

Gd 掺杂和 Gd/N 共掺杂 TiO₂ 光催化剂的制备及其光催化性能研究

蒋 乐,魏 琪,周 彬,汪 洋

(浙江理工大学理学院,杭州 310018)

摘 要:采用溶胶凝胶法分别制备 Gd 掺杂和 Gd/N 共掺杂纳米 TiO₂ 光催化剂,用 XRD、TEM、SEM 等手段表征 TiO₂ 光催化剂的形貌组织,用 UV-Vis DRS、PL 测试其光学性能。研究 Gd 掺杂量和 Gd/N 共掺杂量分别对二氧化钛在紫外和可见光下降解甲基橙性能的影响并分析其机理。结果表明:1.5%Gd 掺杂 TiO₂ 经 7.6 h 紫外线照射下对甲基橙降解率达到 100%,0.5%Gd、8.0%N 共掺杂的 TiO₂ 经 7.6 h 可见光照射下对甲基橙降解率达到 68.4%。

关键词: TiO₂; 可见光降解; 溶胶凝胶法; Gd/N 共掺杂

中图分类号: O643.36

文献标志码: A

文章编号: 1673-3851 (2017) 01-0152-07

0 引 言

TiO₂ 因为具有氧化还原能力强、化学稳定性好、无污染和成本低廉等优点,在光催化和环保领域有广泛的应用^[1]。但 TiO₂ 光催化剂还存在着一些不利因素阻碍其多方面应用。一方面是由于锐钛矿 TiO₂ 禁带宽度比较大(3.2 eV),仅能吸收波长小于 387 nm 的紫外光,太阳能利用率低(紫外光只占 5%),另一方面一般方法制备的 TiO₂ 颗粒尺寸较大,表面积较小,光催化速率较低,这些不利因素严重限制 TiO₂ 的应用和推广^[2]。

为提高 TiO₂ 量子效率,许多研究者使用稀土元素对 TiO₂ 进行掺杂改性。由于稀土元素具有独特的 4f 电子结构,比如 Gd³⁺ 掺杂能够降低光生 e⁻/h⁺ 复合速率,提高量子效率,抑制由锐钛矿向金红石转变,减小晶粒尺寸,从而可以提高纳米 TiO₂ 光催化活性^[3]。El-Bahy 等^[4] 研究镧系元素(La, Nd, Sm, Eu, Gd 和 Yb)掺杂 TiO₂ 的光催化活性,其研究结果显示 Gd 掺杂的 TiO₂ 降解率达到 91.8%,比 La 掺杂和 Eu 掺杂 TiO₂ 降解率高 1.8%,Gd 掺杂后 TiO₂ 的带隙较窄,晶粒尺寸较小,表面积和孔隙体积都较大。另一方面,研究者们发现非金属元素特别是

氮元素掺杂不但可以降低禁带宽度,而且还不影响光催化效率。有学者通过 C⁴⁻、N³⁻、F⁻、S²⁻ 和 P³⁻ 对锐钛矿型 TiO₂ 中 O²⁻ 取代进行密度函数理论计算,计算结果表明:N 取代有效,N(2p)轨道能级能够与 O(2p)轨道能级杂化,致使材料禁带宽度变窄^[5]。

Gd 元素对 TiO₂ 光催化剂的改性主要有 Gd 掺杂 TiO₂, Gd/N 共掺杂 TiO₂。用溶胶凝胶法制备掺杂量易控制,制备 TiO₂ 催化剂方法简易,因此,采用溶胶凝胶法制备 Gd 掺杂, Gd/N 共掺杂 TiO₂ 光催化剂,并在此基础上研究 Gd 掺杂量对 TiO₂ 在紫外和可见光条件下光催化性能的影响及其机理分析,从而提高 Gd/N 共掺杂 TiO₂ 光催化剂在紫外线可见光条件下对甲基橙的降解效率。

1 试 验

1.1 实验材料

乙酰丙酮(C₅H₈O₂, 分析纯,天津市科欧密化学试剂有限公司),六水合硝酸钆(Gd(NO₃)₃·6H₂O, 分析纯,99%,阿拉丁公司),钛酸四丁酯(Ti(OC₄H₉)₄, 分析纯,99%,阿拉丁),无水乙醇(C₂H₅OH, 分析纯,99.7%,杭州高晶精细化工有限公司),尿素(CO(NH₂)₂, 化学纯,天津市博迪化工

