

**Національний університет «Запорізька політехніка»**

*Кафедра інформаційної безпеки та наноелектроніки*



**МАГІСТЕРСЬКА РОБОТА**

**РОЗРОБКА МЕТОДИКИ КОНТРОЛЮ  
ПРОЦЕСУ ФОТОІНДУКОВАНОЇ  
ПОЛІМЕРИЗАЦІЇ**

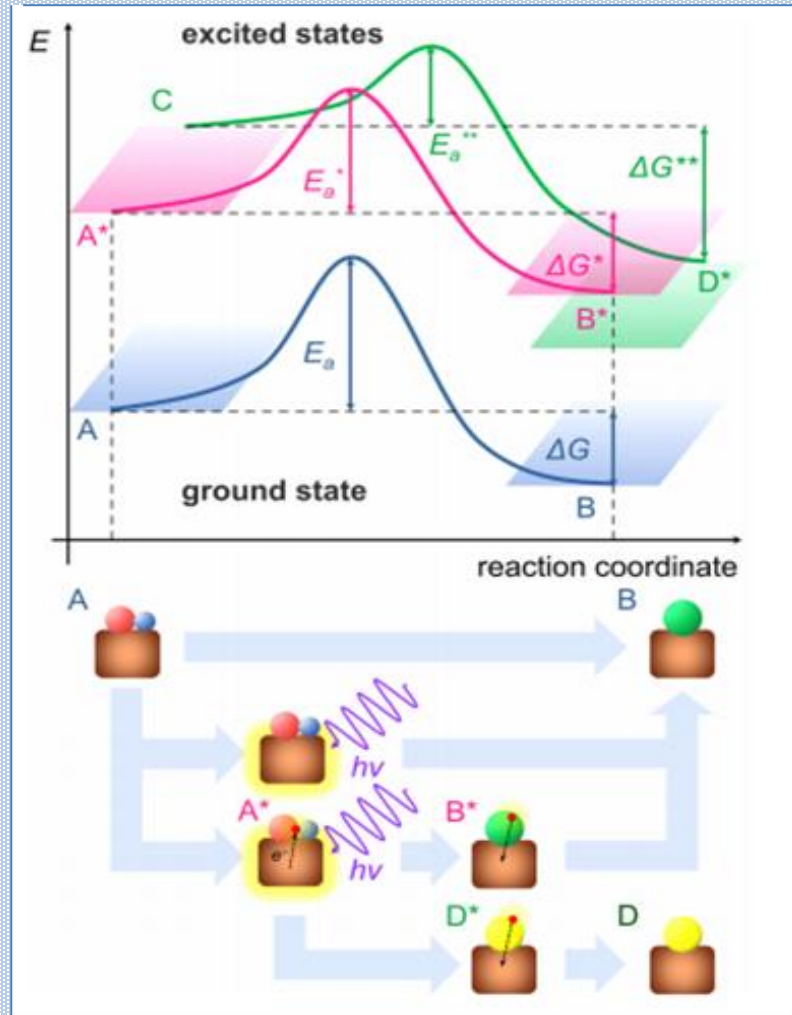
**Виконала:**  
ст. групи БК-412м

**Керівник:**  
професор, канд. фіз.-мат. наук

**Олена НЕМЕНУЦА**

**Андрій КОРОТУН**

# Поверхні потенційної енергії в основному та збудженому станах для загальної каталітичної реакції на поверхні металу



# Постановка задачі

Рівняння Арреніуса

$$R = R_0 \exp\left(-\frac{E_a}{k_B T}\right)$$

Розігрів за рахунок збудження поверхневих плазмонних резонансів дорівнює

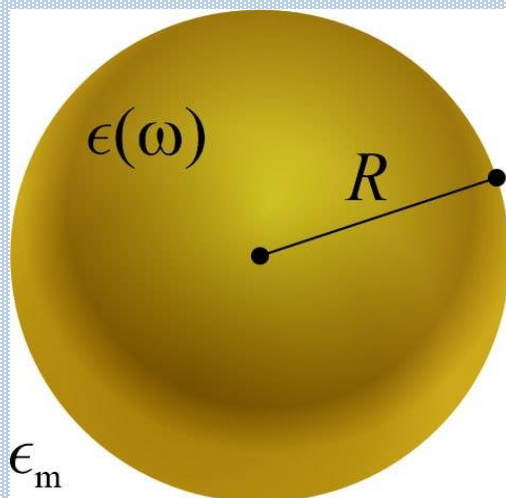
$$\Delta T = \frac{I_0 R}{4\kappa} Q^{\text{abs}}$$

