

**МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ**  
**СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ**  
ФАКУЛЬТЕТ ЕЛЕКТРОНІКИ ТА ІНФОРМАЦІЙНИХ ТЕХНОЛОГІЙ  
КАФЕДРА НАНОЕЛЕКТРОНІКИ ТА МОДИФІКАЦІЇ ПОВЕРХНІ

«До захисту допущено»  
Завідувач кафедри

\_\_\_\_\_ О.Д. Погребняк

(підпис) (Ім'я та ПРІЗВИЩЕ)

19 червня 2023 р.

**КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА на здобуття освітнього ступеня**

бакалавра

зі спеціальності 153 «мікро- та наносистемна техніка»,

освітньо-професійної програми Нанотехнології та біомедичні системи

на тему: Температурна стабільність тришарової металеві наночастинки зі  
структурою ядро-оболонка

Здобувачки групи ФЕ-91 Семенюти Ярини Олександрівни

Кваліфікаційна робота містить результати власних досліджень.  
Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на  
відповідне джерело.

Семенюта Ярина \_\_\_\_\_ (підпис)

Керівник: доцент кафедри наноелектроніки та модифікації поверхні

Вадим Борисюк \_\_\_\_\_ (підпис)

**Суми – 2023**

СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
Факультет електроніки та інформаційних технологій  
Кафедра наноелектроніки та модифікації поверхні  
Спеціальність 153 мікро- та наносистемна техніка

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри О.Д.Погребняк

20 березня 2023 р.

ЗАВДАННЯ  
НА БАКАЛАВРСЬКУ РОБОТУ СТУДЕНТОВІ  
СЕМЕНЮТА ЯРИНА ОЛЕКСАНДРІВНА

1. Тема роботи: Температурна стабільність трьохшарової металевої наночастинки зі структурою ядро оболонка.  
Затверджена наказом по університету від « \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2023 р. № \_\_\_\_\_
2. Термін здачі студентом закінченого проекту (роботи) \_\_\_\_\_ 19.06.2023 р.
3. Вхідні дані до проекту (роботи): 1) результати досліджень впливу температури на структуру наночастинки; 2) \_\_\_\_\_
4. Зміст розрахунково-пояснювальної записки(перелік питань, які будуть розглянуті): 1) проведення літературного огляду по темі роботи; \_\_\_\_\_  
2) розібрати методологію досліджень (синтез наочастинок, характеристика)  
3) провести експериментальні дослідження за обраною тематикою з допомогою відповідного програмного забезпечення \_\_\_\_\_
5. Перелік графічного матеріалу (з точним зазначенням обов'язкових креслень): \_\_\_\_\_
  - 1) зображення різних видів наночастинок; \_\_\_\_\_
  - 2) Відео-запис зміни структури наночастинок; \_\_\_\_\_
  - 3) Візуалізація положення атомів наночастинки; \_\_\_\_\_
  - 4) Графіки температурної залежності; \_\_\_\_\_
  - 5) Зображення просторових конфігурацій наночастинок. \_\_\_\_\_

6. Дата видачі завдання \_\_\_\_\_ 23.03.2023 р. \_\_\_\_\_

Керівник \_\_\_\_\_

(підпис)

Завдання прийняла до виконання \_\_\_\_\_

(підпис)

### КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

Пор. ном.	Вид робіт	Строк виконання	Відмітка про виконання
1	Пошук літератури для виконання інд. завдання	10.04.2023	виконано
2	Вивчення загальних характеристик наноматеріалів. Актуальність даної теми.	10.04.2023-21.04.2023	виконано
3	Детальний розбір металевої наночастинки типу ядро-оболонка	22.04.2023-27-04.2023	виконано
4	Дослідження синтезу наночастинок	28.04.2023-1.05.2023	виконано
5	Харктеризація наночастинок	2.05.2023-11.05.2023	виконано
6	Огляд програмного забезпечення VMD та робота з ним	12.05.2023-17.05.2023	виконано
7	Практичне дослідження температурної стабільності як властивості наночастинки	18.05.2023-27.05.2023	виконано
8	Опрацювання літератури	28.052023-4.06.2023	виконано
9	Підготовка звіту	5.06.2023-17.06.2023	виконано

## АНОТАЦІЯ

В даній роботі інформація досліджена в трьох розділах. Перший розділ присвячений літературному огляду по даній тематиці. Коротко описані джерела в яких попередньо була досліджена дана тема. Другий розділ присвячений методології досліджень, а саме способам досліджень тришарових наночастинок та їх синтезу. Третій розділ це експериментальні дослідження, а саме практичний розрахунок температурної залежності та відповідних показників. Також було проведене моделювання тришарової металеві наночастинок Au-Pt-Au зі структурою ядро-оболонка шляхом комп'ютерного моделювання з допомогою відповідного програмного забезпечення. На основі отриманих моделей були сконструйовані конфігурації наночастинок під час зміни температури в діапазоні 300 К – 1750 К.

Робота викладена на 32 сторінках, також включає в себе 12 малюнків та список використаної літератури з 12 джерел.

Ключові слова: показник Ліндемана, наночастинка, нанотехнології, ядро-оболонка, Au-Pt-Au

## ЗМІСТ

ВСТУП.....	5
1. ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ.....	6
1.1 Властивості та застосування тришарових металевих наночастинок зі структурою ядро-оболонка.....	6
1.2 Дослідження впливу температури на структуру та властивості наночастинок.....	9
2. Методологія дослідження.....	12
2.1 Синтез тришарових металевих наночастинок зі структурою ядро-оболонка.....	12
2.2 Характеризація наночастинок: рентгенівська дифракція, трансмісійна електронна мікроскопія, спектроскопія.....	13
3. Експериментальні дослідження.....	18
3.1 Огляд програмного забезпечення vmd.....	18
3.2 Комп'ютерна модель тришарової металеві наночастинки Au-Pt-Au зі структурою ядро-оболонка.....	19
3.3 Вплив температури на структуру тришарових металевих наночастинок.....	20
3.4 Термостабільність тришарових металевих наночастинок.....	26
Висновок.....	29
Список використаних джерел.....	30

## ВСТУП

В останні декілька років наноматеріали інтенсивно вивчаються та застосовуються в різних галузях науки та техніки. Завдяки своїм унікальним властивостям наночастинки мають великий потенціал для розробки нових матеріалів з покращеними властивостями та функціональністю. Однією з проблем, пов'язаних з дослідженням і використанням наночастинок, є забезпечення їх температурної стабільності.

Температурна стабільність є важливим фактором для багатьох застосувань наночастинок, зокрема в каталізі, сенсориці, оптиці та електроніці. Зі збільшенням температури наноматеріали зазнають змін у своїй структурі, розмірі, кристалічності та хімічному складі, що може по впливати на їхні фізичні та хімічні властивості. Розуміння та контроль температурної стабільності наночастинок є важливим питанням. [1]

У цьому контексті тришарові металеві наночастинки зі структурою ядро-оболонка є особливо цікавими об'єктами досліджень. Унікальна природа і структура ядра, оточеного оболонкою, відкриває нові можливості для покращення температурної стабільності наночастинок. Розуміння впливу структури і складу на температурну стабільність цих наночастинок є важливим для практичного застосування.

В цій роботі буде дослідження температурної стабільності тришарових металевих наночастинок зі структурою ядро-оболонка. Мета даної роботи – проаналізувати вплив температури на структуру та властивості цих наночастинок та встановити оптимальні умови для їхньої стабільності та ефективності.

У наступних розділах роботи описано синтез тришарових металевих наночастинок, характеристику їхньої структури та властивостей, проведені експерименти з вивчення впливу температури на ці наночастинки та аналіз отриманих результатів. Наше дослідження має на меті зробити внесок у розвиток науки та застосування наноматеріалів та відкриває перспективи для подальших досліджень у цій галузі.