有限公司), 纳米 TiO₂ (25 nm 级锐钛矿 TiO₂, 分析纯, 阿拉丁公司)。

1.2 TiO₂、Gd-TiO₂、Gd/N-TiO₂ 光催化剂的制备

用溶胶凝胶法制备 TiO₂ 光催化剂, 首先取 10 mL 钛酸四丁酯加入 20 mL 乙醇中, 800 r/min 搅拌 30 min, 再加 2 mL 乙酰丙酮, 搅拌 40 min 得到溶液 A。其次取 15 mL 水加入 23.3 mL 乙醇中配成溶液 B。接下来再将 A 溶液快速加入到 B 溶液, 静置 1 min 待白色混浊变成透明的黄色溶液, 再经超声分散 10 min 得到溶液 C。然后将溶液 C 陈化 6 h 后转移到水浴锅中保持 95 ℃加速溶胶蒸发, 直到溶胶变成恒重的小碎块干凝胶, 再将干凝胶用研钵研成粉末状。最后将粉末转移到马弗炉中保持 5 ℃/min 的升温速度, 升到 450 ℃, 并保持 2.5 h, 关掉马弗炉, 然后随炉冷却 24 h 后取出制得 TiO₂ 光催化剂。Gd-TiO₂ 的制备方法是在 B 溶液中加入一定量六水合硝酸钆, 0.1% Gd-TiO₂ 在 B 溶液中加入 0.0132 g 六水合硝酸钆, 其他掺杂量的 Gd-TiO₂ 分别在其 B 溶液中加入相应比例的六水合硝酸钆, 其他步骤不变。Gd/N-TiO₂ 的制备方法是在 B 溶液中加入一定量六水合硝酸钆和尿素其他步骤不变。

1.3 TiO₂ 形貌表征及光学性能测试

采用 X 射线多晶粉末衍射仪 (瑞士 Thermo ARL 公司 XTRA 型) 检测纳米 TiO₂ 晶型, 计算晶粒尺寸。使用场发射扫描电镜 (日立 MYM4800) 检测纳米 TiO₂ 的晶粒尺寸、形貌及负载区域密集程度。用紫外分光光度计 (日立 U-3900H 型) 分别分析纳米 TiO₂ 的禁带宽度和甲基橙的吸光度, 用荧光分光光度计 (日立 F7000 型) 测试 TiO₂ 的电子-空穴复合率。

1.4 TiO₂ 光催化性能测试

在 TiO₂ 紫外光催化降解过程中使用高压汞灯 (季光牌, 300 W, 圆柱形, 长度为 30 cm) 作为紫外光源, 用铁架台固定灯管并保持灯管垂直于桌面, 灯管底部距离桌面 16 cm, 保持在灯管下面的中心对称放置 4 个 200 mL 烧杯, 在每个烧杯中加入浓度为 10 mg/L 60 mL 的甲基橙及 0.3 g TiO₂ 光催化剂, 并使 TiO₂ 催化剂均匀分布在烧杯底部, 经紫外线分别照射 7.6 h 后, 用紫外分光光度计测出降解后的甲基橙的吸光度。在可见光催化降解过程中使用白炽灯 (世林照明公司 200 W 白炽灯), 可见光灯泡保持竖直, 在灯泡下面的中心对称放置 2 个 200 mL 烧杯。每个烧杯中加入 60 mL 浓度为 10 mg/L 的

甲基橙和 0.5 g TiO₂ 光催化剂, 并控制 TiO₂ 催化剂均匀分布在烧杯底部, 经可见光照射 7.6 h 后。用紫外分光光度计测出降解后的甲基橙的吸光度。按下式计算甲基橙的降解率 β 。

$$\beta/\% = \frac{C_0 - C_t}{C_0} = \frac{A_0 - A_t}{A_0} \times 100 \quad (1)$$

其中: C_0 为甲基橙初时刻初始浓度, mg/L; C_t 为 t 时刻滤液中甲基橙浓度, mg/L; A_0 为初时刻甲基橙的吸光度; A_t 为 t 时刻甲基橙甲基橙的吸光度。

