

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

Факультет електроніки та інформаційних технологій

КАФЕДРА НАНОЕЛЕКТРОНІКИ ТА МОДИФІКАЦІЇ ПОВЕРХНІ

МАГІСТЕРСЬКА РОБОТА

за напрямом підготовки 8.153 – «Мікро – та наносистемна техніка»

на тему:

**«КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ОБ'ЄКТІВ ТИПУ
НАНОСТЕРЖНЯ МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОЇ ДИНАМІКИ»**

ПОПЕСКУ ГЕННАДІЙ КОСТЯНТИНОВИЧ

Завідувач кафедру

Науковий керівник

_____ проф. О.Д. Погребняк

_____ д. ф. м. О. О. Дрозденко

«__» _____ 2020р.

«__» _____ 2020р

ЗМІСТ

ВСТУП	3
РОЗДІЛ 1. ПОТЕНЦІАЛ ВИКОРИСТАННЯ МОДЕЛЮВАННЯ ДЛЯ НАНОСТЕРЖНЯ	5
1.1. Історична довідка та світове значення.....	5
1.2. Перспективи застосування наночастинок Ag в медичній галузі.	11
1.3. Обмеження та застереження наностержня.....	13
РОЗДІЛ 2. ОСНОВНІ МЕТОДИКИ МОДЕЛЮВАННЯ НАНООБ'ЄКТІВ ...	15
2.1. Опис етапів моделювання.	15
2.2. Моделювання наноб'єктів методом молекулярної динаміки.....	16
2.3. Приклади взаємодії молекулярної динаміки.....	20
РОЗДІЛ 3. АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ ТА МОДЕЛЮВАННЯ.....	30
3.1. Обчислення та збір даних.	30
3.2. Результати і обговорення срібного наностержня.	44
3.2.1. Властивості нанострутних конструкцій.	50
3.2.2. Приготування детекторного реагенту.	52
3.2.3. Наноманіпуляція із системою доповненої реальності.	54
3.3. Моделювання наностержня для питань виробництва процесорів.....	55
РОЗДІЛ 4. ТЕХНІКА БЕЗПЕКИ ПРИ РОБОТІ З ПЕРСОНАЛЬНИМ КОМП'ЮТЕРОМ.....	62
4.1. Забезпечення техніки безпеки та охорони праці при роботі з ПК.....	62
ВИСНОВОК.....	67
СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ	69

ВСТУП

Нанородні полімерні композити дозволяють самостійно збирати наностержні в ієрархічні структури з унікальними макроскопічними властивостями, що виникають із їх нанорозмірного порядку. Включення наностержнів може надати неорганічні характеристики, такі як жорсткість і провідність, а полімер може одночасно організовувати нанородів і органічні характеристики, такі як гнучкість і технологічність. Зокрема, надмолекулярні структури можуть бути самостійно зібрані там, де нанородів з'єднані в перколяційні мережі. Ці суцільні структури неорганічних нанородів можуть надати, наприклад, чудові електричні або механічні властивості нанокompозитному матеріалу. Крім того, наш вибір компонентів нанородів та полімерів, а також історія обробки матеріалу може дозволити нам адаптувати морфологію цих композицій нанородів до полімеру для оптимізації продуктивності матеріалу.

Різні високоякісні гетероструктури наностержні та квантові структури на основі нанородів ZnO також були підготовлені методом MOVPE і охарактеризовані за допомогою скануючої електронної мікроскопії, просвічувальної електронної мікроскопії та оптичної спектроскопії. Зі спектрів фотолюмінесценції багатоквантових ям нанородних структур $ZnO / Zn_{0.8}Mg_{0.2}O$ ми спостерігали систематичний зсув синього кольору в положенні піку PL через ефект квантової обмеженості носіїв у нанородних квантових структурах. Для коаксіальних нанострутних гетероструктур $ZnO / ZnMgO$ інтенсивність фотолюмінесценції суттєво зросла, мабуть, за рахунок пасивації поверхні та утримання носія. На додаток до росту та характеристик нанородів ZnO та їх квантових структур, ми виготовили наномасштаб електронні пристрої на основі нанородів ZnO .