## 1. ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ

### 1.1 КЛАСИФІКАЦІЯ, ВЛАСТИВОСТІ ТА ЗАСТОСУВАННЯ ТРИШАРОВИХ МЕТАЛЕВИХ НАНОЧАСТИНОК ЗІ СТРУКТУРОЮ ЯДРО-ОБОЛОНКА

В даний час існує велика кількість видів наночастинок зі структурою ядро-оболонка з широким спектром застосувань. В результаті цього, класифікація всіх доступних наночастинок, котра залежить від їх промислового застосування або ж базується на інших властивостях, є доволі складною задачею. В широкому розумінні матеріали ядра або оболонки в наночастинці ядро-оболонка можуть бути виготовленні з неорганічних або органічних матеріалів. Залежно від їх матеріальних властивостей наночастинок ядро-оболонка можуть бути класифіковані в чотири основні групи: (I) неорганічні/неорганічні; (II) неорганічні/органічні; (III) органічні/неорганічні; (IV) органічні/органічні.[1-3]

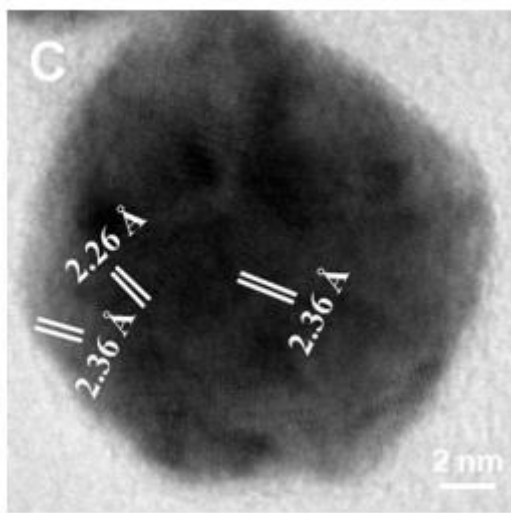
Біметалева наночастинка з ядро-оболонковою архітектурою зазвичай має значно відмінні властивості порівняно з монометалевими аналогами та сплавами. Як і у випадку монометалевих наночастинок та сплавів, ці властивості можна контролювати, регулюючи розмір та форму наночастинок. Відповідно, раціональне проектування біметалевих ядро-оболонкових наноструктур з добре контрольованою морфологією може показати оптимізовані фізико-хімічні властивості. [2]

Одні з найпоширеніших типів тришарових металевих наночастинок - це ті, де ядро та оболонка складаються з різних металів з різною хімічною активністю. Це може створювати унікальні властивості, такі як підвищена стабільність, каталітична активність та магнітні властивості. Такі наночастинки можуть бути класифіковані як «ядро-оболонка з різних металів».

Надалі розглянемо тришарову металеву наночастинку Au-Pt-Au зі структурою ядро-оболонка. Останнім часом поєднання золота з платиною пропонує привабливу можливість для потенційних технологічних застосувань,

таких як каталізатори в багатьох хімічних реакціях та матеріали для електрохімічних сенсорів.

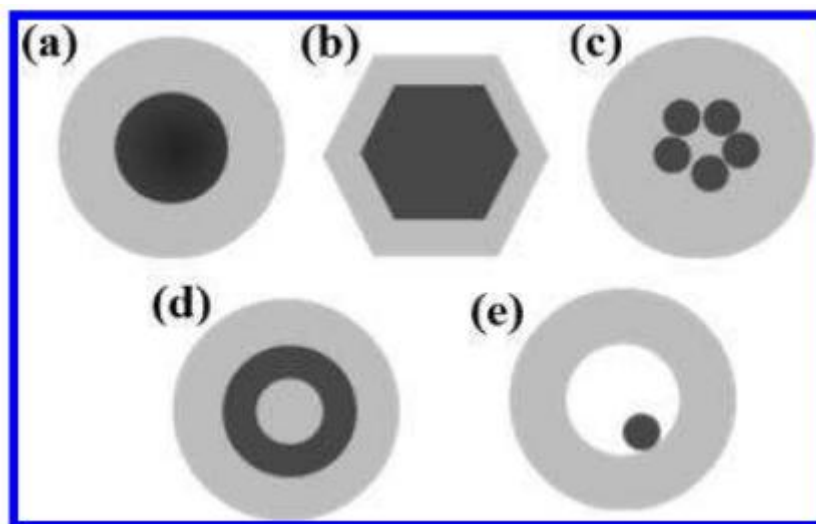
Тришарові металеві наночастинки зі структурою ядро-оболонка Au-Pt-Au є особливим типом наночастинок, де центральне ядро складається з золота (Au), оболонка – з платини (Pt), а зовнішня оболонка – знову золото (Au). Ця архітектура наночастинок забезпечує їм унікальні властивості та можливості застосування.



Мал. 1 - зображення однієї наночастинки Au@Pt@Au(s) з Au ядром, внутрішнім шаром Pt і гладкою зовнішньою оболонкою з Au на нанопластинах GO. [2]

Класифікація таких тришарових металевих наночастинок залежить від їх форми та структури. Наприклад, вони можуть мати сферичну форму, колоїдні частинки або наностебла, де кожен шар має свою товщину та структуру. Крім того, розмір ядра, товщина оболонок та співвідношення між ними також можуть варіюватися, що дозволяє отримати широкий спектр наночастинок з різними параметрами.





Мал. 2 – види наночастининок зі структурою ядро-оболонка: а) сферичні наночастинки зі структурою ядро-оболонка; б) гексагональні наночастинки зі структурою ядро-оболонка; с) кілька малих ядер, покритих одним шаром матеріалу; д) наноматрьошка; е) рухоме ядро в середині порожнього оболонковго матеріалу. [3]

Властивості тришарових металевих наночастинок Au-Pt-Au визначаються їх композицією та структурою. Золото (Au) володіє хорошими плазмованими властивостями, що означає, що вони можуть ефективно взаємодіяти з електромагнітним випромінюванням. Платина (Pt) відома своєю високою каталітичною активністю, механічною та хімічною стійкістю. Така комбінація металів надає тришаровим наночастинкам унікальні функціональні властивості.

Застосування тришарових металевих наночастинок Au-Pt-Au широко розглядаються у багатьох галузях. Одна з основних застосувань – це каталіз. Завдяки властивостям платини (Pt), такі наночастинки можуть бути використані у каталітичних реакціях, наприклад, у водневих паливах, електрокаталізі та конверсії хімічних реакцій.[10-11]

Крім того, тришарові металеві наночастинки Au-Pt-Au мають потенціал у біомедичних дослідженнях. Вони можуть використовуватися в наномедицині для доставки лікарських речовин, фототерапії, певного виду діагностувань та

гіпертемії. Їх унікальні оптичні властивості дозволяють використовувати їх у біосенсорах для виявлення хвороб та біомаркерів.

Тришарові металеві наночастинки Au-Pt-Au є об'єктом активних досліджень у багатьох галузях науки та технологій. Вони мають потенціал для застосування в каталізі, біомедицині, електроніці та енергетиці.

Взагалі, тришарові металеві наночастинки зі структурою ядро-оболонка відкривають широкі можливості для розробки нових матеріалів та пристроїв з покращеними функціональними властивостями. Їх класифікація, властивості та застосування продовжують вивчатися і розглядатися в наукових дослідженнях з метою розуміння їх потенціалу та розширення областей їх використання в майбутньому.