2 结果与讨论

2.1 TiO₂ 的结构分析和形貌表征

2.1.1 TiO₂ 能谱分析

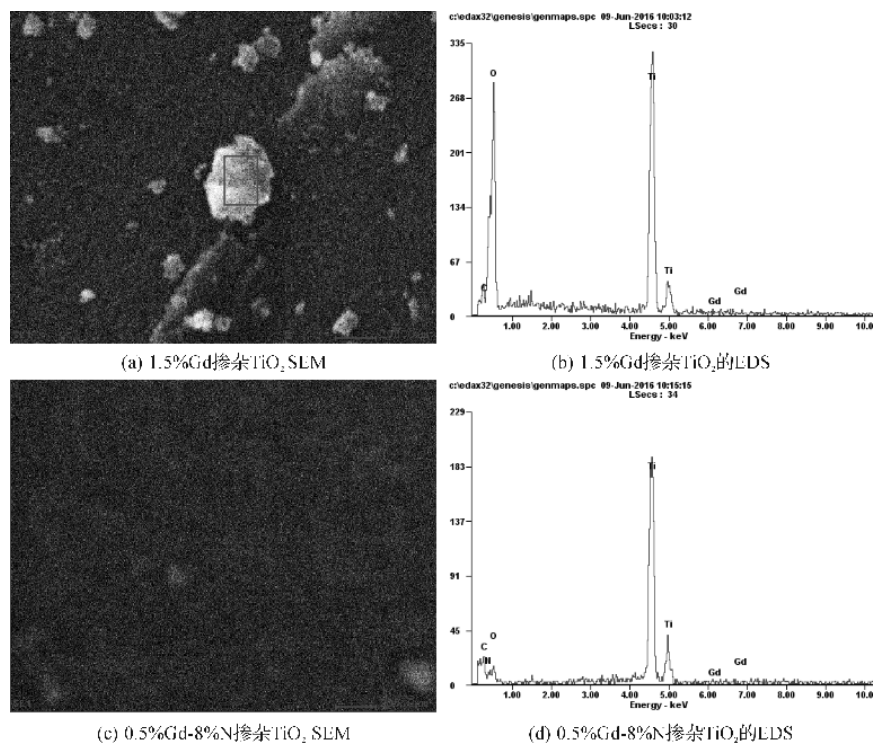
图 1(a) 是 1.5% Gd 掺杂 TiO₂ SEM 图像, 图 1(b) 是选取图 1(a) 方框区域中的能谱图, 从图 1(b) 中可以看到 Gd 的峰, 说明 Gd 已经掺杂到 TiO₂ 中了。1.5% Gd 掺杂 TiO₂ 和 0.5% Gd、8% N 共掺杂 TiO₂ 的各元素含量分别见表 1 和表 2, 由表 1 中 Gd 原子百分数除以 Ti 原子百分数计算能得到 Gd 原子占 Ti 原子的 1.6%, 与实际掺杂量 1.5% 很接近。图 1(c) 是 0.5% Gd、8.0% N 共掺杂 TiO₂ SEM 图像, 图 1(d) 是选取图 1(c) 方框区域的能谱图, 从图 1(d) 中可以看到 Gd 和 N 的峰, 说明 Gd、N 元素都掺杂到 TiO₂ 中了。由表 2 中 Gd、N 原子百分数分别除以 Ti 原子百分数计算得到 Gd 掺杂量为 0.57%, N 掺杂量为 9.6% 与实际 Gd 掺杂量 1.5% 和 N 掺杂量 8.0% 很接近。

表 1 1.5% Gd 掺杂 TiO₂ 各元素量

元素	质量含量 %	原子含量 %
C	26.76	43.24
O	34.40	41.74
Ti	36.27	14.70
Gd	2.57	0.32

表 2 0.5% Gd、8% N 共掺杂 TiO₂ 的各元素含量

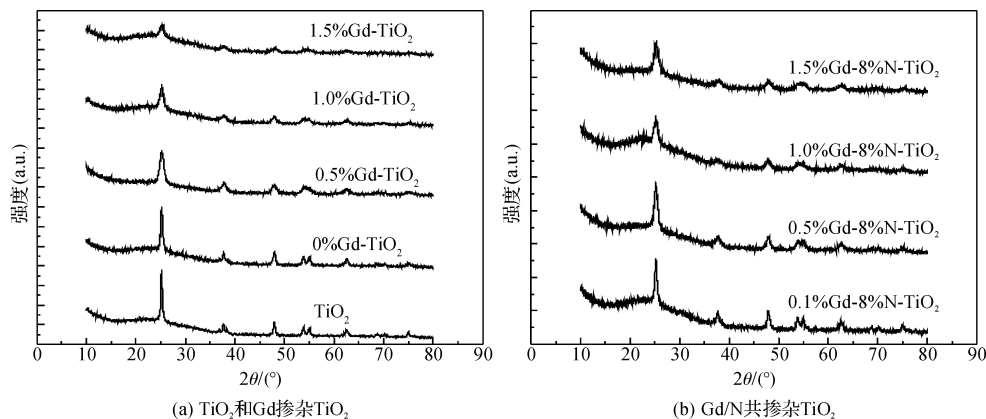
元素	质量含量 %	原子含量 %
C	09.21	24.13
O	10.28	20.21
Ti	76.89	50.49
Gd	1.45	0.29
N	2.17	4.87

