MOLECULAR DYNAMICS STUDY OF SODIUM DODECYLBENZENE SULFONATE ADSORPTION ON SINGLE-WALLED CARBON NANOTUBES

Manaswee Suttipong

A Thesis Submitted in Partial Fulfilment of the Requirements
for the Degree of Master of Science
The Petroleum and Petrochemical College, Chulalongkorn University
in Academic Partnership with
The University of Michigan, The University of Oklahoma,
Case Western Reserve University, and Institut Français du Pétrole
2011

Thesis Title:	Molecular Dynamics Study of Sodium Dodecylbenzene Sulfonate Adsorption on Single-Walled Carbon Nanotubes
By:	Manaswee Suttipong
Program:	Petroleum Technology
Thesis Advisors:	Asst. Prof. Boonyarach Kitiyanan
	Asst. Prof. Alberto Striolo

Accepted by The Petroleum and Petrochemical College, Chulalongkorn University, in partial fulfilment of the requirements for the Degree of Master of Science.

..... College Dean

(Asst. Prof. Pomthong Malakul)

Thesis Committee:

B. Kitiyanan

(Asst. Prof. Boonyarach Kitiyanan)

Alberto Striolo

(Asst. Prof. Alberto Striolo)

Kitipat Siemanond

(Asst. Prof. Kitipat Siemanond)

N. Chaiyut

(Dr. Nattawut Chaiyut)

บทคัดย่อ

มนัสวี สุทธิพงษ์ : การศึกษาการดูดซับของสารลดแรงตึงผิวโซเดียมโดเดซิลเบนซีน-ซัลโฟเนตบนท่อคาร์บอนนาโนผนังชั้นเดียวโดยวิธีการจำลองเชิงโมเลกุล (Molecular Dynamics Study of Sodium Dodecylbenzene Sulfonate Adsorption on Single-Walled Carbon Nanotubes) อ. ที่ปรึกษา : ผศ. ดร. บุนยรัชต์ กิติยานันท์ และ ผศ. ดร. แอลเบอร์โต สตริโอโล 61 หน้า

การดัดแปลงพื้นผิวของท่อคาร์บอนนาโนผนังเดี่ยว (SWNTs) ด้วยกระบวนการดูดซับสารลดแรงตึงผิว (Surfactants) สามารถทำให้ท่อคาร์บอนนาโนกระจายตัวในน้ำและแยกออกจากกลุ่มมัดท่อคาร์บอนนาโน (SWNT bundles) ได้ แต่อย่างไรก็ตาม กลไกในระดับโมเลกุลของกระบวนการดูดซับสารลดแรงตึงผิวยังไม่เป็นที่แน่ชัด วิธีการจำลองเชิงโมเลกุล (Molecular dynamics simulations) ช่วยทำให้เข้าใจถึงโครงสร้างและพฤติกรรมการจัดเรียงตัวของสารลดแรงตึงผิวในระดับโมเลกุลได้ดีขึ้น ทั้งนี้โครงสร้างการจัดเรียงตัวของสารลดแรงตึงผิวบนท่อคาร์บอนนาโนมีอิทธิพลต่อพลังงานแรงศักย์เฉลี่ย (Effective potential of mean force) ระหว่างคู่ท่อคาร์บอนนาโน งานวิจัยนี้ได้ศึกษาพฤติกรรมการจัดเรียงตัวในระดับโมเลกุลของสารลดแรงตึงผิวบนท่อคาร์บอนนาโนผนังเดี่ยวชนิดอาร์มแชร์ขนาด (6,6), (12,12), และ (20,20) โดยใช้วิธีการจำลองเชิงโมเลกุล ซึ่งในงานวิจัยนี้สารลดแรงตึงผิวโซเดียมโดเดซิล เบนซีนซัลโฟเนตปริมาณ 1.0 และ 2.8 โมเลกุลต่อพื้นที่ผิวท่อคาร์บอนนาโน อันประกอบด้วยหมู่วงแหวนเบนซีนซัลโฟเนตตำแหน่งที่ 5 หรือ 12 ของอะตอมคาร์บอนในสายโซ่โดเดซิลได้ถูกนำมาศึกษา จากผลการวิจัยพบว่า โครงสร้างโมเลกุลของสารลดแรงตึงผิวมีอิทธิพลต่อพฤติกรรมการจัดเรียงตัวของสารลดแรงตึงผิวบนท่อคาร์บอนนาโน ซึ่งสามารถนำไปใช้ระบุคุณสมบัติของสารลดแรงตึงผิวที่ควบคุมอันตรกิริยาระหว่างท่อคาร์บอนนาโนได้

