学校化学学报, 2007, 28(3): 518-521
22. 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
23. 曹希传, 张卓琦, Patel Ketan, Anderson W. Michael. 纯硅介孔分子筛SBA-15表面的手性移植[J]. 高等学校化学学报, 2006, 27(11): 2013-2016
24. 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
25. 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
26. 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
27. 杨胥微, 张晓丰, 阚秋斌, 付威, 黄家辉, 吴通好. 微量吸附量热技术在NH₂-SBA-15合成中的应用[J]. 高等学校化学学报, 2007, 28(6): 1147-1150
28. 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
29. 王津南, 李爱民, 许丽, 周扬. 复合功能树脂对水体中天然有机酸的吸附[J]. 高等学校化学学报, 2009, 30(5): 1046-1051
30. 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
31. 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
32. 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
33. 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

34. 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
35. 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-
36. 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
37. 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
38. 孙洪良, 朱利中. 表面活性剂改性的螯合剂有机膨润土对水中有机污染物和重金属的协同吸附研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(8): 1475-1479
39. 张媛媛, 周康, 平郑骅. 以聚乙烯基咪唑为配基的内毒素亲和吸附剂的研究[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(7): 1371-
40. 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
41. 卢天成, 邓超, 孙静, 陈学思, 章培标, 景遐斌. 生物素化高分子涂层的制备与评价[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(4): 837-841
42. 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
43. 林翼, 蔡文生, 邵学广. 改进的紧束缚蒙特卡罗方法及其在碳纳米管中的应用[J]. 高等学校化学学报, 2007,28(9): 1751-1755
44. 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
45. 齐岩峰, 高雪峰, 黄旭日.

促红细胞生成素(EPO)受体(EBP)激活剂的理论突变设计

- [J]. 高等学校化学学报, 2008,29(3): 615-617
46. 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
47. 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
48. 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
49. 刘伟庆, 戴松元, 胡林华, 戴俊, 方霞琴, 徐炜炜. 利用强度调制光电流谱研究TiO₂薄膜中染料不均匀分布现象[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(2): 346-349
50. 聂海龙, 何晓晓, 霍希琴, 海罗, 伍旭, 葛佳, 谭蔚泓. 不同功能化基团修饰的硅壳纳米颗粒分散性研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(3): 477-481
51. 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
52. 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
53. 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
54. 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
55. 周玮, 房克功, 陈建刚, 孙予罕. 在Co/SiO₂作催化剂的Fischer-Tropsch反应中温度对合成气吸附行为及稳定性的影响[J]. 高等学校化学学报, 2006,27(6): 1080-1085
56. 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
57. 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
58. 谢胡晓, 邱藤, 李效玉. 用离子吸附法制备银/聚吡咯同轴纳米电缆[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(5): 1046-1049
59. 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
60. 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
61. 夏树伟, 马晓楠, 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
62. 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
63. 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
64. 牟丹, 吕中元, 黄旭日, 孙家锤. 聚乙烯在羟基化β-石英(100)表面上的有序吸附[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(10): 2065-2069

65. 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
66. 楚慧郢, 郑清川, 赵勇山, 张红星. 人类2-氨基-3-羧基粘康酸6-半醛脱羧酶(ACMSD)与底物及抑制剂作用模型的理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(12): 2398-2402
67. 刘佳, 赵莉, 吕中元, 李泽生. 聚乙烯链在碳纳米管侧壁吸附的动力学模拟研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(12): 2389-2392
68. 郑清川, 吕绍武, 赵勇山, 牟颖, 罗贵民, 孙家锤. GSH对两种谷胱甘肽过氧化物酶模拟物活性影响的研究[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(12): 2337-2340
69. 刘秀奇, 张国, 邢贺钦. 同时吸附油和六价铬离子复合材料的制备及性能[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(11): 2303-2307
70. 王挺, 蒋新, 毛从文. 吸附相反应技术制备Ag纳米粒子的反应机理[J]. 高等学校化学学报, 2008,29(11): 2227-2231
71. 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
72. 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
73. 覃吴, 李欣, 孟祥丽, 强亮生. O₃分子在CuO(110)面吸附的密度泛函理论研究[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(1): 164-169
74. 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
75. 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
76. 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腺颗粒界面的吸附性能[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(2): 332-336
77. 杨玉环, 潘纲, 马晓楠, 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
78. 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
79. 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
80. 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
81. 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
82. 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
83. 胡小洋, 张燕霞, 张弢, 于谦, 陈红. 以PEG为间隔基固定赖氨酸制备血液相容的聚氨酯材料[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(3): 613-617
84. 韩晓燕, 张政朴. 聚四氟乙烯纤维的改性及其对胆红素的吸附[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(3): 618-624
85. 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
86. 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
87. 庞瑾瑜, 徐桂英, 白燕, 赵涛涛. 气/液界面上β-环糊精与十六烷基三甲基溴化铵包结物形成的分子动力学模拟[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(4): 735-740
88. 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
89. 曲晓波^{1,3}, 苏忠民², 胡冬华^{2,3}, 鲍永利¹, 孟祥颖¹, 乌垠¹, 李玉新¹. 金丝桃素分子结构及其与HIV病毒蛋白酶作用的分子动力学研究[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(7): 1402-1405
90. 赵军, 李雪芹, 修志龙. PEG在线定点修饰水蛭素及其修饰位点的理论预测与分析[J]. 高等学校化学学报, 2009,30(7): 1410-1416

文章评论

序号	时间	反馈人	邮箱	标题
				META http-equiv=Type content=charset=Appreciation star