图1 TiO₂ 光催化剂的SEM和EDS图谱

2.1.2 XRD 分析

图2是Gd掺杂和Gd/N共掺杂TiO₂ XRD图谱。由图2(a)可以看出在450℃煅烧2.5h后TiO₂都是锐钛矿晶型,未能检测出Gd₂O₃的峰,但是可以从图1中可以看出Gd元素已经掺杂到TiO₂中了。这可能是由于Gd₂O₃以小团簇的形式分散在TiO₂的晶格间隙,并没有形成较大晶粒。由Scherrer公式计算TiO₂, 0.1%Gd-TiO₂, 0.5%Gd-TiO₂, 1.0%Gd-TiO₂, 1.5%Gd-TiO₂的晶粒尺寸分别为20.7、19.3、13.5、10.0 nm和8.7 nm。随着Gd掺杂量的增加,TiO₂的晶粒尺寸越来越小,这是因为Gd³⁺和Ti⁴⁺的离子半径分别为0.094 nm和0.068 nm,Gd³⁺的离子半径明显大于Ti⁴⁺的离子半径,所以Gd³⁺很难进入TiO₂晶格内部,只是在

TiO₂晶格界面上的Ti⁴⁺取Gd晶格中的Gd³⁺,形成Gd—O—Ti键或者在晶格间隙形成Gd₂O₃,这些都会抑制TiO₂的成核作用使晶格发生畸变,造成晶格缺陷和晶粒尺寸减小,导致衍射峰变宽,衍射强度降低^[6]。随着Gd掺杂量的增加,这种抑制作用越明显,所以晶粒尺寸越来越小。图2(b)中是0.1%Gd-8.0%N-TiO₂, 0.5%Gd-8.0%N-TiO₂, 1.0%Gd-8.0%N-TiO₂, 1.5%Gd-8.0%N-TiO₂的XRD图谱,其晶粒尺寸分别为14.6、10.0、8.3 nm和8.2 nm。虽然有N元素的掺杂,但总体趋势还是随着Gd掺杂量的增加,TiO₂晶粒尺寸越来越小,Gd的影响仍然占主导地位。N元素的掺杂在一定程度上抑制晶体颗粒的长大,产生晶格畸变,从而抑制TiO₂晶粒的长大^[7]。

图2 TiO₂ 光催化剂的XRD图谱

2.1.3 TEM 分析

图 3 为纳米 TiO₂ 光催化剂 TEM 图像。由图 3(a₁)为 1.5%Gd 掺杂 TiO₂ 低分辨率 TEM, 可以看到 TiO₂ 团聚现象比较严重, 晶粒为不规则颗粒状结构。图 3(a₂)是 1.5%Gd 掺杂 TiO₂ 高分辨率 TEM, 从图中可以看出晶粒尺寸约为 20 nm 左右, 这与 XRD 测量并计算得到的 20.7 nm 很接近, 并且其边缘地区可能存在纳米片的结构。图 3(b₁)为 0.5%Gd-8%N 掺杂 TiO₂ 低分辨率 TEM, 图 3(b₂)为 0.5%Gd-8%N 掺杂 TiO₂ 高分辨率 TEM, 由这两张图中可以看出晶粒尺寸约为 8 nm, 与 XRD 计算出 1.5%Gd 掺杂 TiO₂ 的晶粒尺寸 8.7 nm 很接近, 由此得出 Gd 的掺杂强烈抑制 TiO₂ 晶粒的生长, 减少团聚。图 2(c₁)为阿拉丁公司 25 nm 级的 TiO₂ TEM, 图 2(c₂)为其高分辨率 TEM, 由图中可以看出工业 TiO₂ 分散较好, 颗粒接近与球型。

