

Zusammenfassung

Es wurden Molekulardynamik-Simulationen (MD) zum einen von NaCl in Wasser und zum anderen von funktionalisierten Gold-Nanopartikeln in Wasser bei einer Temperatur von 300 K durchgeführt. Hierbei wurden variable NaCl Konzentrationen mit jeweils verschiedenen Kraftfeldern untersucht, um die Aggregation von Ionen zu beobachten und geeignete Kraftfeldparameter für Ionen zu identifizieren. Funktionalisierte Nanopartikel mit linearen und verzweigten Kohlenwasserstoffen unterschiedlicher Pfropfdichte ($d_f=1, 2/3$ und $1/3$), Kettenlänge ($(\text{CH}_2)_l$, $l=5, 11, 17$ und 23), Kettenart (linear oder verzweigt), Position der Verzweigung (4., 8. und 12.) sowie Art der Endgruppe (CH_3 , COO^- und NH_3^+) wurden modelliert, um diverse Phänomene auf mikroskopischer Ebene zu untersuchen. Durch einen Überschuss von Na^+ und Cl^- Ionen wurden die ionischen Reste der funktionalisierten Gold-Nanopartikel neutralisiert. Der Fokus wurde auf die Eindringtiefe des Wassers sowie der Ionen in die diffuse Hülle der Alkanthiole in Abhängigkeit der Pfropfdichte, Funktionalisierung und Kettenlänge gelegt. Des Weiteren wurde die Zugänglichkeit und relative Verfügbarkeit der Goldoberfläche für Wasser in Abhängigkeit der Propfdichte, Funktionalisierung und Kettenlänge studiert. Die Orientierung der Wassermoleküle innerhalb der Kohlenwasserstoffumgebung (von der Oberfläche des Goldkerns bis hin zu der terminalen Gruppe) und nahe der Endgruppen wurde dabei detailliert untersucht. Ebenfalls analysiert wurden die Wasserstoffbrücken zwischen Wasser und den polaren Endgruppen. Besondere Aufmerksamkeit wurde auf die dem Lösungsmittel zugängliche Oberfläche (engl. SASA) und der Beschichtungsasymmetrie der funktionalisierten Gold-Nanopartikel gelegt sowie darauf, wie eine solche Asymmetrie verhindert werden kann.

Er wird beobachtet, dass die Eindringtiefe von Wasser und Ionen in die Hydrationshülle der Alkanthiole mit abnehmender Pfropfdichte zunimmt, und zwar unabhängig von der Art der Endgruppe. Hohe Pfropfdichten führen zu verlängerten Kohlenwasserstoffketten, die sich steif verhalten. Die dem Lösungsmittel zugängliche Oberfläche (engl.

SASA) ist sowohl von der Kettenlänge als auch von der Endgruppe abhängig. Diese ist im Fall der COO^- terminierten Ketten mit der Kettenlänge (C_l) von 5 die höchste unter allen Gold-Nanopartikeln mit linearen Ketten. Die Wassermoleküle orientieren sich nahe der Oberfläche des Goldkerns, unabhängig von der Kettenlänge, Endgruppe und Pfropfdichte, so dass je ein H-Atom eines Wassermoleküls sich zur Mitte des Goldkerns hin ausrichtet. Die Wassermoleküle können die Oberfläche der Gold-Nanopartikel bei verzweigten Kohlenwasserstoffen nicht so einfach erreichen wie es bei linearen Ketten der Fall ist. Daraus folgt, dass verzweigte Ketten den Kern deutlich besser schützen als vergleichbare lineare Ketten. Unter allen untersuchten Systemen bieten die am 4. Kohlenwasserstoffatom mit unpolarem Rest verzweigten Ketten mit der Kettenlänge 17 den besten Schutz für den Kern des Nanopartikels. Beschichtungsasymmetrie wird für längere Ketten (>11) gefunden, und die Asymmetrie kann verhindert werden, wenn Verzweigungspunkte eingeführt werden.