## **1.2 ДОСЛІДЖЕННЯ ВПЛИВУ ТЕМПЕРАТУРИ НА СТРУКТУРУ ТА ВЛАСТИВОСТІ НАНОЧАСТИНОК**

Тема температурної стабільності тришарових наночастинок завжди була цікавою для обговорення. Дослідження температурної стабільності тришарових металевих наночастинок, зокрема наночастинки зі структурою ядро-оболонка Au-Pt-Au, вже проводилися дослідниками, щоб зрозуміти їхню поведінку та можливості за різних умов.

Одне з таких досліджень було опубліковане в *Journal of Physical Chemistry C* у 2016 році. Автори даної статті синтезували тришарові наночастинки Au-Pt-Au і вивчили їхню температурну стабільність. Вони провели детальний аналіз змін у структурі та властивостях наночастинок при різних температурах. Результати показали, що тришарові наночастинки зі структурою ядро-оболонка Au-Pt-Au демонструють високу термостабільність при підвищенні температури до певного рівня, що вказує на їх потенціал для використання при високих температурах.

Також були опубліковані дві статті «Thermal stability of Au@Pt core-shell nanoparticles for catalytic applications» та «Thermal stability of Au-Pt core-shell

nanoparticles: Role of interface structure"». Обидві статті присвячені дослідженню термічної стабільності трьохшарових наночастинок зі структурою ядро-оболонка з металами Au та Pt. Обидві статті були опубліковані в журналі Journal of Physical Chemistry .

Основна спільність між цими статтями полягає в їхній спрямованості на вивчення термічної стабільності трьохшарових наночастинок зі структурою ядро-оболонка, зокрема, залежності стабільності від температури та структурних особливостей.

Стаття «Thermal stability of Au@Pt core-shell nanoparticles for catalytic applications» досліджує термічну стабільність наночастинок зі структурою ядро-оболонка Au-Pt-Au з метою оцінки їхнього застосування в каталітичних процесах. Вона вивчає зміни структури та каталітичної активності наночастинок під дією високих температур та розглядає вплив структурних параметрів на їхню стабільність.

Стаття «Thermal stability of Au-Pt core-shell nanoparticles: Role of interface structure» також досліджує термічну стабільність наночастинок зі структурою ядро-оболонка Au-Pt. Вона зосереджується на ролі структури інтерфейсу між ядром та оболонкою в стабільності наночастинок при зміні температури. Автори дтально вивчають структурні особливості інтерфейсу та його вплив на термічну стабільність наночастинок.

Обидві статті спрямовані на розуміння механізмів термічної стабільності трьохшарових наночастинок зі структурою ядро-оболонка Au-Pt-Au та вивчення впливу структурних параметрів на їхню стабільність. Це важливі дослідження, які сприяють розвитку нашого розуміння термодинамічних та кінетичних процесів, що відбуваються в трьохшарових наночастинок під дією високих температур.

Ці приклади попередніх досліджень підтверджують значення температурної стабільності трьохшарових металевих наночастинок зі структурою ядро-оболонка Au-Pt-Au та підкреслюють їх потенціал для різних застосувань у високотемпературних умовах. Однак, варто продовжувати

дослідження для кращого розуміння їхніх властивостей та можливостей, а також для розробки нових методів синтезу та оптимізації цих наночастинок.[12]

## 2. МЕТОДОЛОГІЯ ДОСЛІДЖЕНЬ

### 2.1 СИНТЕЗ ТРИШАРОВИХ МЕТАЛЕВИХ НАНОЧАСТИНОК Au-Pt-Au ЗІ СТРУКТУРОЮ ЯДРО-ОБОЛОНКА

Синтез наночастинок є складним процесом, і тому існує широкий спектр технік для виробництва різних видів наночастинок. Результатом є те, що неможливо узагальнити всі техніки синтезу, що наразі доступні. Однак, в цілому ці всі техніки можна умовно розподілити на три категорії (I) конденсація з газової фази, (II) синтез за допомогою хімічних реакцій та (III) процеси в твердій фазі, такі як механічне подрібнення. За допомогою вищезгаданих технік можна синтезувати не тільки чисті наночастинки, але і гібридні або покриті наночастинки (з гідрофільними або гідрофобними матеріалами залежно від придатності для застосування). [3-4]

Підходи до синтезу наноматеріалів можна розділити на 2 категорії : «зверху-вниз»( top-down) та «знизу-вгору»( bottom-up). При підході «зверху-вниз» використовується традиційні методи майстерень або мікрофібрації, до зовнішні керовані інструменти використовуються для різання, фрезерування та формування матеріалів у бажану форму та порядок. Наприклад, найпоширенішими техніками є літографічні методи (наприклад УФ, електронний або іонний промінь, скануючий зонд, оптичне наближення до поля), обробка лазерним променем та механічні методи (наприклад обробка, шліфування та полірування).

З іншого боку, підходи «знизу-вгору» використовують хімічні властивості молекул, щоб вони самоорганізувалися у корисну конфігурацію. Найпоширенішими підходами «знизу-вгору» є хімічний синтез, хімічне осадження з газової фази, лазерно-індукована асамбляж (так званий «лазерний тапінг»), самоорганізація, колоїдне згущення, відкладання плівки та росту і т.д. на даний момент жоден з підходів незалежно «зверху-вниз» чи «знизу-вгору», не є переважаючі. Кожен має свої переваги та обмеження. Однак підхід «знизу-вгору» може забезпечити набагато менші розміри частинок і має потенціал бути більш економічно ефективним у майбутньому завдяки

перевагам абсолютної точності, повного контролю над процесом і мінімальним енергетичними втратами порівняно з підходом «зверху-вниз».

У випадку синтезу наночастинок зі структурою ядро-оболонка, де необхідне виключне керування для досягнення рівномірного покриття оболонкою матеріалів під час формування частинок, підхід «знизу-вгору» виявився більш підходящим. Також можна використовувати комбінацію обох підходів, наприклад, ядро частинок може бути синтезоване за допомогою підходу «зверху-вниз», а оболонку можна нанести за допомогою підходу «знизу-вгору», щоб забезпечити рівномірну і точну товщину оболонки. Для точного контролю над загальним розміром і товщиною оболонки, бажано використовувати мікроемульсію замість масивного середовища, оскільки краплі води виступають як шаблон або нанореактор. [3,6]

## **2.2 ХАРАКТЕРИЗАЦІЯ НАНОЧАСТИНОК: РЕНТГЕНІВСЬКА ДИФРАКЦІЯ, ТРАНСМІСІЙНА ЕЛЕКТРОННА МІКРОСКОПІЯ, СПЕКТРОСКОПІЯ.**

Рентгенівська дифракція є потужним методом для характеристики наночастинок, включаючи наночастинки зі структурою ядро-оболонка, таких як Au-Pt-Au.

Рентгенівська дифракція (XRD) використовується для вивчення кристалічної структури матеріалів шляхом спостереження дифракційних максимумів, що виникають при взаємодії рентгенівського променя з атомами в кристалічній ґратці. Цей метод дозволяє визначити розташування атомів у кристалічній структурі, а також визначити параметри ґратки, такі як розміри одиничної ґратки та кут між площинами. [10,12]

Для характеристики наночастинок Au-Pt-Au методами рентгенівської дифракції можна проводити наступні експерименти: дифракційні аналізи, розпізнавання фаз, розмірні характеристики, мікронапруження. Більш детально розглянемо кожен з даних експериментів. Дифракційний аналіз являє собою вимірювання дифракційних кутів та інтенсивності дифракційних

максимумів яке дозволяє визначити кристалічну структуру наночастинок Au-Pt-Au. За допомогою Бреггового закону можна визначити розміри кристалічних площин та встановити характеристики оболонки та ядра наночастинок.[2]

Розпізнавання фаз. XRD може допомогти ідентифікувати фази, присутні в наночастинках Au-Pt-Au. За допомогою порівняння експериментальних дифрактограм з даними по відомим кристалічним фазам можна визначити склад та кількісне співвідношення компонентів в наночастинках.