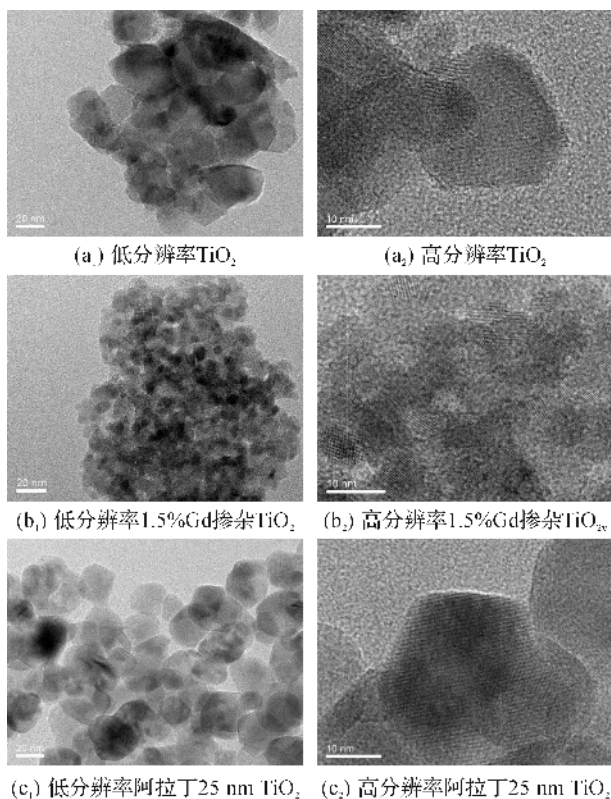


图 3 不同纳米 TiO₂ 光催化剂 TEM

2.1.4 荧光光谱(PL)分析

图 4 是 Gd 掺杂和 Gd/N 共掺杂二氧化钛光催化剂分别在 330 nm 紫外光激发下产生的荧光发射

光谱。从图 4 中可以看出 Gd 掺杂 TiO₂ 的荧光强度高于 TiO₂, 这是因为 Gd 掺杂量超过一定的量, 造成 Gd₂O₃ 附着在 TiO₂ 表面, 阻碍能量的传递, 成为电子-空穴复合中心, 使得电子复合率变低, 但 1.5%Gd 掺杂 TiO₂ 电子复合率在 Gd 掺杂 TiO₂ 中较低, 这与前面理论相反, 这可能是因为 Gd 掺杂减小晶粒尺寸, 电子和空穴易扩散到表面, 降低电子-空穴的复合率。有学者认为 Gd 掺杂量高于 0.02% 时电子和空穴的复合率反而会增大^[8]。Gd/N 共掺杂使得电子复合率总体减小, 这可能是 N 掺杂增加缺陷, 捕获电子-空穴对, 降低复合率导致的。另外 1.5%Gd 掺杂 TiO₂ 的荧光发射强度比 TiO₂ 高 27.7%; 0.5%Gd、8.0%N 共掺杂 TiO₂ 比 TiO₂ 高 30.1%, 由于它们的电子空穴复合率较低, 使它们分别在紫外光和可见光条件下光催化效率增强。

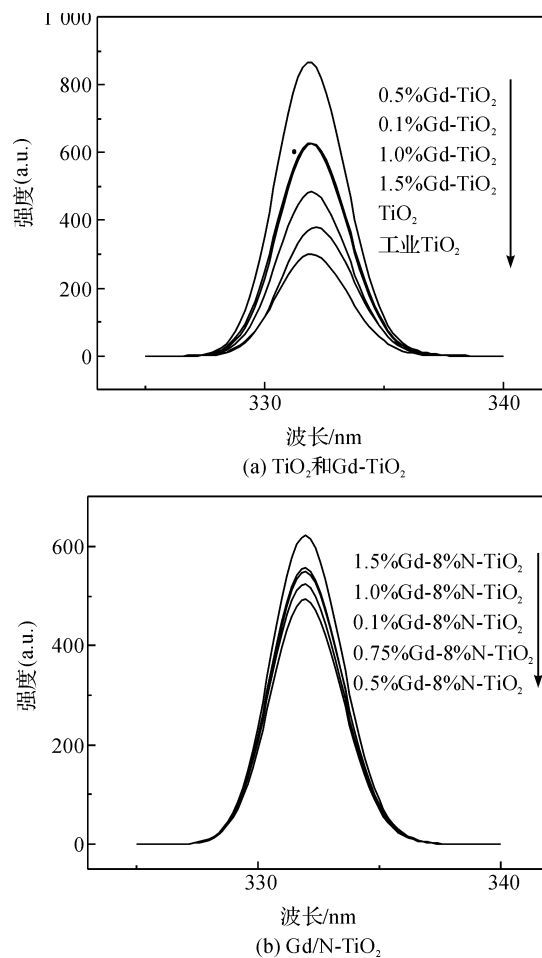


图 4 不同样品的荧光光谱

2.1.5 紫外可见漫反射光谱分析

图 5 所示为 TiO₂ 紫外-可见漫反射光谱。由图 5 为 Gd 掺杂和 Gd/N 共掺杂 TiO₂ 粉末的紫外可见

漫反射光谱图通过 Kubelka-Munk 转换曲线获得 TiO_2 禁带宽度大小。从图 5(a)中可以看出制备的 TiO_2 禁带宽度为 3.04 eV。0.1%、0.5%、1.0%、1.5%Gd 掺杂的 TiO_2 禁带宽度趋于一致,为 3.15 eV,比 TiO_2 制备的禁带宽度增大 0.11 eV,这使得 Gd 掺杂 TiO_2 产生的电子-空穴对氧化还原能力增强。有学者也做出 0.5%Gd 掺杂 TiO_2 禁带宽度相

