سیویلیکا - ناشر تخصصی مقالات کنفرانس ها و ژورنال ها
گواهی ثبت مقاله در سیویلیکا
CIVILICA.com

عنوان مقاله:
شبیه سازی دینامیک مولکولی پیکربندی آب درون نانولوله مولیبدن دی سولفید

محل انتشار:
اولین کنفرانس ملی میکرو نانو فناوری (سال: 1397)

تعداد صفحات اصل مقاله: 8

نویسندگان:
زهره احدی - *گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه زنجان، زنجان، ایران*

جمال داودی - *گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه زنجان، زنجان، ایران*

محمد شادمان - *دانشگاه فنی حرفه ای ، ایران*

خلاصه مقاله:
بررسی تغییرات فیزیکی و ترمودینامیکی رفتار آب درون نانو لوله های ساخته شده از مولیبدن دی سولفات mos2 از بسیاری جهات دارای اهمیت است. در این پژوهش آب درون نانولوله mos2 16،16 با دو چگالی 0/7 و 0/98 g/cm3 در نظر گرفته شده است. ابتدا رفتار تعادل آب و نانو لوله در دمای 300k مورد بررسی قرار گرفت که به خوبی تعادل مشاهده شد. سپس به بررسی فرم گیری و لایه لایه شدن آب با دو چگالی 0/7و0/98 وg/cm3 درون نانولوله mos2 16.16 پرداخته شد که در چگالی 0/98 وg/cm3 لایه شدن آب با وضوح بیشتری مشاهده گردید مقایسه کمیت میانگین مربع جابجایی MSD برای آب درون نانولوله mos2 16.16با دو چگالی 0/7g/cm3 و0/98 نشان میدهد که درچگالی بالاترآب MSD شیب کمتری دارد و نظم بیشتری در ساختار به علت تشکیل لایه ها مشاهده شده است.

کلمات کلیدی:
نانولوله mos2 16.16_مدل آب TIP4P/2005_پتانسیل ربو، دینامیک مولکولی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

https://civilica.com/doc/807637