Підсилення поля в околі наночастинки

$$\mathcal{L}(\omega, r) = \left| 1 + 2\tilde{\alpha} \left( \frac{R}{r} \right)^3 \right|^2$$

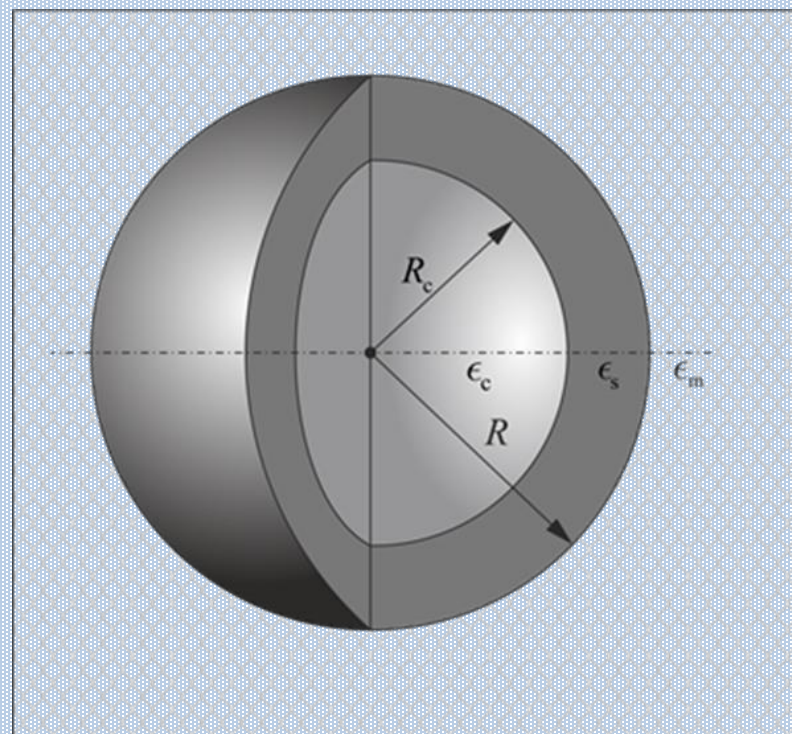
# Постановка задачі

Монометалева наночастинка



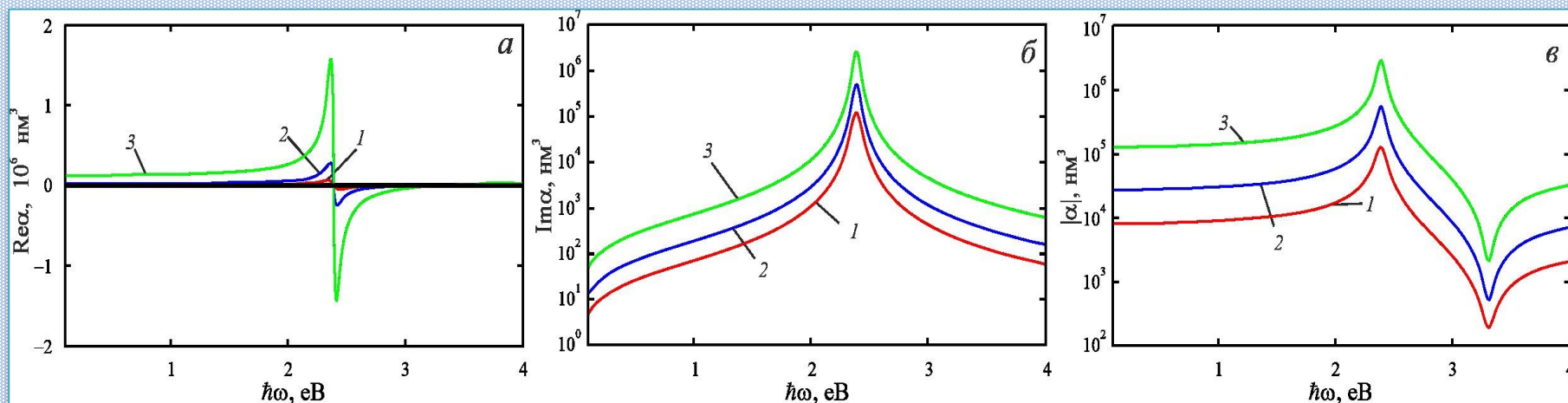
$$\alpha = R^3 \frac{\epsilon(\omega) - \epsilon_m}{\epsilon(\omega) + 2\epsilon_m}$$