Нанотропи срібла діаметром ~ 100 нм та довжиною ~ 5 мкм були синтезовані підходом м'якої фази розчину у присутності поля (вінілпіролідону) (PVP), який використовувався як захисний агент. Отримані

срібні наностержні характеризували за допомогою скануючої електронної мікроскопії (SEM), просвічувальної електронної мікроскопії (TEM), рентгенівської дифракції (XRD) та УФ-видимого спектру. Молярне співвідношення та швидкість введення PVP та AgNO₃ зіграли важливу роль у контролі морфології та співвідношення сторін наностержнів.

РОЗДІЛ 1. ПОТЕНЦІАЛ ВИКОРИСТАННЯ МОДЕЛЮВАННЯ ДЛЯ НАНОСТЕРЖНЯ

1.1. Історична довідка та світове значення.

Дідусем нанотехнологій можна вважати грецького філософа Демокріта. 2400 років тому він вперше використав слово "атом" для опису найменшої частки речовини.

1905 Швейцарський фізик Альберт Ейнштейн Опубліковалработу, в якій довів, що розмір молекули цукру становить приблизно 1 нанометр.

1931 Німецькі фізики Макс Кнолл і Ернст Руска створили електронний мікроскоп, який вперше дозволив досліджувати нанооб'єктів.

1959 Американський фізик Ричард Фейнман вперше опублікував роботу, де оцінювалися перспективи мініатюризації.

Основні положення нанотехнологій були намічені в його легендарної лекції "Там у низу - багато місця" ("There's Plenty of Room at the Bottom "), яку він виголосив у Каліфорнійському Технологічному інституті. Фейнман науково довів, що з точки зору фундаментальних законів фізики немає ніяких перешкод до того, щоб створювати речі прямо з атомів.

Тоді його слова здавалися фантастикою тільки з однієї причини: ще не існувало технології, що дозволяє оперувати окремими атомами (тобто пізнати атом, взяти його і поставити на інше місце) .Щоб стимулювати інтерес до цієї області, Фейнман призначив приз в \$ 1000, тому, хто вперше запише сторінку з книги на голівці шпильки, що, до речі, здійснилося вже в 1964 році.

1968 Альфред Чо і Джон Артур, співробітники наукового підрозділу американської компанії Bell, розробили теоретичні основи нано-обробки поверхонь.

1974 Японський фізик Норіо Танігучі ввів у науковий оборот слово "нанотехніки", запропонувавши називати так механізми розміром менше 1 мікрона.

1981 Німецькі фізики Герд Бінніг і Генріх Рорер створили тунельний мікроскоп-прилад, що дозволяє здійснювати вплив на речовина на атомарному рівні. Через чотири роки вони отримали Нобелівську премію.

1985 Американський фізики Роберт Керл, Херольд Крото і Річард Смолл створили технологію, що дозволяє точно вимірювати предмети діаметром в один нанометр.

1986 Створено атомно силовий мікроскоп, що дозволяє, в відміну від тунельного мікроскопа, здійснювати взаємодію з будь-якими матеріалами, а не тільки з провідними.

1986 Нанотехнології стала відома широкому загалу. Американський футуролог Ерік Дрекслер опублікував книгу, в якій передбачив, що нанотехнологія незабаром почне активно розвиватися.

1989 Дональд Ейглер, співробітник компанії ІВМ, виклав назву своєї фірми атомами ксенону.

1998 Голландський фізик Сеез Деккер створив нанотранзистори.

2000 Адміністрація США оголосила "Національну нанотехнологічну ініціативу "(National Nanotechnology Initiative). Тоді з федерального бюджету США було виділено \$ 500 млн. У 2002 сума асигнувань була збільшена до \$ 604 млн. На 2003 рік "Ініціатива" запросила \$ 710 млн., а в 2004 році уряд США прийняло рішення збільшити фінансування наукових досліджень в цій області до \$ 3,7 млрд. протягом чотирьох років. В цілому, світові інвестиції в нано в Ньюго 2004 року становили близько \$ 12 млрд.

2004 Адміністрація США підтримала "Національну наномедіцинську ініціативу" як частина National Nanotechnology Initiative.

Стрімкий розвиток нанотехнологій викликано ще й потребами суспільства у швидкій переробці величезних масивів інформації. Сучасні кремнієві чіпи можуть при всіляких технічних хитрощах зменшуватись ще приблизно до 2012 року. Але при ширині доріжки в 40-50 нанометрів зростуть квантовомеханічні перешкоди: електрони почнуть пробивати переходи в транзисторах за рахунок тунельного ефекту (про нього мова піде нижче), що рівнозначно короткого замикання. Виходом могли б послужити наночіпи, в яких замість кремнію використовуються різні вуглецеві з'єднання розміром в кілька нанометрів. В даний час ведуться найбільш інтенсивні розробки в цьому напрямі.