Розмірні характеристики. Ширина дифракційних максимумів на половині максимальної інтенсивності (FWHM) може бути використана для визначення розмірів наночастинок. За допомогою відповідних моделей та апроксимацій можна оцінити середній розмір ядра та оболонка.

Мікронапруження. Рентгенівська дифракція також може допомогти визначити мікронапруження в наночастинках Au-Pt-Au, які можуть виникати через відмінності у тепловому розширенні матеріалів ядра та оболонки.

Рентгенівська дифракція є важливим методом для вивчення структури та властивостей наночастинок Au-Pt-Au зі структурою ядро-оболонка. Вона надає інформацію про кристалічну структуру, фазовий склад, розміри та мікронапруження наночастинок, що допомагає в розумінні їхньої поведінки та дослідженні їхніх можливих застосувань.

Трансмісійна електронна мікроскопія (ТЕМ) є потужним методом для характеристики наночастинок, включаючи наночастинки зі структурою ядро-оболонка. ТЕМ дозволяє отримувати високорозмірні зображення та детальну інформацію про морфологію, розміри, структуру та склад наночастинок. До переваг трансмісійної електронної мікроскопії, призначеної для характеристики наночастинок, відносять:

- 1) високу роздільну здатність, оскільки ТЕМ може забезпечувати високу роздільну здатність що дозволяє визначити розміри наночастинок на нанометровому рівні. Роздільна здатність може розкрити деталі структури ядра

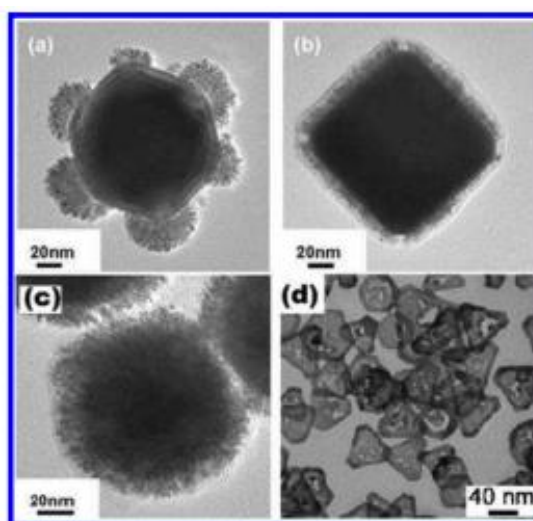
та оболонки, включаючи форму, розміри та організацію атомів у внутрішній структурі наночастинок.

2) хімічний склад, TEM можна використовувати для визначення хімічного складу наночастинок шляхом використання дисперсійної спектроскопії енергійних втрат (EDS). Цей метод дозволяє визначити елементний склад ядра та оболонки наночастинок, що важливо для розуміння їхньої хімічної природи та властивостей.

3) зображення структури, TEM здатний отримувати високоякісні зображення структури наночастинок. Це дозволяє оцінити однорідність та уніформність оболонки наночастинок, а також вивчити наявність дефектів або домішок.

4) визначення взаємодії, TEM може допомогти вивчити взаємодію між наночастинами та їхнє оточення. Наприклад, можна візуалізувати взаємодію між наночастинами та поверхнями матеріалу, дослідити агресію наночастинок або спостерігати реакції на межі ядра та оболонки.

Далі наведений приклад TEM для металевої наночастинки зі структурою ядро-оболонка.



мал. 3 зображення TEM (трансмисійної електронної мікроскопії) частинок Au(oct)/Pt, (b) Au(cub)/Pt, (c) Au(sph)/Pt та (d) Ag/Au зі структурою ядро-оболонка з призматичною структурою.[3]



В цілому трансмісійна електронна мікроскопія є незамінним інструментом для вивчення наночастинок зі структурою ядро-оболонка, оскільки вона надає детальну інформацію про їхню морфологію, структуру та склад.

Спектроскопія є важливим методом для характеристики наночастинок, оскільки вона дозволяє визначити їхні оптичні, електронні та хімічні властивості. Існує кілька типів спектроскопії, які застосовуються для аналізу наночастинок, зокрема[2]:

1) У видимому та УФ-видимому діапазонах: у видимому та ультрафіолетовому діапазонах можна використовувати спектроскопію поглинання та розсіювання світла (UV-Vis). Цей метод дозволяє визначити оптичні властивості наночастинок, такі як поглинання та розсіювання світла в залежності від довжини хвилі. Це може надати інформацію про розмір, форму та конфігурацію наночастинок.

2) Раманівська спектроскопія: раманівська спектроскопія дозволяє вивчати молекулярні вібрації в наночастинках. Вона заснована на розсіюванні світла, при якому фотони змінюють свою енергію через взаємодію з молекулами. Цей метод може розкрити хімічний склад та функціональні групи на поверхні наночастинок.

3) Флуоресценційна спектроскопія: флуоресценційна спектроскопія дозволяє вивчати випромінювання світла, яке виникає при збудженні наночастинок. Вона може дати інформацію про енергетичні рівні та електронну структуру наночастинок.

4) ядерно-магнітна резонансна спектроскопія (ЯМР): (ЯМР) спектроскопія використовується для вивчення хімічного складу та структури наночастинок. Вона може надати інформацію про атомний спіні, хімічні зв'язки та взаємодію з оточуючим середовищем.

5)Мас-спектроскопія: Мас-спектроскопія використовується для визначення маси та хімічного складу наночастинок. Вона базується на розділенні та аналізі іонів, що утворюються при іонізації наночастинок.

Застосування цих спектроскопічних методів дозволяє отримати інформацію про структуру, хімічний склад, оптичні та електронні властивості наночастинок. Вони використовуються для вивчення різних типів наночастинок, включаючи трьохшарові металеві наночастинок зі структурою ядро-оболонка Au-Pt-Au.

Загалом характеристика наночастинок є доволі обширною темою для розгляду. Вище були приведені лише декілька способів дослідження структури, складу, хімічних та фізичних властивостей наночастинок зі структурою ядро-оболонка.[8-9]

### 3. ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНІ ДОСЛІДЖЕННЯ

#### 3.1 ОГЛЯД ПРОГРАМНОГО ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ VMD.

Visual Molecular Dynamics (VMD) - це програмне забезпечення для візуалізації та аналізу молекулярних систем. Вона широко використовується в наукових дослідженнях з біофізики, хімії, біоінформатики та інших областях, де вивчаються молекулярні структури.

VMD дозволяє користувачам візуалізувати тривимірні моделі молекулярних систем, включаючи білки, нуклеїнові кислоти, ліганди, мембрани та інші біомолекули. Вона надає багато функцій для маніпулювання, розгортання, обертання та масштабування молекулярних структур. Крім того, VMD дозволяє відображати різні типи взаємодій між атомами, такі як зв'язки, водневі зв'язки, ван-дер-Вальсові взаємодії та інші.