Біметалева наночастинка



$$\alpha_{@} = R^3 \frac{(\epsilon_s - \epsilon_m)(2\epsilon_s + \epsilon_c) - \beta_c (\epsilon_s - \epsilon_c)(2\epsilon_s + \epsilon_m)}{(\epsilon_s + 2\epsilon_m)(2\epsilon_s + \epsilon_c) - 2\beta_c (\epsilon_s - \epsilon_c)(\epsilon_s - \epsilon_m)}$$

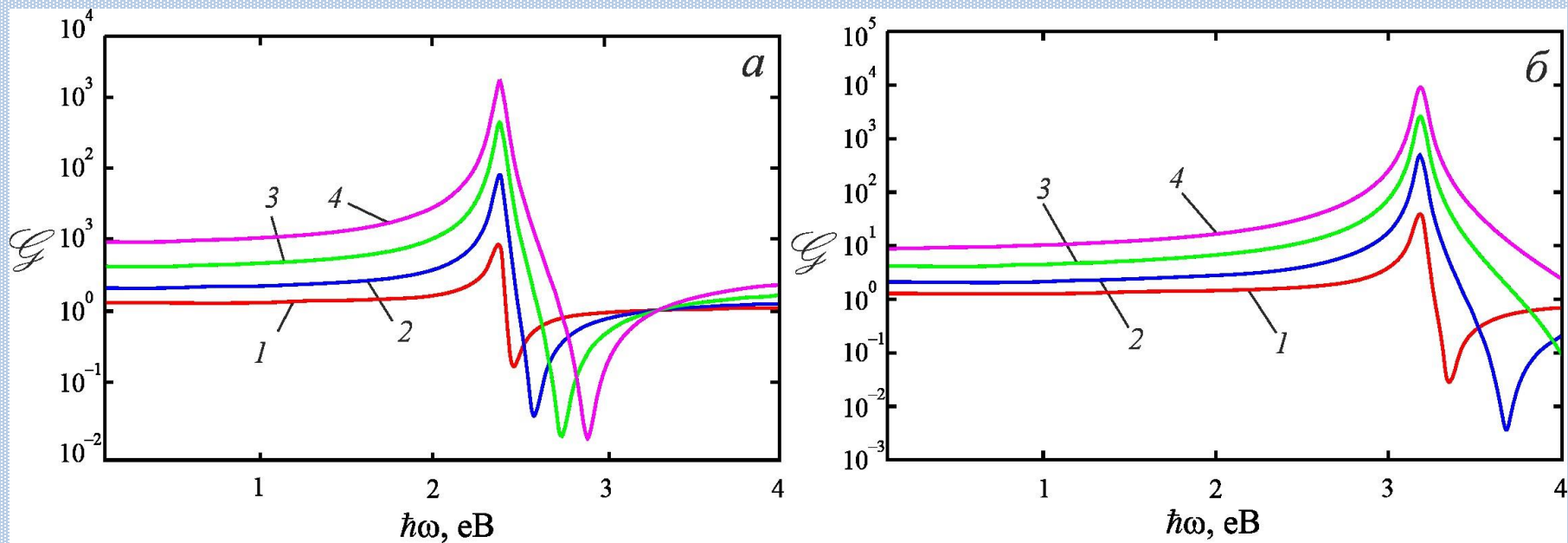
# Частотні залежності поляризованості сферичних наночастинок Au різного радіусу



*a* - дійсна частина;      *б* - уявна частина;      *в* - модуль

1 -  $R=20 \text{ nm}$ ;      2 -  $R=30 \text{ nm}$ ;      3 -  $R=50 \text{ nm}$ .

# Частотні залежності фактора посилення поля для сферичних наночастинок різних металів при радіусі $R=30$ нм за різних відстаней від поверхні



*a* - частинки Au;

*б* - частинки Ag.