Точки на паличці

Екрани смартфонів, які самі, без будь-яких додаткових шарів, фіксують світловий потік. Відеопанелі, здатні безпосередньо, без проводів або радіомодулів, обмінюватися даними. Дисплеї, підживлює енергією сонця під час відсутності зовнішніх фотоелементів. Все це обіцяє стати реальністю в не далекому майбутньому - завдяки квантовим наностержням (nanorods), перші робочі зразки яких вже отримано і щосили удосконалюються. Інше питання, чи знайдуться інвестори, щоб допомогти вивести ці дослідження з лабораторної стадії?

Функціональні технології в наші дні впевнено освоїли субмікронний масштаб завдяки квантовим точкам. Напівпровідникові об'єкти (найчастіше на основі селеніду цинку, селеніду кадмію або фосфіду індію) розмірами в лічені нанометра перетворюють падаючий на них короткохвильового світло в випромінювання з більшою довжиною хвилі. Причому ця довжина фіксована і визначається одними тільки фізичними габаритами квантової точки: чим вони менші, тим ближче випускається світло до синього кінця видимого спектру.

Крім того, квантові точки можуть випромінювати світло і самі, якщо прикласти до них відповідну напругу. В сучасних відеопанелях найчастіше зустрічаються не самовипромінювальне, а індуковані (підсвічуються) фоновими світлодіодами з нітриду галію точки двох сортів. Одні з них перетворюють синє випромінювання з довжиною хвилі 450-495 нм в практично монохромне червоне (638 нм, характерні розміри самих точок - 3,0-5,0 нм), інші - в зелене (527 нм, точки від 1,5 до 2,5 нм).

Квантові точки вважаються сьогодні найбільш перспективною технологією для смартфонів, комп'ютерних та телевізійних екранів. Однак в щось принципово нове вони дисплейну панель не перетворюють. Зовсім інша справа - наностержні, які створила та вивчає група дослідників з Іллінойського університету в Урбані-Шампейн спільно з колегами з південнокорейського Інституту досліджень в галузі електроніки та телекомунікацій, а також з американської компанії Dow Chemical.