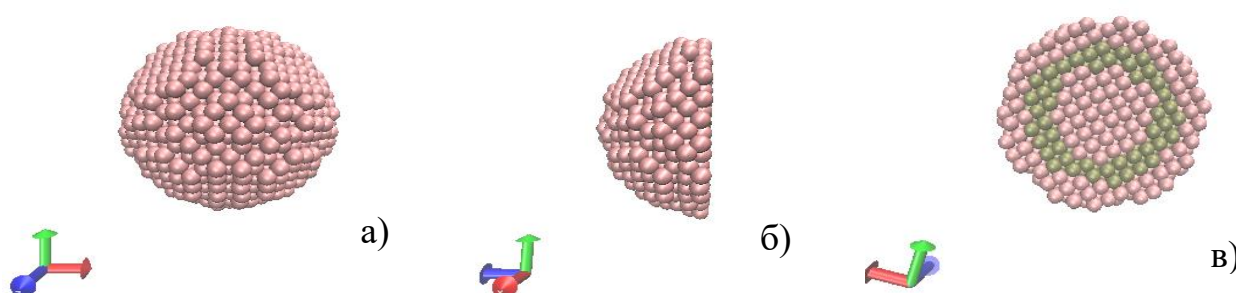
Однією з головних переваг VMD є можливість анімації молекулярних динамічних симуляцій. Вона дозволяє відтворювати рух атомів та молекул протягом часу, що допомагає дослідникам вивчати динаміку молекулярних систем. Крім того, VMD підтримує ряд аналітичних інструментів, таких як обчислення радіуса гідратації, аналіз взаємодій, обробка траєкторій і графічне відображення даних.

Загалом, VMD є потужним інструментом для візуалізації, аналізу та вивчення молекулярних структур та їх динаміки. Вона допомагає дослідникам отримувати нові уявлення про властивості та функції біомолекул і використовується для розробки нових ліків, вивчення біохімічних процесів, моделювання біологічних систем та багатьох інших дослідницьких завдань.

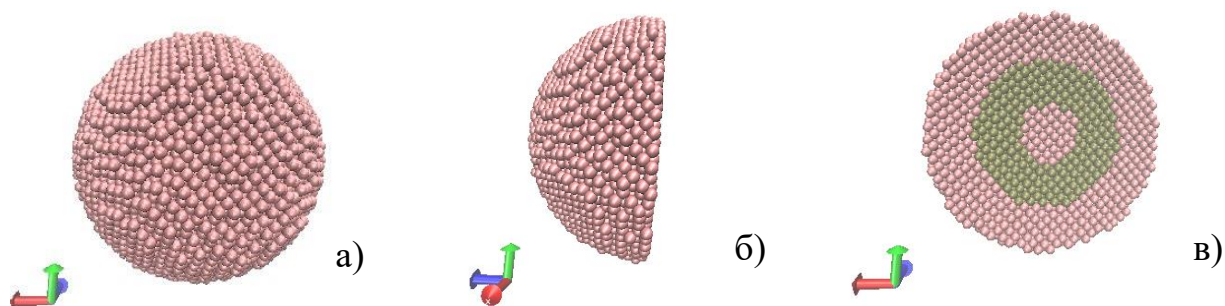
### 3.2 КОМП'ЮТЕРНА МОДЕЛЬ ТРИШАРОВОЇ МЕТАЛЕВОЇ НАНОЧАСТИНКИ Au-Pt-Au ЗІ СТРУКТУРОЮ ЯДРО-ОБОЛОНКА

В даній роботі було проведено дослідження тришарової металевої наночастинки Au-Pt-Au зі структурою ядро-оболонка, де центральне ядро складається з золота (Au), оболонка – з платини (Pt), а зовнішня оболонка – знову золото (Au). Моделювання було проведено у вільних граничних умовах за 3 осями координат. Початковий радіус наночастинок був 20 нм, 25 нм, 30 нм, 37 нм та 40 нм. Відповідно було досліджена певна кількість атомів відповідно до радіусів наночастинок.

На малюнку представлена початкова атомістична конфігурація, яка була змодельована за допомогою програмного забезпечення VMD.



Мал. 4 - Візуалізація положення атомів тришарової наночастинки Au-Pt-Au з радіусом 20 нм., а) загальне положення; б) положення в розрізі; в) вид в розрізі.



Мал. 5 - Візуалізація положення атомів тришарової наночастинки Au-Pt-Au з радіусом 40 нм., а) загальне положення; б) положення в розрізі; в) вид в розрізі.

### 3.3 ВПЛИВ ТЕМПЕРАТУРИ НА СТРУКТУРУ ТРИШАРОВОЇ МЕТАЛЕВОЇ НАНОЧАСТИНКИ

Вплив температури на структуру трьохшарової металеві наночастинки можна вивчати за допомогою показника Ліндемана, також відомого як дискретний показник деформації. Цей показник використовується для визначення розміру дефектів у кристалічній решітці матеріалу. [5,10]

Початковий радіус наночастинок становить 20 нм, 25 нм, 30 нм, 37 нм, та 40 нм. Для проведення даного дослідження температуру систем піднімали від стартового значення 300 К до максимальної позначки 1750 К.

Під час візуалізації процесу плавлення температуру зразків поступово підвищували, змінюючи масштаби відповідних атомних швидкостей. Потім, після досягнення рівноважної температури, було зафіксовано атомну конфігурацію системи 300-1750 К. Як числовий параметр для опису змін у структурі наночастинок використовували показник Ліндемана. Локальний показник Ліндемана атома може бути визначений за формулою:

$$q_i = \frac{1}{N-1} \sum_{j \neq i} - \frac{\sqrt{\langle r_{ij}^2 \rangle - \langle r_{ij} \rangle^2}}{\langle r_{ij} \rangle}$$

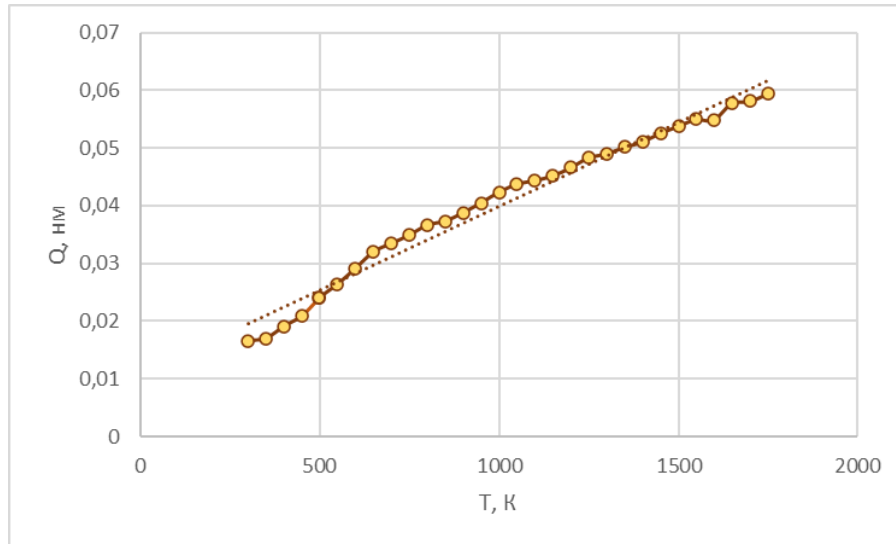
де  $r_{ij}$ - відстань між атомами  $i$  та  $j$ ;кутові дужки означають усереднення за часом при сталому значенні температури.

Показник Ліндемана визначається як середнє значення квадратного кореня середньоквадратичного відхилення атомів у кристалічній решітці. Він може бути обчислений шляхом аналізу рентгенівських дифракційних даних, зокрема ширини пікових дифракційних максимумів.

