

## 金纳米颗粒周围水的结构和动力学性质的分子动力学模拟

杨振; 杨晓宁; 徐志军

南京工业大学化学化工学院, 材料化学工程国家重点实验室, 南京 210009

摘要:

采用经典的分子动力学模拟方法系统地研究了在常温条件下金纳米颗粒周围水的结构与动力学性质. 结果表明, 水分子在纳米颗粒附近形成了明显的多层结构. 同时随着径向距离的减小, 水分子的空间取向也从无序排列趋向于有序排列. 通过分析界面处不同水层中的均方位移及停留时间分布, 发现紧贴颗粒表面的第一和第二水层中的水分子表现出很低的扩散系数, 而第三和第四水层中的水分子则能够轻易地离开界面区域而进入主体相区域. 此外, 在界面处的每个水分子的氢键平均数要高于在主体相的平均值.

关键词: 纳米颗粒 水 分子动力学 结构 扩散 氢键

收稿日期 2008-06-24 修回日期 2008-07-29 网络版发布日期 2008-10-08

通讯作者: 杨晓宁 Email: yangxia@njut.edu.cn

### 本刊中的类似文章

1. 杨立平;涂伟霞.微波法合成纳米金胶体颗粒的调控研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(04): 513-516
2. 张士成;李春和;李星国.纳米氧化锌的粒度控制与表征[J]. 物理化学学报, 2004,20(08S): 902-905
3. 方丽梅;李志杰;刘春明;祖小涛.水热法制备Fe<sup>3+</sup>改性的SnO<sub>2</sub>纳米颗粒[J]. 物理化学学报, 2006,22(10): 1212-1216
4. 杨新伟, 张贵荣, 李永绣, 徐柏庆.单分散纳米金尺寸的分步晶种生长控制[J]. 物理化学学报, 2009,25(12): 2565-2569
5. 郑一雄;姚士冰;周绍民.Ni-Mo-B非晶态合金纳米颗粒的抗氧化性能研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(11): 1352-1356
6. 何平;沈兴海;高宏成.银纳米颗粒形成过程中的光致发光性质研究[J]. 物理化学学报, 2004,20(10): 1200-1203
7. 张庆敏;李彦;黄福志;顾镇南.聚氧乙烯类表面活性剂体系中银纳米颗粒的合成 [J]. 物理化学学报, 2001,17(06): 537-541
8. 李博;鲍超;施柏焯;川上友则;平松光夫.两种晶型酞菁氧钒纳米颗粒的制备及形成机理[J]. 物理化学学报, 2002,18(12): 1057-1061
9. 陶小军;李志伟;陈洪杰;张平余;张治军;吴志申;党鸿辛.一种制备镍纳米颗粒的新方法[J]. 物理化学学报, 2005,21(05): 569-572
10. 蒋彩云 翁晓磊 钱卫平.AuNPs/PNIPAM复合颗粒的制备及其温敏性质[J]. 物理化学学报, 2008,24(12): 2159-2164
11. 常国庆 郑曦 陈日耀 陈晓 陈力勤 陈震.同轴静电纺丝法在纳米中空TiO<sub>2</sub>纤维中填充Ag的应用[J]. 物理化学学报, 2008,24(10): 1790-1796
12. 郑一雄;姚士冰;周绍民.Ni-B非晶态合金电极上乙醇的电氧化及其动力学参数的测定[J]. 物理化学学报, 2008,24(09): 1643-1649
13. 王晓冬;仪桂云;董鹏;陈胜利.悬浮液气-液界面二元胶体颗粒的漂浮组装机理[J]. 物理化学学报, 2007,23(11): 1707-1713
14. 郝丽娟;李双艳;韩磊;黄杰;常津.一种新型磁性纳米基因载体的制备与表征[J]. 物理化学学报, 2007,23(12): 1857-1863
15. 付小锋;邹化民;韩俊波.超快激光激发下银/氧化钛纳米颗粒膜的光氧化[J]. 物理化学学报, 2007,23(06): 940-944
16. 曾伟;周海晖;英晓芳;曾庆良;胡伟亚;旷亚非.电极/反相微乳液体体系电沉积制备纳米金镀层[J]. 物理化学学报, 2007,23(05): 769-773
17. 朱诗国;唐珂;向娟娟;吕红斌;李小玲;聂新民;周后德;沈守荣;李桂源.生物荧光氧化硅纳米颗粒的研制与应用[J]. 物理化学学报, 2003,19(04): 311-314
18. 郭文静;孙磊;张平余;吴志申;张治军.微乳液中单分散银纳米颗粒的制备及抗磨性能[J]. 物理化学学报,

扩展功能

本文信息

PDF(796KB)

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

▶ 纳米颗粒

▶ 水

▶ 分子动力学

▶ 结构

▶ 扩散

▶ 氢键

本文作者相关文章

▶ 杨振

▶ 杨晓宁

▶ 徐志军

2007,23(03): 367-372

19. 于志辉;田 密;焦庆影;夏定国.Au-Pt双金属纳米颗粒在玻碳电极上的自组装[J]. 物理化学学报, 2006,22(08): 1015-1020
  20. 徐江,卓城之,蒋书运.纳米颗粒对Ni基复合镀渗层耐冲蚀性能的影响[J]. 物理化学学报, 2009,25(10): 1958-1966
  21. 王润涵,姜继森,胡鸣.反相微乳液助水热法可控合成FeNi<sub>3</sub>合金纳米结构[J]. 物理化学学报, 2009,25(10): 2167-2172
-