

## **Теоретические и экспериментальные исследования морфологии и оптических свойств фотохимически / термически синтезированных наноразмерных частиц с характерными спектрами поверхностного плазмонного резонанса**

**1. 1.Номер державної реєстрації теми – 0109U001600.**

**2.Науковий керівник – д.ф.-м.н., проф. Горшков В.Н**

**3.Суть розробки, основні результати**

Научный интерес к наноразмерным частицам (НЧ) благородных металлов и образованных при их осаждении развитых металлических поверхностей обусловлен их уникальными физическими свойствами, в частности усилением линейных и нелинейных оптических явлений в средах, которые контактируют с такими наноструктурами. Морфологические характеристики НЧ определяют их каталитические, сенсорные, оптические свойства. В этой связи чрезвычайно важным является выявление факторов, от которых зависит морфология наночастиц, которые образуются в многокомпонентном растворе с учетом кинетических явлений в растворе и на поверхности НЧ, что осуществлено в данной работе с помощью развитых авторами методов численного моделирования.

Проведено численное исследование трехмерной модели диффузионного роста наночастиц, внутреннее строение которых соответствует кристаллической решетке различных типов. Рассмотрено самосогласованную систему нанокристалл / окружающая среда. Учтена динамика поверхностных частиц кластера, которые с разной степенью вероятности могут изменять свое положение при переходе в соседние вакансии решетки или отрываться от поверхности. Полученные результаты демонстрируют базовые принципы контроля формы растущих наночастиц из начального ядра малых размеров. Показано, что для одной и той же кристаллической решетки можно получить наночастицы различных форм; получение даже правильных многогранников происходит в неравновесном режиме; эволюция формы кластера может быть контролируема с помощью изменения температуры системы и концентрации свободных атомов в среде, окружающей растущий кластер. Выявлено, что четко определенные поверхностные черты желаемой конфигурации при выращивании наноструктур на подложке получаются для относительно узких диапазонов значений параметров роста для величин, связанных со скоростью диффузии вещества на поверхность и температурой.

Результаты исследований демонстрируют возможности контролируемого синтеза, модификации и управления оптическими характеристиками наноструктурированных систем. Полученные теоретические выводы использованы для развития методов управляемого фотохимического / термического синтеза НЧ Ag и Au в коллоидах и прозрачных пленках кремнезема с известной морфологии нанокластеров.

PDF