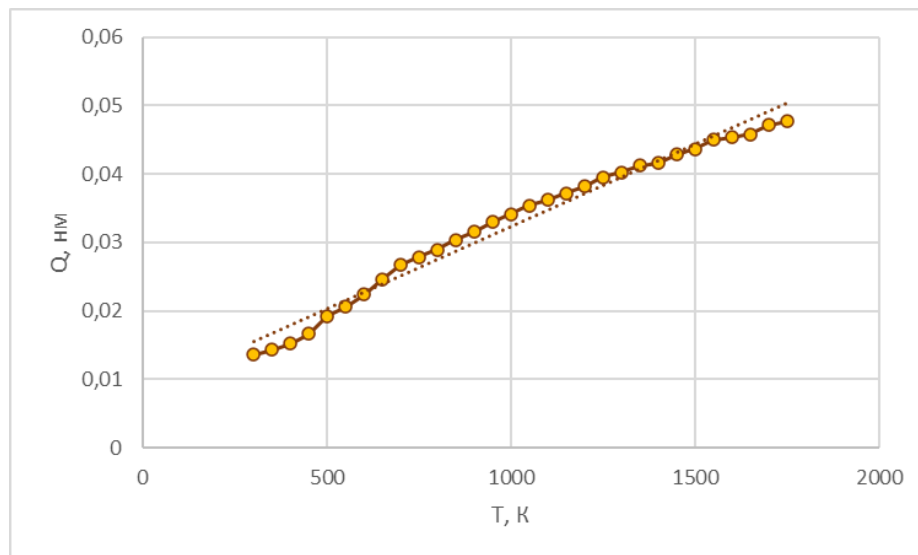
Зміна показника Ліндемана залежить від температури і може вказувати на зміну структури трьохшарової металеві наночастинки. При збільшенні температури, атоми можуть рухатися більше і при цьому змінюється розмір

дефектів у кристалічній решітці. Зміна показника Ліндемана може вказувати на збільшення або зменшення розміру дефектів у наночастинці зі зростанням температури.

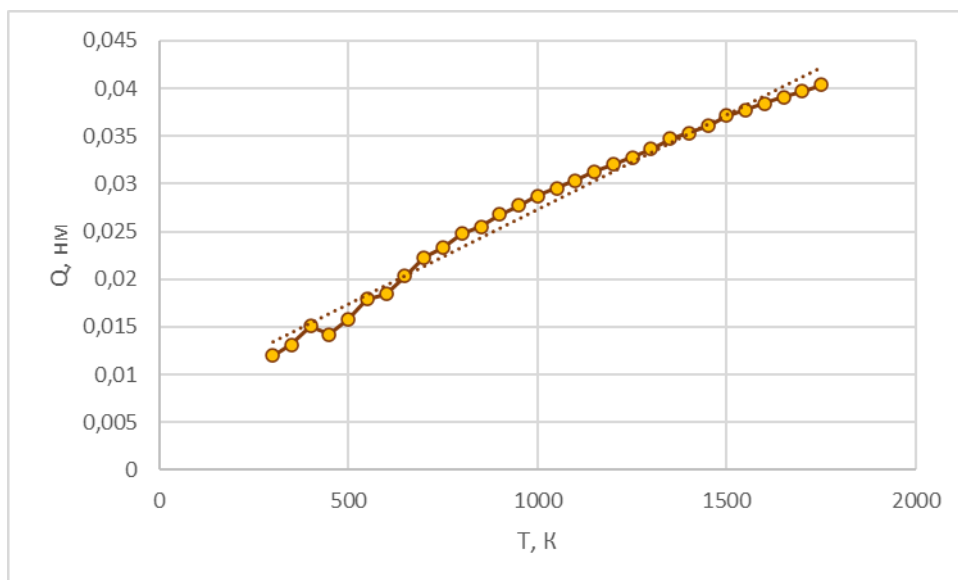
Далі наведено температурну залежність металевої наночастинки Au-Pt-Au зі структурою ядро-оболонка різних радіусів.



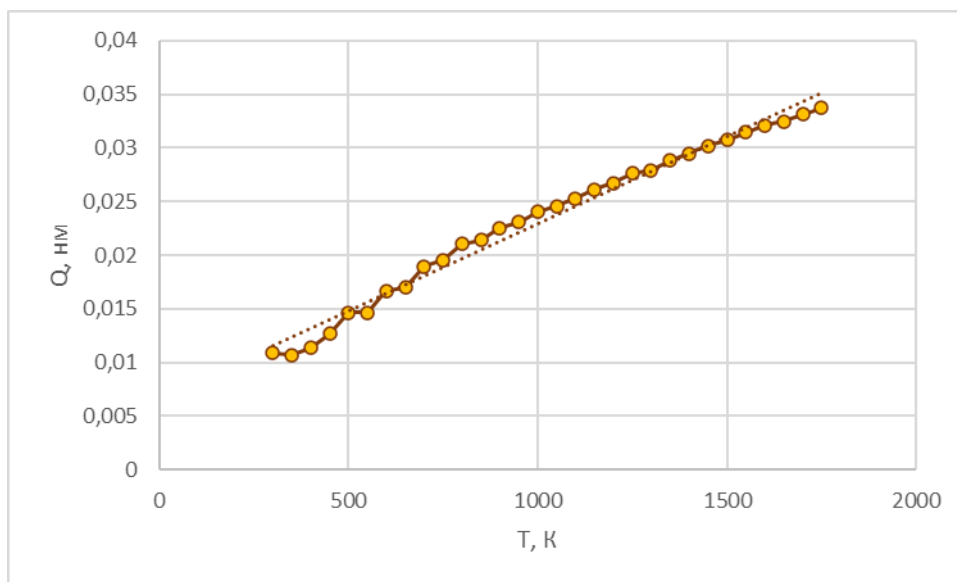
Мал. 6 – температурна залежність показника Ліндемана наночастинки з радіусом 20 нм



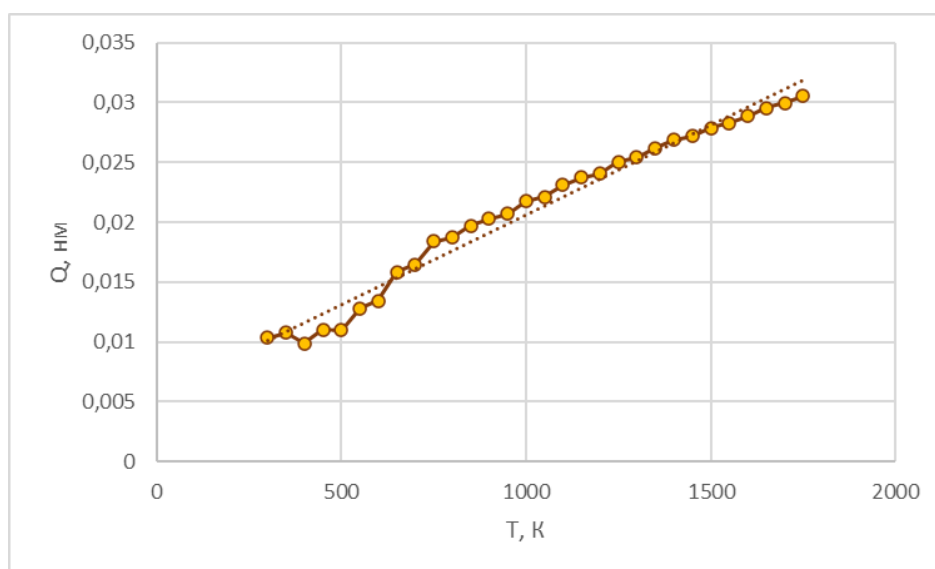
Мал. 7 - температурна залежність показника Ліндемана наночастинки з радіусом 25 нм



Мал. 8 - температурна залежність показника Ліндемана наночастинки з радіусом 30 нм