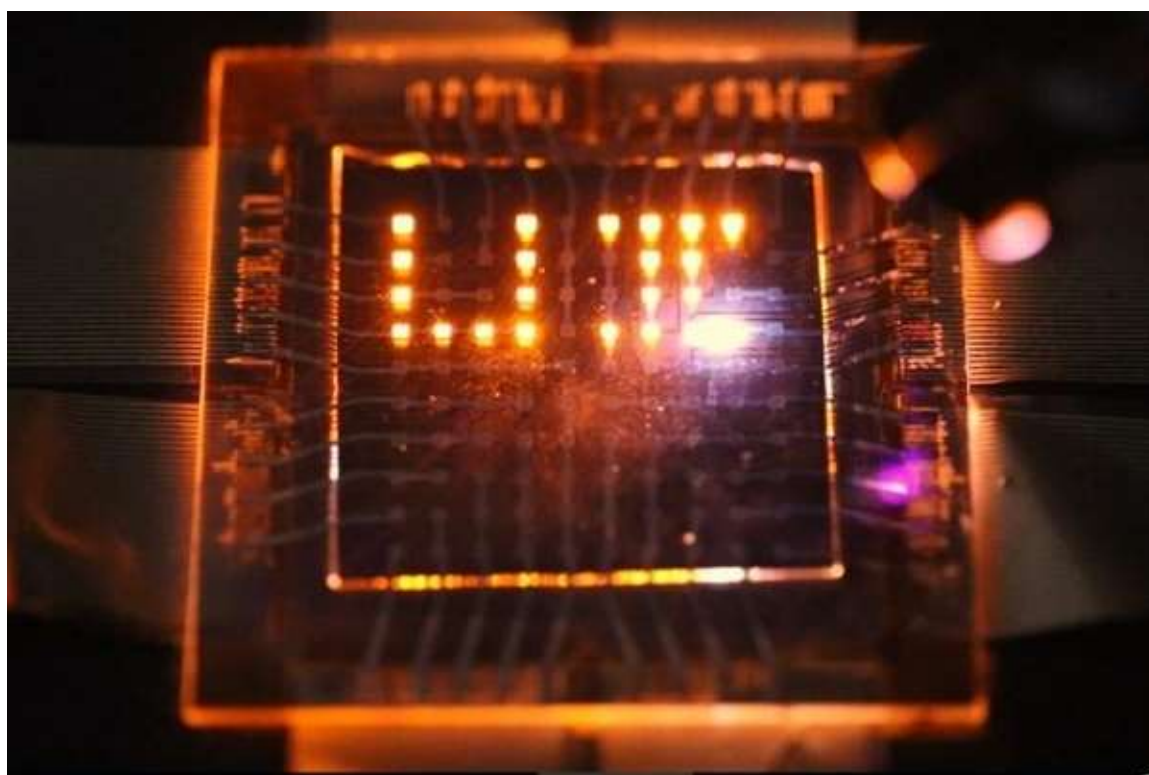


Рис. 1. Лазерний промінь виписує літери UI, що символізують Іллінойський університет, на великій сітці з пікселів з квантовими наностержнями, які у відповідь на опромінення світяться червоним.

Наностержні гантелевидної форми з довжиною «грифа» близько 5 нм і «обважнювачами» близько 1 нм на кінцях утворені напівпровідниками трьох різновидів. Один з цих матеріалів, який формує ядра «обважнювачів», здатний перетворювати електричний струм у видиме світло і навпаки. Зовнішні шари «обважнювачів» і «гриф» служать для транспортування електронів і дірок - негативних і позитивних зарядів, - причому працюють вони в залежності від знака прикладеної до наностержня напруги в протифазі.

У режимі випромінювання «гриф» наностержня направляє потік електронів до внутрішніх областям - ядер - «обважнювачів», а зовнішні їх шари - оболонки - генерують в тому ж напрямку потік дірок. Рекомбінація негативних і позитивних зарядів в ядрах породжує кванти видимого світла: наностержень випромінює обома своїми «обважнювачами».

При зміні знака прикладеної напруги процес йде у зворотний бік. Фотони ззовні, потрапляючи на напівпровідникові ядра, породжують електрони і дірки. «Гриф» сприяє виведенню електронів з області ядра, тоді як оболонка відкриває дорогу діркам. В результаті, якщо з досить високою частотою (мова йде про десятки тисяч герц) змінювати напругу, людське око не зможе вловити мерехтіння світлового потоку, - він буде здаватися безперервним і рівним.

Приборкання дисплейної нанорідин

Дисплей, складений з такого роду наностержней, виявляється вже принципово новим пристроєм в порівнянні зі звичними нам сьогодні. Скажімо, він без зусиль зможе вибірково коригувати свою яскравість в залежності від зовнішнього засвічення. Якщо екран на квантових наностержнях частково освітлений сонячними променями, а частково залишається в тіні, не важко буде запрограмувати його мікроконтролер так, щоб фіксувати більший світловий потік його елементи самі випускали світло інтенсивніше, - і навпаки.

Світлочутливість кожного базового елемента такого дисплея дозволить обійтися без додаткових детекторів (наприклад, інфрачервоних), які в наші дні замінюють собою контактні датчики на великих інтерактивних екранах. Кожен піднесений до панелі на наностержня палець буде по контрасту з фоном впевнено розпізнано, що дозволить фіксувати і відпрацьовувати керуючі жести - в тому числі мультитач. Зрозуміло, така панель зреагує і на лазерну указку.

Цікавими є й комунікативні можливості дисплеїв на наностержнях. Якщо один такий екран розміщений навпроти іншого, вони здатні будуть забезпечити впевнений обмін інформацією без застосування проводів і радіохвиль. Це може стати в нагоді в безлічі екстремальних додатків (підводні роботи, обслуговування апаратів в космосі тощо). Навіть розумні окуляри для повсякденного носіння, якщо вони коли-небудь за поширеністю наздоженуть смартфони, виграють від можливості безпосередньо обмінюватися даними з рекламними та інформаційними екранами.

Дослідники наностержней стверджують, що генерується їх дисплеєм в фазі поглинання світла енергії буде цілком достатньо якщо не для повноцінної підзарядки смартфона, то принаймні для відчутного продовження часу його автономної роботи в умовах достатньої освітленості. Правда, для цього необхідно спершу такі дисплеї створити. Поки наностержні забезпечують роботу лише досить великих і до того ж монохромних (червоних) пікселів, - але розробники впевнені, що це тільки початок.