对 TiO_2 变大,吸收蓝移。这是由于 Gd 掺杂使得 TiO_2 的晶粒尺寸变小,从而禁带宽度发生蓝移^[9]。这也使得催化剂产生的电子-空穴对的氧化还原能力变强。在 Gd 掺杂 TiO_2 的基础上再掺杂 N 并未使得 Gd 掺杂 TiO_2 禁带宽度明显减小,禁带宽度变化在误差范围内,而且 Gd/N 掺杂的二氧化钛的禁带宽度都趋于一致,为 3.15 eV。

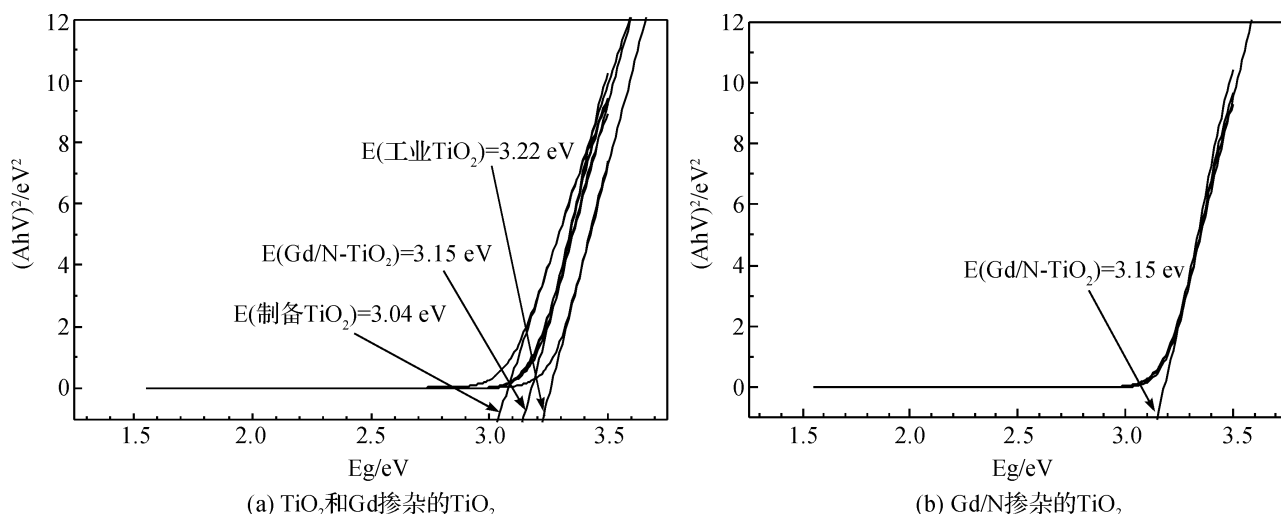
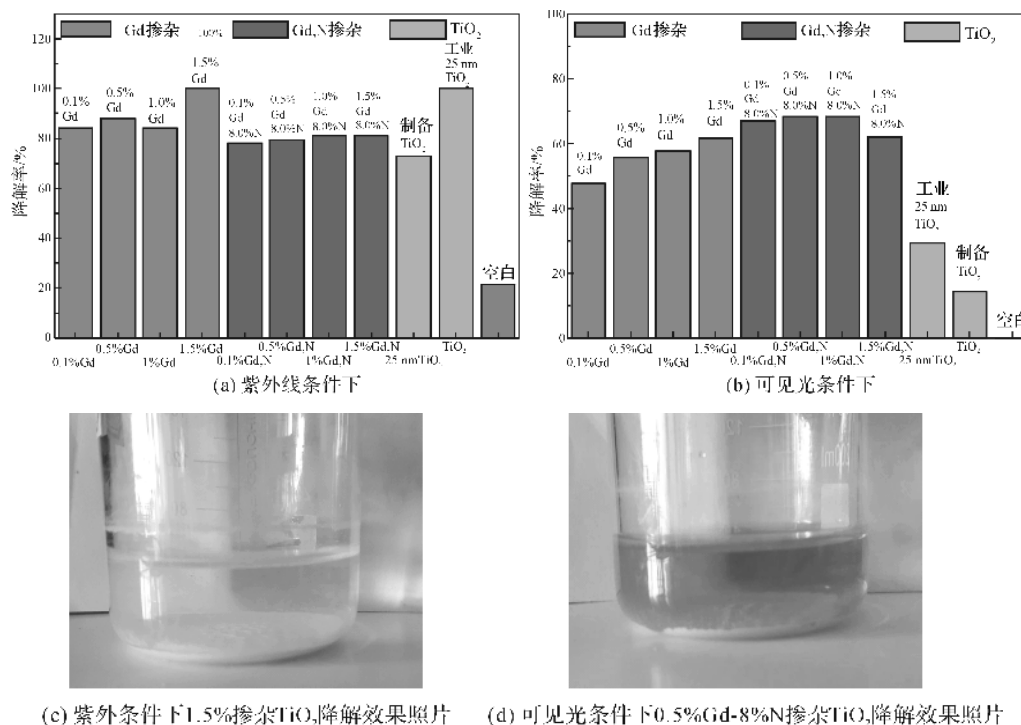