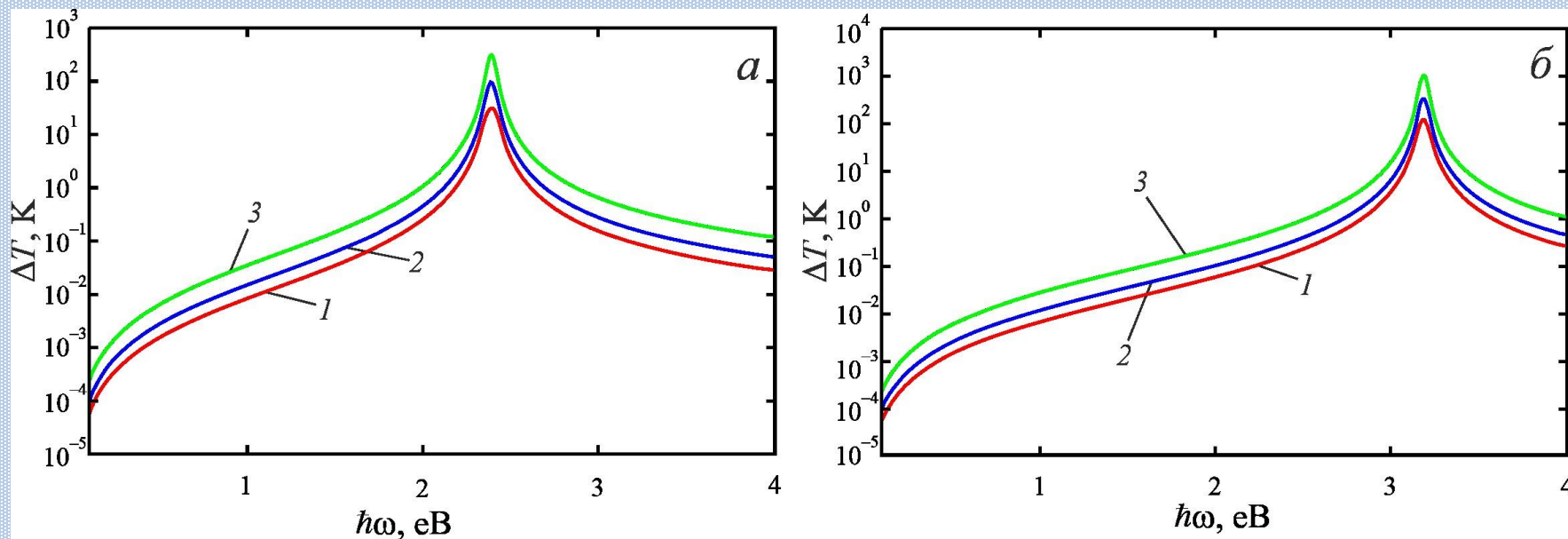
1 –  $R/r=0.4$ ;

2 –  $R/r=0.6$ ;

3 –  $R/r=0.8$ ;

4 –  $R/r=1.0$ .

# Частотні залежності розігріву в околі наночастинок Au та Ag



*a* - частинки Au;

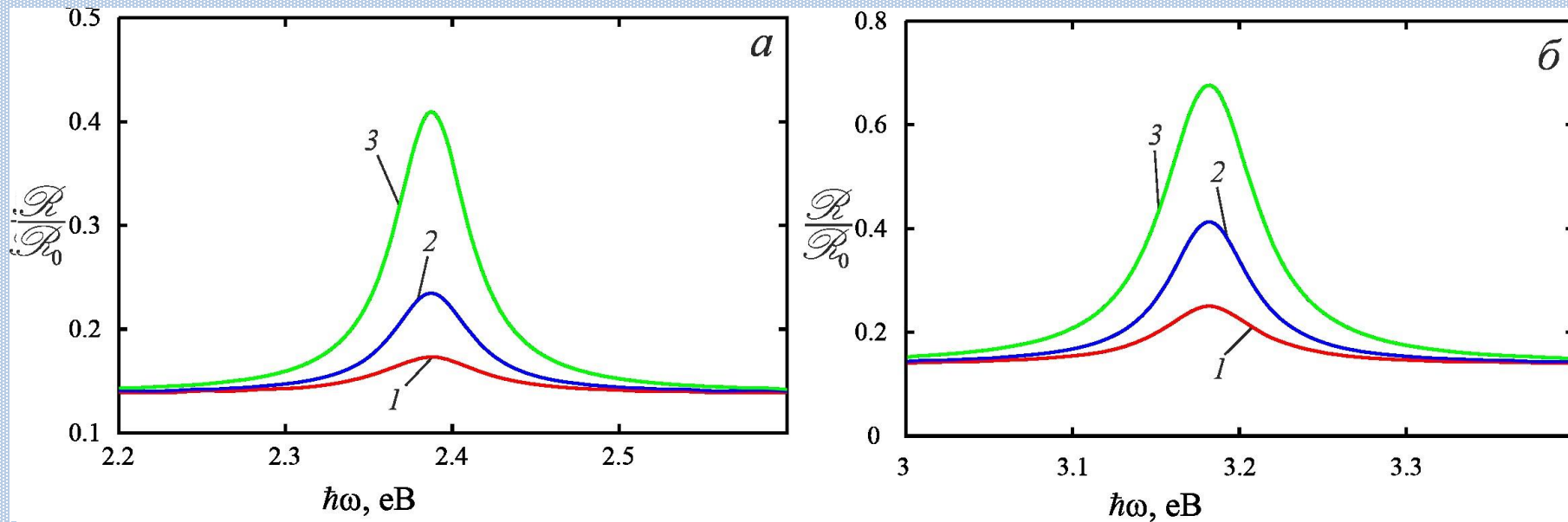
*б* - частинки Ag.

