

大会报告

T2.18 全氟磺酸类化合物在氧化铁表面的吸附行为机制

冯鸿儒, 蔺远, 孙玉贞, 曹慧明, 傅建捷, 张爱茜

中国科学院生态环境研究中心环境化学与生态毒理学国家重点实验室, 北京 100085

收稿日期 修回日期 网络版发布日期 2013-11-15 接受日期

摘要 目的 了解全氟磺酸类化合物在氧化铁表面吸附行为的分子机制对了解该化合物的环境过程并进行有效的污染控制十分必要。方法 以真实环境下的水-氧化铁界面结构为基础, 构建包含水、全氟磺酸类化合物和氧化铁表面的界面体系, 综合利用分子动力学模拟和量子化学计算的手段, 研究全氟磺酸类化合物在氧化铁表面的吸附机制, 确定全氟磺酸类化合物与氧化铁表面的作用方式和其吸附形态。结果与结论 在模拟条件下, 碳链长度分别由四碳到八碳的全氟磺酸类化合物均在4 ns后吸附到氧化铁表面, 在之后1 ns平衡振荡中未观测到明显脱附。与脂肪酸(月桂酸)的垂直于氧化铁表面的吸附方式不同, 全氟磺酸类化合物倾向于以碳链平行于表面的方式进行吸附。吸附结果显示在较低浓度下, 全氟磺酸类化合物吸附未达到氧化铁的单层饱和覆盖度时, 其倾向于以长轴平行于氧化铁表面的吸附方式, 且主要依靠全氟磺酸类化合物中的F原子与羟基化氧化铁表面的H原子之间形成氢键作用而相互结合。分析不同链长全氟磺酸类化合物在垂直于氧化铁表面的位移大小和氢键作用的强弱, 总体上呈现出随着碳链增长, 吸附作用增强的趋势, F-H氢键的数量增加是导致其吸附性能上升的因素之一。而全氟丁基磺酸在动力学模拟中垂直方向上的位移明显小于全氟戊基磺酸及全氟己基磺酸的位移, 究其原因可能源自四碳链全氟磺酸类化合物体积小, 受到与周围水分子形成的F-H氢键影响较小, 而碳链长度短, 直线构型不易发生变化, 在表面上容易调整为能量较低的平行表面的吸附模式。

关键词

分类号

Abstract

扩展功能

本文信息

- ▶ [Supporting info](#)
- ▶ [PDF\(1030KB\)](#)
- ▶ [\[HTML全文\]\(0KB\)](#)
- ▶ [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](#)
- ▶ [复制索引](#)
- ▶ [Email Alert](#)
- ▶ [文章反馈](#)
- ▶ [浏览反馈信息](#)

相关信息

- ▶ [本刊中 无 相关文章](#)
- ▶ 本文作者相关文章

- [冯鸿儒](#)
- [蔺远](#)
- [孙玉贞](#)
- [曹慧明](#)
- [傅建捷](#)
- [张爱茜](#)