Дослідники з університету Іллінойса в Урбані-Шампейн разом з колегами опублікували результати своїх досліджень в журналі Science - і повністю ентузіазму рухатися далі. Головна проблема, яка стоїть перед ними зараз, - мініатюризація. Сам процес формування нанорозмірних «гантелей» порівняно простий, але є нюанс: всі використовувані для цього матеріали при нормальних (в фізико-хімічному сенсі) умовах являють собою розчини.

З одного боку, це прекрасно, тому що здешевлює виробництво, дозволяє в один присід отримувати міриади наностержней, а потім покривати «дисплейної рідиною» практично будь-яку поверхню і використовувати її в якості екрану після висихання. З іншого - не дуже, оскільки таким чином можна отримувати лише досить великі пікселі, кожен з яких містить безліч нанорозмірних «гантелей».

Щоб істотно, хоча б до десятків мікрон, зменшити розміри одиночного пікселя, необхідно вдаватися до розробленим для мікроелектроніки методам на кшталт літографії. Але в цьому випадку не обійтися без розчинників - які практично гарантовано зруйнують наностержні. Можливо, проблему вирішить створення друкувального «чорнилом» з наностержня принтера з мікронними допусками зміщення головки - або ж пошук інших матеріалів і технологій для формування більш стійких «гантелей». Але все це вимагає додаткових інвестицій.

Так чи інакше, наностержні обіцяють не просто серйозну підвіжку, а справжній переворот в дисплеестроєнні. Чи знайдуться кошти для їх вдосконалення? Чи готові будуть глобальні лідери дисплейного ринку, лише недавно почали поступовий перехід від традиційних РК до OLED і квантовим точкам, зробити ставку на ще одну принципово нову технологію? Час покаже. А поки можна вивчити на YouTube знятий в лабораторії Іллінойського університету ролик, в якому великі пікселі, що містять наностержні, з готовністю світяться у відповідь на стимулювання лазерною указкою.

1.2. Перспективи застосування наночастинок Ag в медичній галузі.

Наночастинки срібла знаходять широке застосування в медицині для лікування і діагностики різних захворювань: наприклад, для лікування дерматитів інфекційного походження розроблена мазь на основі наносрібла, для лікування анемії - капсули нанозаліза, нанодисперсний кремнез (силікс) - для лікування отруєнь, ліпофламін - для лікування інфаркту міокарда. Наносрібло використовується для пригнічення вірусів ВІЛ і герпесу, як

антимікробний і антибактеріальний компонент в композиціях, в імунохімічних методах дослідження і для вивчення біологічних ефектів. Колоїдне наносрібло входить до складу лікувально-косметичних засобів для захисту шкіри від сонячних опіків.

В даний час квантові точки сульфідів, в тому числі сульфиду срібла, починають застосовувати в якості флуоресцентних міток в біології та медицині. Збуджений сигнал багаторазово перевершує по яскравості використовуються в даний час органічні барвники. Це робить сульфідні перспективними матеріалами для розпізнавання біологічних об'єктів і застосування в медичній діагностиці та біотехнології.

Колоїдний розчин наночастинок нульвалентного металевого срібла входить до складу гелеобразного наноструктурованого композитного імплантату для пухкого заповнення зони дефекту дистракційного регенерату трубчастих кісток. Також в хірургії, зокрема для лікування ран, опіків, ушкоджень, як мінімально травматичних, біосумісних і біорозчинних антимікробних пов'язок для пошкодженої шкіри можуть бути використані плівки з наноструктурованих сріблом, антибактеріальні пов'язки, до складу яких в якості диспергируючих агентів входять поліетиленгліколь, гліцерин і наночастинок срібла. Плівковий матеріал, що включає колоїдний розчин наночастинок срібла, характеризується високою бактерицидною активністю, особливо по відношенню до штамів *Salmonella typhimurium* і *Staphilococcus aureus*, дозволяє підтримувати надходження в область рани кисню, необхідного для загоєння, прискорити процеси регенерації та епіталізації, виключити травматичну процедуру зняття плівки за рахунок біодеградації матеріалу аж до повного його розкладання на загоювання поверхні. Дослідники пропонують ряд ранових покриттів на основі тканих і нетканих матеріалів природного або синтетичного походження, що містять наночастинок срібла.