1 –  $R=20$  нм;

2 –  $R=30$  нм;

3 –  $R=50$  нм.

# Частотні залежності відносної швидкості реакції, каталізаторами яких виступають наночастинки Au та Ag



*a* - частинки Au;      *б* - частинки Ag.

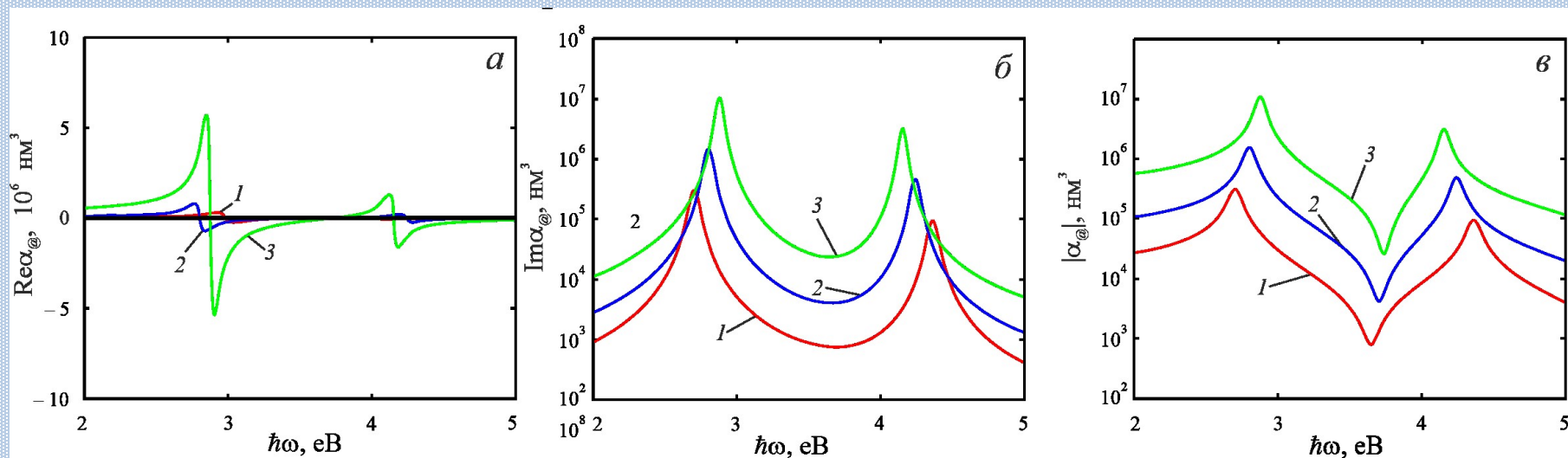
1 – R=20 нм;

2 – R=30 нм;

3 – R= 50 нм.