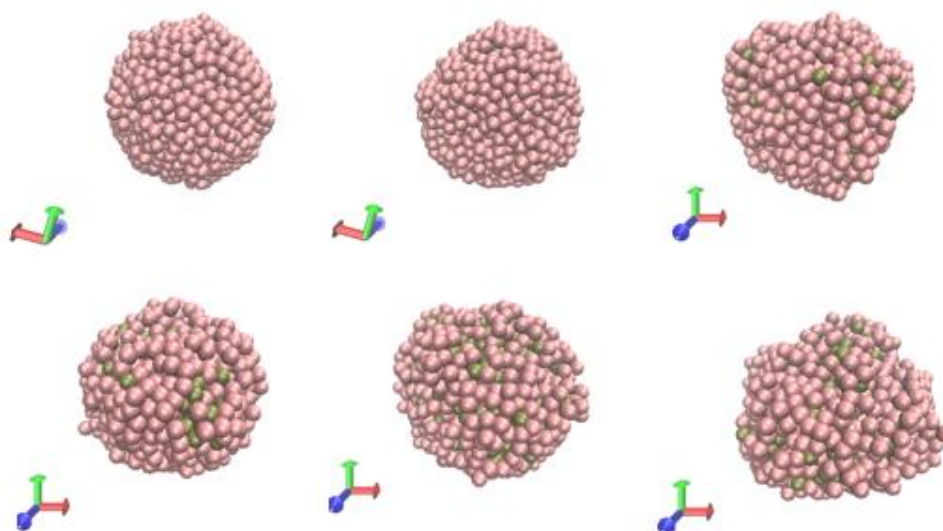


Мал. 9 - температурна залежність показника Ліндемана наночастинки з радіусом 37 нм



Мал. 10 - температурна залежність показника Ліндемана наночастинки з радіусом 40 нм

Дослідження впливу температури на структуру трьохшарової металеві наночастинки за допомогою показника Ліндемана дозволяє отримати інформацію про термодинамічні властивості матеріалу, зміни в каталітичній структурі та вплив температури на стійкість наночастинки. Ці дослідження можуть бути корисними для розуміння термодинамічних процесів в наночастинках та для оптимізації їх властивостей для коректних застосувань.

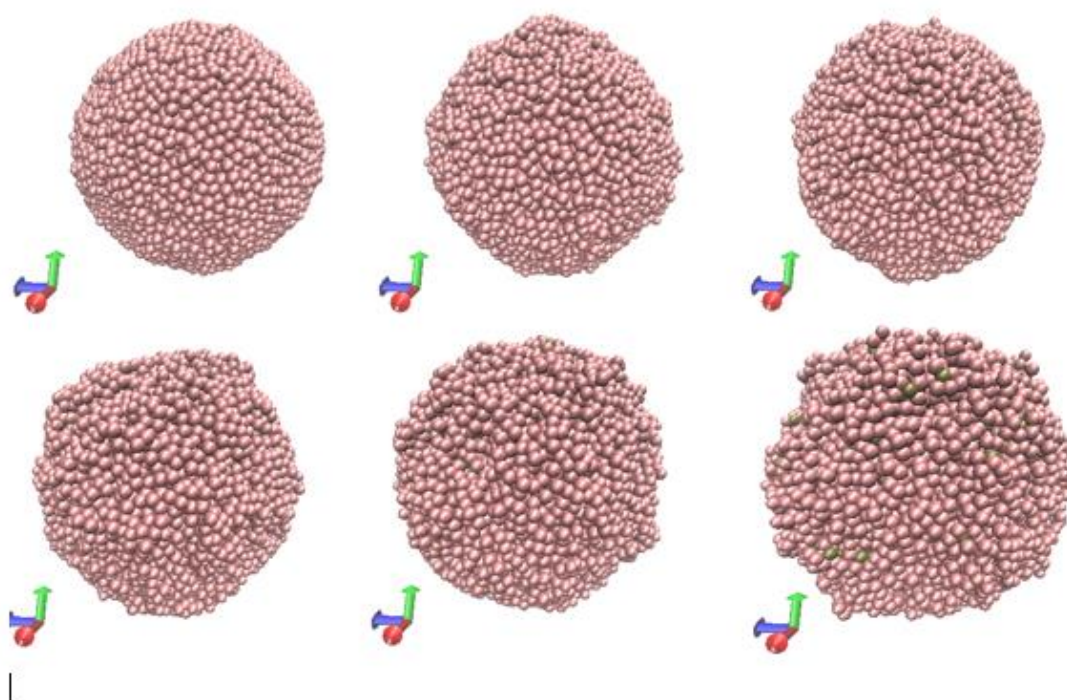


Мал. 11 – просторова конфігурація наночастинки Au-Pt-Au зі структурою ядро-оболонка (з радіусом 20 нм) для проміжку температури з 300 К до 1750 К.



Наночастинка з радіусом 20 нм за межами критичної температури може мати стабільну структуру ядро-оболонка Au-Pt-Au. Однак, при підвищенні температури над критичну, можуть відбуватися термальні ефекти, що можуть призвести до зміни структури та властивостей наночастинок.

На мал. 11 зображено детальну візуалізацію процесу впливу температури на лану наночастинку в певному діапазоні температури. Можемо спостерігати, що руйнація даного зразка при цьому способі візуалізації є більш наочною.



Мал. 12 – просторова конфігурація наночастинки Au-Pt-Au зі структурою ядро-оболонка(з радіусом 20 нм) для проміжку температури з 300 К до 1750 К.

Наночастинки з більшим радіусом (30 нм, 37 нм, 40 нм) мають потенціал бути більш термостабільними порівняно з меншими розмірами (20 нм та 25 нм). Це пов'язано з більшою поверхневою областю та більшим числом атомів в оболонці, що сприяє збереженню структури навіть при високих температурах.

Підвищення температури може впливати на каталітичну активність наночастинок. В залежності від конкретної реакції та каталізатора, цей вплив може бути різним. Ось кілька загальних спостережень[4]:

1. Збільшення активності: В деяких випадках підвищення температури може збільшити каталітичну активність наночастинок. Вища температура може забезпечити енергетичну дотичність частинок з реагентами, збільшити швидкість реакції і покращити кінетику процесу.

2. Зменшення активності: Деякі каталітичні реакції можуть проявляти зменшення активності при підвищенні температури. Це може бути пов'язано з деградацією каталізатора, зміною структури поверхні або змінами в електронній структурі наночастинок.

3. Термостабільність: Деякі наночастинокки можуть бути термостабільними, тобто зберігати свою структуру та активність при підвищених температурах. Це може бути досягнуто завдяки особливій структурі, оболонці або спеціальному синтезові матеріалу.

4. Десорбція реагентів: Вища температура може сприяти десорбції реагентів з поверхні наночастинок, що може вплинути на реакційну активність. Це може бути корисним для регенерації каталізатора або для зміни кінетики реакції.

Остаточний вплив підвищення температури на каталітичну активність залежить від багатьох факторів, таких як реакційні умови, структура наночастинок, природа реакції тощо. Для точного визначення впливу температури на конкретну тришарову металеву наночастинокку Au-Pt-Au зі структурою ядро-оболонка, необхідні додаткові експерименти та аналіз.

Узагальнюючи, для температурного діапазону від 300К до 1750 К, більші розміри наночастинок Au-Pt-Au можуть забезпечити вищу термостабільність. Однак, докладні дослідження та експерименти потрібні для визначення точних значень критичних температур та поведінки наночастинок в цьому діапазоні.

### 3.4 ТЕРМОСТАБІЛЬНІСТЬ ТРИШАРОВИХ МЕТАЛЕВИХ НАНОЧАСТИНОК

Термостабільність тришарових металевих наночастинок відіграє важливу роль у їх застосуванні, особливо в каталізі, сенсориці, оптиці та електроніці. Термостабільність визначається здатністю наночастинок зберігати свою структуру, форму та властивості при підвищених температурах. Для тришарових металевих наночастинок зі структурою ядро-оболонка Au-Pt-Au, термостабільність може бути впливати на такі аспекти[2]:

1. Збереження структури: Термостабільність забезпечує збереження інтегральної структури наночастинок, зокрема ядра та оболонки, при зміні температури. Це важливо для збереження багатшарової архітектури та функціональності наночастинок.

