

عنوان مقاله:

شبیه سازی دینامیک مولکولی پایداری نانو ذرات کلوئیدی طلا متصل شده به لیگاند در حضور و عدم حضور آب

محل انتشار:

دومین همایش ملی پژوهش های کاربردی در علوم شیمی، زیست شناسی و زمین شناسی (سال: 1393)

تعداد صفحات اصل مقاله: 6

نویسندگان:

شمیم یوسفی - دانشجو، دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر

سپیده امجد ایرانق - استاد مشاور، دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر

محمود رحمتی - استاد مشاور، دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر

بهرام ناصرنژاد - استاد، دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر

خلاصه مقاله:

شبیه سازی دینامیک مولکولی به منظور بررسی چگونگی پایداری نانو ذرات طلا که به لیگاند $S-(CH_2)_5-(CH_3)$ متصل شده اند، در حضور و عدم حضور مولکول های آب به عنوان محیط پراکندگی این نانو ذرات مورد مطالعه قرار گرفته است. در اتصال این لیگاند به نانو ذرات طلا، اتم های گوگرد به علت داشتن بار منفی و اتم های طلا به علت داشتن بار مثبت، اتصال این لیگاند را به نانو ذرات طلا ممکن می سازند. در بررسی میزان پایداری از محاسبات مربوط به تابع توزیع شعاعی (RDF)، مرکز جرم نانو ذرات (COM) و متوسط مربعات جابه جایی (MSD) استفاده گردید و از مقایسه نتایج محاسبات در یافتیم که حضور مولکول های آب، تاثیر چندانی بر روی پایداری کلوئیدی نانو ذرات طلا نداشته است.

کلمات کلیدی:

شبیه سازی دینامیک مولکولی، نانو ذرات طلا، لیگاند، پایداری کلوئیدی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/452708>