ABSTRACT

5273006063: Petroleum Technology Program
Manaswee Suttipong: Molecular Dynamics Study of Sodium Dodecylbenzene Sulfonate Adsorption on Single-Walled Carbon Nanotubes
Thesis Advisors: Asst. Prof. Boonyarach Kittiyanan and Asst. Prof. Alberto Striolo 61 pp.
Keywords: Carbon nanotubes/ Sodium dodecylbezene sulfonate/ Self-assembly/ Molecular dynamics simulations

Stabilizing single-walled carbon nanotubes (SWNTs) monodispersed in diameter and chirality in aqueous media remains elusive. Surfactants have proven useful in deploying ultra-centrifugation techniques for separating carbon nanotubes, but the molecular mechanism responsible for the effectiveness for such technique remains not fully understood. Based on recent molecular simulation results, it appears that the morphology of self-assembled surfactant aggregates on carbon nanotubes strongly affects the effective potential of mean force between pairs of interacting carbon nanotubes. In the present work, the effect of surfactant molecular structure on the properties of aqueous surfactant self-assembled aggregates was investigated using all-atom molecular dynamics simulations. To quantify how the surfactant molecular structure affects self-assembly, sodium dodecylbenzene sulfonate (SDBS) surfactants with the headgroup located either on the fifth or on the twelfth carbon atom along the dodecyl tail were considered. All simulations were conducted at room conditions for different surface coverages on (6,6), (12,12), and (20,20) SWNTs. The results suggest that the surfactant molecular structure strongly affects the packing of surfactants on the nanotubes, therefore modulating effective nanotube-nanotube interactions. In qualitative agreement with experiments, no strong effects due to nanotube diamerter were observed.

ACKNOWLEDGEMENTS

I would like to take this opportunity to thank a number of people and organizations. Without their help, this thesis could not be very fruitful.

First and foremost, I sincerely appreciate Asst. Prof. Boonyarach Kitiyanan and Asst. Prof. Alberto Striolo for providing me the opportunity to do this research at the University of Oklahoma, their valuable guidance, support, encouragement, and patience throughout this work.

I am grateful to Asst. Prof. Kitipat Siemanond and Dr. Nattawut Chaiyut, for kindly serving on my thesis committee.

I would like to express my thanks to Dr. Naga Rajesh Tummala and all Ph.D. students in Asst. Prof. Striolo's group at the University of Oklahoma for giving me so much help in this work.

I would like to acknowledge the OU Supercomputing Center for Education and Research (OSCER) for generous allocations of computing time and DOE's Experimental Program to Stimulate Competitive Research (DOE EPSCoR) for financial support in USA.

This thesis work is funded by the Petroleum and Petrochemical College and the National Center of Excellence for Petroleum, Petrochemicals, and Advanced Materials, Thailand.

I also would like to thanks all my friends and all PPC's staffs who gave me support and encouragement.

Finally, I would like to express my sincere gratitude to thank my family especially, my mother, for showing me the joy of intellectual pursuit ever since I was a child, for standing by me and for understanding every single part of my mind.

TABLE OF CONTENTS

CHAPTER PAGE

CHAPTER **PAGE**

LIST OF TABLES

LIST OF FIGURES

FIGURE **PAGE**

FIGURE **PAGE**

FIGURE **PAGE**