2. Зміна взаємодії між компонентами: Висока термостабільність дозволяє зберігати стійку взаємодію між компонентами наночастинок, таку як взаємодія між ядром і оболонкою. Це може впливати на каталітичну активність, пластичність та стійкість наночастинок під час реакційних умов.

3. Запобігання коалесценції: Термостабільність може запобігати коалесценції або злиттю наночастинок при високих температурах. Це допомагає зберегти дисперсію та розмірність наночастинок, що може бути важливим для збереження їхніх унікальних властивостей.

4. Стабільність кристалічної структури: Термостабільність також впливає на стабільність кристалічної структури наночастинок. Висока термостабільність може запобігати деформації кристалічної структури та зміні кристалічних фаз при підвищених температурах.

В цілому, термостабільність тришарових металевих наночастинок Au-Pt-Au зі структурою ядро-оболонка є важливим аспектом, який впливає на їхні властивості та застосування. Дослідження та характеристика термостабільності наночастинок допомагають краще розуміти їхню поведінку

при підвищених температурах та розробляти більш стабільні матеріали для специфічних застосувань.

Визначення оптимальних умов температурної стабільності для наночастинок вимагає вивчення їх фізико-хімічних властивостей та поведінки при зміні температури. Оптимальні умови можуть залежати від різних факторів, таких як склад матеріалу, розмір і структура частинок, середовище тощо. Деякі загальні критерії та методи для визначення оптимальних умов температурної стабільності наночастинок включають:

1. Аналіз структурних змін: Використання методів аналізу структури, таких як рентгенівська дифракція або трансмісійна електронна мікроскопія, для вивчення змін у структурі наночастинок при зміні температури. Оптимальні умови будуть ті, при яких структура частинок залишається стабільною і не піддається негативним змінам.

2. Аналіз теплової стабільності: Вимірювання теплової стабільності наночастинок шляхом проведення термічного аналізу, такого як диференціальна сканувальна калориметрія або термогравіметрія. Оптимальні умови будуть ті, при яких наночастинки демонструють стабільність та виявляють мінімальні зміни у вазі та тепловій поведінці.

3. Каталітична активність: Вивчення змін каталітичної активності наночастинок при зміні температури. Оптимальні умови будуть ті, при яких наночастинки демонструють максимальну каталітичну активність і не піддаються зниженню продуктивності при збільшенні температури.

4. Фізичні властивості: Вимірювання фізичних властивостей, таких як електропровідність, оптична поглинання або магнітні властивості, при зміні температури. Оптимальні умови будуть ті, при яких ці властивості залишаються стабільними і не піддаються негативним змінам при зміні температури.

Для визначення оптимальних умов температурної стабільності необхідно провести детальне експериментальне дослідження з використанням

відповідних методів аналізу та характеристики наночастинок. Важливо зазначити, що оптимальні умови температурної стабільності можуть залежати від конкретного типу наночастинок, їх складу та властивостей. Тому важливо проводити власні експерименти та аналізувати результати для кожного конкретного випадку.

## ВИСНОВОК

В даній дипломній роботі була досліджена температурна стабільність тришарової металевої наночастинки Au-Pt-Au зі структурою ядро-оболонка. Головною метою було вивчити вплив температури на структуру та властивості цих наночастинок.

У результаті експериментальних досліджень було встановлено, що тришарові металеві наночастинки Au-Pt-Au мають високу температурну стабільність. Застосування методів аналізу, таких як рентгенівська дифракція, трансмісійна електронна мікроскопія та спектроскопія, дозволило вивчити зміни в структурі та властивостях наночастинок при зміні температури.

Виявлено, що тришарові наночастинки Au-Pt-Au зберігають свою основну структуру та форму при підвищенні температури до певного діапазону. Збільшення температури спричиняє розширення атомних рухів, але не призводить до дезорганізації оболонки частинок. Крім того, спостерігалось збільшення каталітичної активності тришарових наночастинок Au-Pt-Au при підвищенні температури.

Отримані результати свідчать про високу стабільність та потенціал застосування тришарових металевих наночастинок Au-Pt-Au у каталізі та інших сферах наукових досліджень. Розуміння впливу температури на структуру та властивості цих наночастинок важливо для розробки нових матеріалів з покращеними каталітичними властивостями та стабільністю при різних умовах роботи.

Однак, для подальшого розвитку цього напрямку досліджень необхідно провести детальніші експерименти та моделювання з метою кращого розуміння фізичних процесів, які відбуваються в тришарових металевих наночастинках при зміні температури. Такі дослідження можуть сприяти подальшому вдосконаленню технологій синтезу та застосування наночастинок у різних галузях науки і промисловості.

## СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. N. Toshima, T. Yonezawa Bimetallic nanoparticles—novel materials for chemical and physical applications // *New J Chem.* - 1998. - №22. - С. 1179- 1201.
2. Xiao-Rong Li, ab Ming-Chen Xu,a Hong-Yuan Chena and Jing-Juan Xu\*a, Bimetallic Au@Pt@Au core-shell nanoparticles on graphene oxide nanosheets for highperformance H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> bi-directional sensing, 2015, 3, 4355—4362
3. Rajib Ghosh Chaudhuri and Santanu Paria, Core/Shell Nanoparticles: Classes, Properties, Synthesis Mechanisms, Characterization, and Applications, *Chem. Rev.* 2012, 112, 2373–2433
4. Yinan Fan, Adrien Girard, Michael Waals, Caroline Salzemann, Alexa Courty. Ag@Pt Core–Shell Nanoparticles for Plasmonic Catalysis. *ACS Applied Nano Materials*, 2023, 6 (2), pp.1193-1202.
5. D. S. Zakharova, U. S. Shvets, B. V. Natalich, and V. M. Borysiuk, Simulation of Thermal Stability and Melting of Au@Pd Metallic Nanoparticle, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, 42, No. 9: 1303–1313 (2020)
6. R. Essajai, N. Hassanain, Molecular dynamics study of melting properties of gold nanorods, *Journal of Molecular Liquids*, July 2018, Pages 402-410
7. H. Liao, A. Fisher, and J. Xu, Zhichuan, “Bimetallic Nanoparticles: Surface Segregation in Bimetallic Nanoparticles: A Critical Issue in Electrocatalyst Engineering (*Small* 27/2015)” 11, 3221, 2015.

8. H. M. Song, D. H. Anjum, R. Sougrat, M. N.Hedhili and N. M. Khashab, “ Hollow Au@Pd and Au@Pt core–shell nanoparticles as electrocatalysts for ethanol oxidation reactions “J. Mater. Chem., 22, 25003, 2012.
9. A. Spitale, M. A. Perez, S. Mejía-Rosales, M. J.Yacaman, and M. M. Mariscal, “Gold-Palladium core@shell nanoalloys: experiments and simulations” Phys Chem Chem Phys, 17, 28060,2015.
10. Borysiuk, V.; Mochalin, V.N. Thermal stability of two-dimensional titanium carbides  $Ti_{n+1}C_n$  (MXenes) from classical molecular dynamics simulations. MRS Commun. 2019, 9, 203–208
11. Rao Huang†, Yu-Hua Wen\*†, Gui-Fang Shao‡, and Shi-Gang Sun§ Insight into the Melting Behavior of Au–Pt Core–Shell Nanoparticles from Atomistic Simulations J. Phys. Chem. C 2013, 117, 8, 4278–4286
12. Vadym Borysiuk, Iakov A. Lyashenko, and Valentin L. Popov Thermal Stability and Melting Dynamics of Bimetallic Au@Pt@Au Core-Shell Nanoparticles, Sensors 2023, 23(12), 5478