图5 样品紫外可见漫反射图谱

2.2 TiO_2 光催化剂的降解性能

图 6(a)是 Gd 掺杂和 Gd/N 共掺 TiO_2 经紫外线照射 7.6 h 对甲基橙的降解率柱状图,由图中可以看出在制备的二氧化钛中 1.5% Gd 掺杂的 TiO_2 降解率较高,7.6 h 降解率为 100%,图 6(c)为其降解效果图。1.5%Gd 掺杂二氧化钛降解率比其他制备的 TiO_2 高的原因是 1.5%Gd 掺杂量较多,极大地抑制晶粒生长,减小晶粒尺寸,增大比表面积,另一方面 1.5%Gd 掺杂 TiO_2 禁带宽度较大,为 3.15 eV,氧化还原能力较强,而且电子-空穴复合率较低,所以在紫外条件下降解效果较好。阿拉丁公司标准 25 nm TiO_2 在紫外条件下对甲基橙降解率和 1.5%Gd 掺杂 TiO_2 的降解率相同,6h 都达到 100%,这是因为其团聚度较低,分散较好,导致比表面积较大,电子复合率低,而且其禁带宽度也较大,氧化还原能力也较强^[10]。图

6(b)是 Gd 掺杂和 Gd/N 共掺 TiO_2 经可见光照射 7.6 h 对甲基橙的降解率柱状图。从图 6(b)中可以看出 0.5%Gd-8.0%N 掺杂 TiO_2 比 1.5%Gd 掺杂 TiO_2 对甲基橙的降解率要高 8.4%,图 6(d)为其降解效果图。有学者认为 N 掺杂降低 TiO_2 禁带宽度很少, N_{2p} 和 O_{2p} 没有轨道杂化,而是在价带上方形成一个独立的窄 N_{2p} 能带,这个窄 N_{2p} 能带对可见光的敏化产生响应,引起可见光响应^[11-12]。实验结果(Gd/N 共掺 TiO_2 和 Gd 掺杂 TiO_2 禁带宽度相同,但 0.5%Gd-8.0%N 掺杂 TiO_2 比 1.5%Gd 掺杂 TiO_2 对甲基橙的降解率要高 8.4%,这明显增强了光催化性能)也验证上述理论。0.5%Gd、8.0%N 掺杂 TiO_2 在所有 Gd/N 共掺 TiO_2 中荧光发射强度较低,只比制备的 TiO_2 高 30.1%,电子-空穴复合率较低,可见光下降解率较好,7.6 h 达到 68.4%。

图 6 Gd 掺杂 TiO₂ 和 Gd/N 共掺杂 TiO₂ 光催化剂降解性能

3 结 论

采用溶胶-凝胶法制备了 Gd 掺杂和 Gd/N 共掺杂的 TiO₂ 光催化剂。Gd 掺杂 TiO₂ 随着 Gd 掺杂量的增加, TiO₂ 晶粒尺寸逐渐减小, 在紫外条件下光催化效率逐渐增加, TiO₂ 光催化剂的 Gd 掺杂量从 0.1% 增加到 1.5%, 在紫外条件下照射 7.6 h 降解率为 100%, 与工业 TiO₂ 降解率相同, Gd 掺杂使得 TiO₂ 禁带宽度增大至 3.11 eV。1.5%Gd 掺杂 TiO₂ 在紫外条件下光催化效率较高, 7.6 h 对甲基橙的降解率为 100%, 晶粒尺寸减小到 8.7 nm, 其荧光发射强度比制备的 TiO₂ 增加 27.7%。

Gd/N 共掺杂 TiO₂ 相比 Gd 掺杂 TiO₂ 的禁带宽度没有明显改变, 在误差范围内, Gd/N 共掺杂的 TiO₂ 在可见光下降解率明显高于 TiO₂, Gd/N 共掺杂 TiO₂ 均高于 Gd 掺杂 TiO₂, 0.5%Gd-8.0%N 掺杂 TiO₂ 比 1.5%Gd 掺杂 TiO₂ 要高 8.4%, 在可见光条件下 7.6 h 对甲基橙降解率达到 68.4%, 比工业 TiO₂ 降解率高 34.9%, 其荧光发射强度比制备的 TiO₂ 增加 30.1%。

参考文献:

- [1] 何东林, 黄洪, 钟理. TiO₂ 可见光催化研究进展及其应用前景[J]. 化工进展, 2015(A01):104-109.
- [2] 王城英, 姜洪泉, 李井申, 等. TiO₂-yNx 纳米光催化剂的制备及其可见光响应机理[J]. 应用化学, 2010, 27(12):

1413-1418.

