

# Теоретичні та експериментальні дослідження морфології та оптичних властивостей фотохімічно/термічно синтезованих нанорозмірних частинок з характерними спектрами поверхневого плазмонного резонансу

1.Номер державної реєстрації теми – 0109U001600

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

## 3.Суть розробки, основні результати

Науковий інтерес до нанорозмірних частинок (НЧ) благородних металів та утворених при їх осадженні розвинених металічних поверхонь зумовлений їхніми унікальними фізичними властивостями, зокрема підсиленням лінійних і нелінійних оптичних явищ в середовищах, що контактують з такими наноструктурами. Морфологічні характеристики НЧ визначають їх каталітичні, сенсорні, оптичні властивості. В зв'язку з цим надзвичайно важливим є виявлення факторів, від яких залежить морфологія наночастинок, які утворюються в багатоконпонентному розчині з урахуванням кінетичних явищ в розчині та на поверхні НЧ, що здійснено в даній роботі за допомогою розвинених авторами методів чисельного моделювання.

Проведено чисельне дослідження тривимірної моделі дифузійного росту наночастинок, внутрішня будова яких відповідає кристалічним граткам різних типів. Розглянуто самоузгоджену систему нанокристал /навколишнє середовище. Враховано динаміку поверхневих частинок кластеру, які з різним ступенем ймовірності можуть змінювати своє положення при переході в сусідні вакансії гратки або відриватися від поверхні. Отримані результати демонструють базові принципи контролю форми зростаючих наночастинок з початкового ядра малих розмірів. Показано, що для однієї і тієї ж кристалічної гратки можна отримувати наночастинок різних форм; отримання навіть правильних багатогранників відбувається в невірноважному режимі; еволюція форми кластеру може бути контрольована за допомогою зміни температури системи і концентрації вільних атомів в середовищі, що оточує зростаючий кластер. Виявлено, що чітко визначені поверхневі риси бажаної конфігурації при вирощуванні наноструктур на підкладці отримуються для відносно вузьких діапазонів значень параметрів росту для величин, пов'язаних з швидкістю дифузії речовини на поверхню і температурою.

Результати досліджень демонструють можливості контрольованого синтезу, модифікації та управління оптичними характеристиками наноструктурованих систем. Одержані теоретичні висновки використано для розвитку методів керованого фотохімічного/термічного синтезу НЧ Ag та Au в колоїдах та прозорих плівках кремнезему з відомою морфологією нанокластерів.