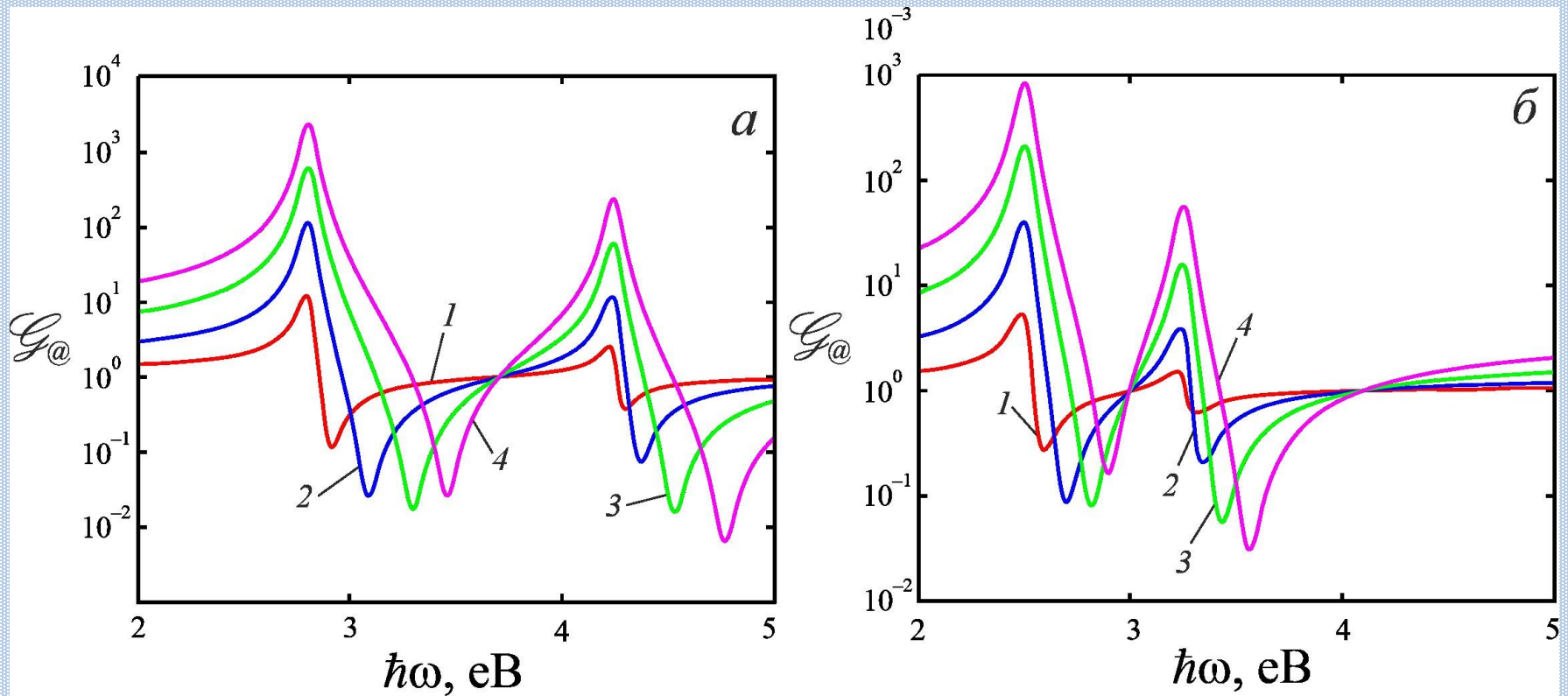
# Частотні залежності поляризованості сферичних наночастинок Au @ Ag різних розмірів



а - дійсна частина;    б - уявна частина;    в-модуль

1 -  $R_c=20 \text{ nm}$ ;  $t=10 \text{ nm}$ ; 2 -  $R_c=30 \text{ nm}$ ;  $t=10 \text{ nm}$ ; 3 -  $R_c=50 \text{ nm}$ ;  $t=10 \text{ nm}$