Розроблено також антиінфекційні пластирі з наносрібла для використання при лікуванні грижі. Експериментальні дослідження показали, що при застосуванні таких пластирів відпадає необхідність приймати велику кількість антибіотиків для боротьби з інфекцією при лікуванні грижі.

Останнім часом все більш широке поширення наночастинки срібла отримують в області онкології. Наприклад, склад лікарського засобу для лікування раку легенів включає наступні компоненти: порошок сферичних наночастинок срібла діаметром 1-5 нм, фармацевтичний диспергатор карбопол, триетаноламін, глюкозу, чисту воду в якості розчинника. Результати експериментів показують, що склад протиракових препаратів з наносрібла може повністю пригнічувати проліферацію клітини A549 людського недрібноклітинного раку легенів і привести до смерті всіх клітин.

1.3. Обмеження та застереження наностержня

Наностержень - це варіація наноструктури, за формою нагадує стрижень. Іншими словами, це наноструктура, що має подовжену форму. Хоча в звичайному житті під стрижнем часто мається на увазі циліндричний об'єкт, для наностержней це може бути не так. Іноді наностержні також називаються наностойками.

Формально вважається, що серед усіх наноструктур до наностержня слід віднести ті, у яких довжина більш ніж в три рази перевищує будь-який інший вимір. Крім того, між собою два виміри, які не є довжиною, відрізняються не більше ніж в три рази.

Найближчий «родич» наностержня серед наноструктур - це нановолокно. Між собою ці об'єкти відрізняються лише співвідношенням характерних розмірів (якщо для наностержня правильне співвідношення 1: 3, то для нановолокна - не менше 1:10).

Хоча під стрижнем в макросвіті зазвичай має на увазі не порожня структура, іноді до них відносять навіть деякі одностінні вуглецеві нанотрубки. Це пояснюється відсутністю формального поділу всіх цих понять.

Головна перевага наностержня, як і інших наноструктур, полягає в тому, що їх властивості можуть істотно відрізнятися від властивостей об'ємного матеріалу, з якого вони зроблені. Це відкриває більш широкі можливості їх практичного застосування.

РОЗДІЛ 2. ОСНОВНІ МЕТОДИКИ МОДЕЛЮВАННЯ НАНООБ'ЄКТІВ

2.1. Опис етапів моделювання.

Моделювання молекулярної динаміки вимагає визначення потенційної функції або опису термінів, з якими будуть взаємодіяти частинки в моделюванні. У хімії та біології це зазвичай називають силовим полем, а у фізиці матеріалів - міжатомним потенціалом. Потенціали можуть бути визначені на багатьох рівнях фізичної точності; ті, які найчастіше використовуються в хімії, засновані на молекулярній механіці і втілюють класичну механічну обробку взаємодій частинок, яка може відтворювати структурні і конформаційні зміни, але зазвичай не може відтворювати хімічні реакції.

Скорочення від повністю квантового опису до класичного потенціалу тягне за собою два основні наближення. Перший - наближення Борна-Оппенгеймера, в якому зазначається, що динаміка електронів настільки швидка, що їх можна вважати миттєво реагуючими на рух їх ядер. Як наслідок, вони можуть розглядатися окремо. Другий - розглядає ядра, які набагато важче електронів, як точкові частинки, що слідує за класичною ньютонівською динамікою. В класичній молекулярній динаміці ефект електронів апроксимується як одна поверхня потенційної енергії, як правило, представляє основний стан.

Коли потрібні більш дрібні рівні деталізації, використовуються потенціали на основі квантової механіки; деякі методи намагаються створити гібридні класичні/квантові потенціали, де основна частина системи розглядається класично, але невелика область розглядається як квантова система, яка зазвичай проходить хімічне перетворення.

2.2. Моделювання нанооб'єктів методом молекулярної динаміки.

Емпіричні потенціали, що використовуються в хімії, часто називають силовими полями, тоді як ті, що використовуються у фізиці матеріалів, називають міжатомними потенціалами.

Більшість силових полів в хімії є емпіричними і складаються з підсумовування зв'язаних сил, пов'язаних з хімічними зв'язками, кутами зв'язків і діедралей зв'язку, і незв'язаних сил, пов'язаних з силами Ван-дер-Ваальса і електростатичним зарядом. Емпіричні потенціали представляють квантово-механічні ефекти обмеженим чином за допомогою спеціальних функціональних наближень. Ці потенціали містять такі вільні параметри, як атомний заряд, Ван-дер-Ваальсові параметри, що відображають оцінки атомного радіуса, і рівноважну довжину зв'язку, кут і діедраль; їх отримують шляхом підбору детальних електронних розрахунків (квантово-хімічні моделювання) або експериментальних фізичних властивостей, таких як пружні константи, параметри решітки і спектроскопічні вимірювання.