- [3] LUO S, LIU S X. Preparation and characterization of gadolinium-doped TiO₂/Activated carbon fibre composite [J]. Chinese J Appl Chem, 2011, 28(1):66-71.
- [4] EL-BAHY Z M, ISMAIL A A, MOHAMED R M. Enhancement of titania by doping rare earth for photodegradation of organic dye (Direct Blue) [J]. J Hazard Mater, 2009, 166(1):138-143.
- [5] ASAH I R, OHWAKI T, AOKI K, et al. Visible-light photocatalysis in nitrogen-doped titanium oxides [J]. Science, 2001, 293(5528):269-271.
- [6] 石建稳, 郑经堂, 胡燕, 等. La 掺杂纳米 TiO₂ 的制备及光催化性能研究[J]. 工业催化, 2007, 15(1):52-53.
- [7] 于洋洋, 于美燕, 张钊, 等. 氮掺杂 TiO₂ 粉体的制备及掺杂机理研究[J]. 无机化学学报, 2013, 29(8):1657-1662.
- [8] 卢旭东, 姜承志, 苏会东. 低量 Gd³⁺ 掺杂 TiO₂ 粉体的制备及催化活性[J]. 环境科学与技术, 2008, 31(8):26-28, 43.
- [9] 李凤丽, 彭绍琴, 李越湘. Gd³⁺ 掺杂纳米 TiO₂ 的制备及性能[J]. 有色金属, 2007(3):41-45.
- [10] 曾爱香. 酸对 TiO₂ 结构和光催化性能的影响[J]. 长沙理工大学学报, 2014, 11(1):88-92.
- [11] 秦好丽, 古国榜, 柳松, 等. 溶胶凝胶法制备氮掺杂二氧化钛及其可见光活性的研究[J]. 太阳能学报, 2007, 28(4):363-367.
- [12] 秦好丽, 古国榜, 柳松, 等. 尿素为氮源制备氮掺杂二氧化钛及其光催化性[J]. 华南理工大学学报(自然科学版), 2006, 34(12):78-82.

Preparation of Gd-doped and Gd/N-codoped TiO_2 Photocatalyst and Its Photocatalytic Performance Research

JIANG Le, WEI Qi, Zhou Bin, WANG Yang

(College of Materials and Textiles; b. School of Science, Zhejiang Sci-Tech University, Hangzhou 310018, China)

Abstract: Gd-doped and Gd/N-codoped nano TiO_2 photocatalysts were prepared by sol-gel method. The morphology and microstructure of TiO_2 photocatalyst were characterized by XRD, TEM and EDS. The optical properties were tested by UV-Vis DRS and PL. Influence of Gd and Gd-N doping on the TiO_2 performance degradation of methyl orange under uv light and visible light was studied and its mechanism was studied. The results showed that 1.5% Gd-doped TiO_2 for 7.6 h under uv light could degrade 100% of methyl orange; 8.0% Gd-0.5% N doped TiO_2 for 7.6 h under visible light irradiation could degrade 68.4% of methyl orange.

Key words: TiO_2 ; Visible light degradation; Sol-gel method; Gd/N-codoped

(责任编辑: 许惠儿)

(上接第 139 页)

The Effect of Hydrophobic Segment Structure on Liquid/Air Interface Structure of Anionic Fluorinated Surfactant: A Molecular Simulation Study

WU Pan, REN Tao, LI Jiachen, ZHANG Li

(School of Sciences, Zhejiang Sci-Tech University, Hangzhou 310018, China)

Abstract: Fluorinated surfactants play a key role in many fields, and all the applications are closely related to the absorption layer structure of fluorinated surfactants at the air/liquid interface. Therefore, this paper discussed the effect of hydrophobic segment structure on liquid/air interface structure of anionic fluorinated surfactant through molecular dynamics simulation. It is found that the length of fluorine-containing segment influences the interface structure of anionic surfactant PFOS. When the number of carbon atoms is 8, the surfactants form an ordered monomolecular adsorption layer at the interface. The fluorination degree on the hydrophobic segment plays a great role for PFOS segment layout orderliness at air/liquid interface and the angle distribution between hydrophobic tails and xy plane. When the fluorination degree is high, the monomolecular layer of surfactant has good orderliness at the interface. As the fluorination degree decreases, the orderliness of monomolecular layer of surfactant reduces and the surface activity also lowers.

Key words: air/liquid interface structure; fluorinated surfactants; molecular dynamics simulation; hydrophobic segment structure

(责任编辑: 许惠儿)