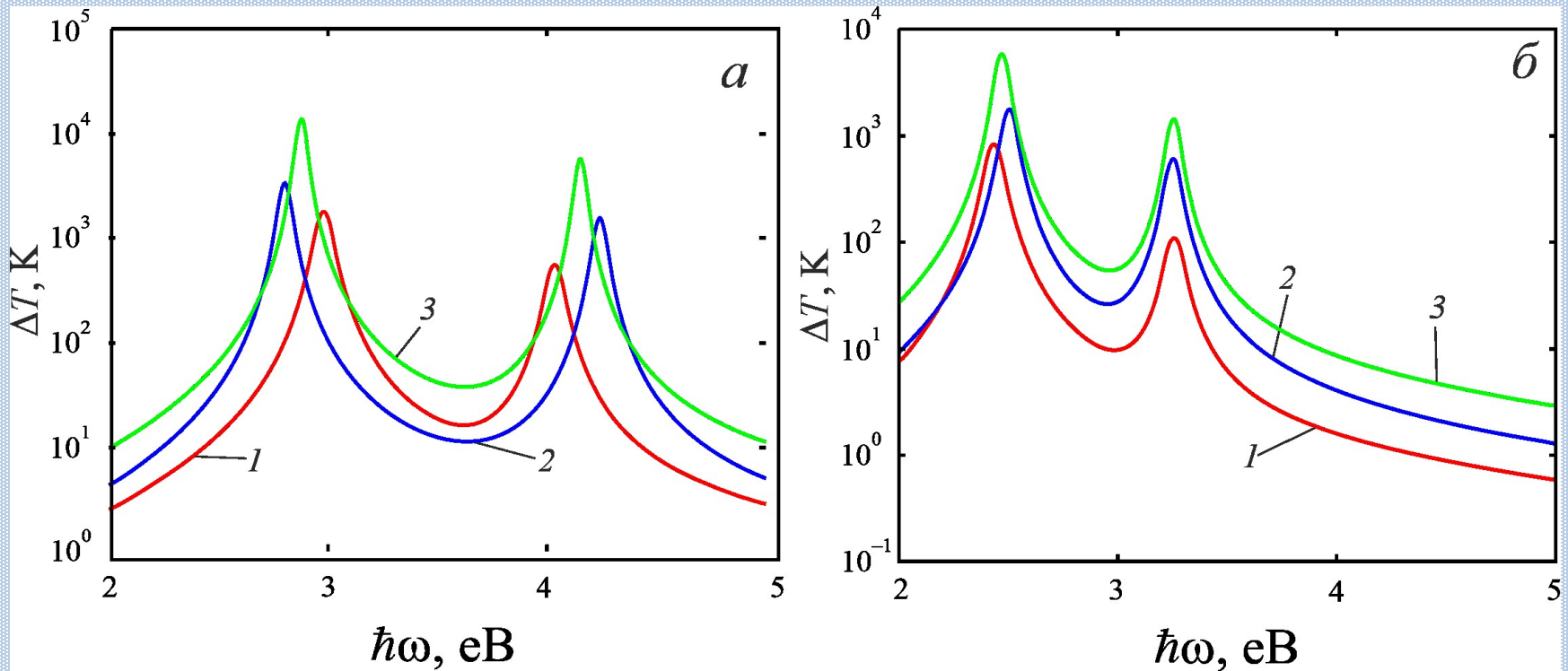
Частотні залежності фактора підсилення поля для сферичних наночастинок та (Rc = 30 нм; t=10 нм) на різних відстанях від поверхні



a - Au@Ag;    б - Ag@Au

1 -  $R/r=0.4$ ; 2 -  $R/r=0.6$ ; 3 -  $R/r=0.8$ ; 4 -  $R/r=1.0$ .

