

## 十二烷基苯磺酸钠在SiO<sub>2</sub>表面聚集的分子动力学模拟

宋其圣, 郭新利, 苑世领, 刘成卜

山东大学胶体与界面化学教育部重点实验室, 济南 250100

摘要:

采用分子动力学方法研究了阴离子表面活性剂十二烷基苯磺酸钠(SDBS)在无定形SiO<sub>2</sub>固体表面的吸附. 设置不同的水层厚度, 观察固液界面和气液界面吸附的差异. 模拟发现表面活性剂分子能够在短时间内吸附到SiO<sub>2</sub>表面, 受碳链和固体表面之间相互作用的影响形成表面活性剂分子层, 并依据吸附量的大小形成不同的聚集结构; 在水层足够厚的情况下, 由于有较多的表面活性剂分子吸附在固体表面, 从而形成带有疏水核心的半胶束结构; 计算得到的成对势表明极性头与钠离子或水分子之间的结合或解离与二者之间的能垒有关, 解离能垒远大于结合能垒, 引起更多Na<sup>+</sup>聚集在极性头周围而只有少数Na<sup>+</sup>存在于溶液中; 无论气液还是固液界面, 极性头均伸向水相, 与水分子形成不同类型的氢键. 模拟表明, 分子动力学方法可以作为实验的一种补充, 为实验提供必要的微观结构信息.

关键词: 固液界面 阴离子表面活性剂 分子动力学模拟

收稿日期 2009-02-02 修回日期 2009-03-20 网络版发布日期 2009-04-09

通讯作者: 苑世领 Email: shilingyuan@sdu.edu.cn

### 本刊中的类似文章

1. 朱王步瑶; 杨百勤. 碳氟链与碳氢链表面活性剂在固液界面上的吸附[J]. 物理化学学报, 1995, 11(01): 15-19
2. 王育煌; 张强; 刘朝阳; 黄荣彬; 郑兰荪. 脉冲激光溅射下固液界面生长的碳纳米管及其机理初探[J]. 物理化学学报, 1996, 12(10): 905-909

扩展功能

本文信息

PDF(2007KB)

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

▶ 固液界面

▶ 阴离子表面活性剂

▶ 分子动力学模拟

本文作者相关文章

▶ 宋其圣

▶ 郭新利

▶ 苑世领

▶ 刘成卜