# Частотні залежності розігріву в околі наночастинок Au @ Ag та Ag @ Au

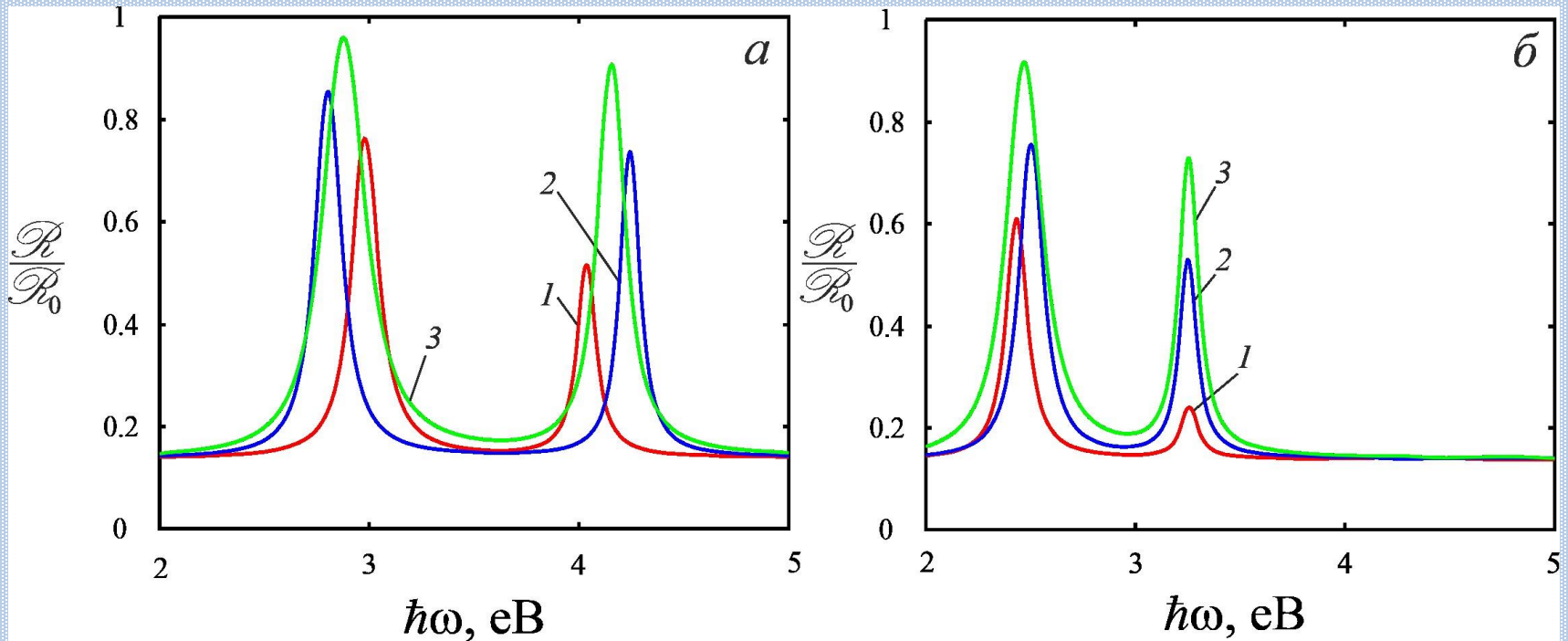


а - наночастинки Au @ Ag ;

б - наночастинки Ag @ Au.

1 -  $R_c=20$  нм;  $t=10$  нм; 2 -  $R_c=30$  нм;  $t=10$  нм; 3 -  $R_c=50$  нм;  $t=10$  нм

Частотні залежності відносної швидкості реакції,  
каталізаторами яких є наночастинки Au @ Ag (а) та  
Ag @ Au (б)



а - наночастинки Au @ Ag ;

б - наночастинки Ag @ Au.

1 -  $R_c=20$  нм;  $t=10$  нм; 2 -  $R_c=30$  нм;  $t=10$  нм; 3 -  $R_c=50$  нм;  $t=10$  нм

# ВИСНОВКИ

- Отримано співвідношення для частотних залежностей розігріву, підсилення полів та швидкості реакцій в околі сферичних монометалевих та біметалічних наночастинок різного радіусу.
- Показано, що спектральне положення максимумів поляризованості, розігріву та швидкості реакції для монометалічної наночастинок не залежать від радіусу частинки, а самі максимальні значення зазначених величин зі збільшенням радіусу наночастинок зростають.

# ВИСНОВКИ

- Розрахунки вказують на доцільність використання для плазмонного каталізу частинок срібла, оскільки в їхніх околах швидкість реакції більша, ніж в околі золотих наночастинок.
- Встановлено, що посилення поля зменшується при віддаленні поверхні наночастинки незалежно від її складу і структури.

# ВИСНОВКИ

- Доведено, що всі розраховані величини для біметалічної частинки мають два максимуми, що відповідають двом поверхневим дипольним плазмонним резонансам. Крім того, положення максимумів істотно залежать від радіусу зазначених частинок, а для уявної частини поляризованості має місце «притягнення» максимумів зі збільшенням радіусів.

# ВИСНОВКИ

- Продемонстровано, що використання як каталізаторів реакцій полімеризації частинок є кращим, оскільки в їхньому оточенні швидкість реакцій будуть найбільшими.



The background is a light blue gradient with several scientific motifs: a large DNA double helix on the left, a network of hexagons in the center, and a molecular structure of spheres and bonds on the right.

***ДЯКУЮ ВАМ ЗА УВАГУ !***

***ДОПОВІДЬ ЗАКІНЧЕНА***