Через нелокальний характер незв'язаних взаємодій, вони включають принаймні слабкі взаємодії між усіма частинками в системі. Його розрахунок зазвичай є вузьким місцем у швидкості симуляції МД. Щоб знизити обчислювальну вартість, силові поля використовують числові апроксимації, такі як зміщені радіуси відсічення, алгоритми поля реакції, підсумовування сітки Евальда частинок, або новіші частинки – частинки-сітки (РЗМ).

З одного боку, хімічні силові поля зазвичай використовують попередньо встановлені зв'язки (виключення - це невизначена динаміка) і, таким чином, не здатні явно моделювати процес руйнування хімічних зв'язків і реакцій. З іншого боку, багато потенціалів, що використовуються у фізиці, наприклад, на основі формалізму порядку зв'язків, можуть описувати кілька різних координат системи і розриву зв'язків. Приклади таких потенціалів включають потенціал Бреннера для вуглеводнів і його подальші розробки для систем С-

Si-H і C-O-H. Потенціал ReaxFF можна вважати повністю реактивним гібридом між потенціалами порядку зв'язків і полями хімічних сил.

Пара потенціалів проти потенціалів багатьох тіл

Функції потенціалу, що представляють незв'язану енергію, формуються як сума за взаємодією між частинками системи. Найпростішим вибором, застосованим у багатьох популярних силових полях, є «парний потенціал», в якому загальну потенційну енергію можна обчислити з суми енергетичних внесків між парами атомів. Прикладом такого парного потенціалу є незв'язаний потенціал Леннарда-Джонса (який також називається потенціалом 6–12), який використовується для розрахунку сил Ван-дер-Ваальса.

$$U(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (1)$$

Іншим прикладом є Born (іонна) модель іонної решітки. Перший член наступного рівняння є законом Кулона для пари іонів, другий член - відштовхування короткохвильового поля, що пояснюється принципом виключення Паулі, а кінцевий член - термін дисперсійного взаємодії. Як правило, моделювання включає лише дипольний термін, хоча іноді включається також квадрупольний термін. При $n_l = 6$ цей потенціал називається також Кулонівсько-Букінгемським потенціалом.

$$U_{ij}(r_{ij}) = \frac{z_i z_j}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} + A_l \exp \frac{-r_{ij}}{p_l} + C_l r_{ij}^{-n_l} + \dots, \quad (2)$$

У потенціалах багатьох тіл потенційна енергія включає вплив трьох або більше частинок, що взаємодіють один з одним. У моделюванні з парними потенціалами, глобальні взаємодії в системі також існують, але вони відбуваються тільки через парні терміни. У потенціалах багатьох тіл потенційна енергія не може бути знайдена сумою над парами атомів, оскільки ці взаємодії розраховуються явно як комбінація термінів вищого порядку. У статистичному уявленні залежність між змінними взагалі не може бути виражена, використовуючи лише парні продукти ступенів свободи.

Наприклад, потенціал Терсофа, який спочатку використовувався для моделювання вуглецю, кремнію і германію, і з тих пір використовується для широкого кола інших матеріалів, передбачає суму над групами з трьох атомів, причому кути між атоми є важливим фактором потенціалу. Іншими прикладами є метод вбудованого атома (EAM), EDIP, і потенціали щільної прив'язки другого моменту (TBSMA), де електронна щільність станів в області атома дорівнює обчислюється з суми внесків від оточуючих атомів, а потенційний внесок енергії тоді є функцією цієї суми.

Напів-емпіричні потенціали

Напів-емпіричні потенціали використовують матричне представлення з квантової механіки. Однак значення елементів матриці знаходять за допомогою емпіричних формул, які оцінюють ступінь перекриття конкретних атомних орбіталей. Потім матрицю діагоналізують, щоб визначити зайнятість різних атомних орбіталей, а емпіричні формули використовуються ще раз для визначення енергетичних внесків орбіталей.

Існує велика різноманітність напів-емпіричних потенціалів, які називаються потенціалами щільного зв'язування, які змінюються залежно від моделюються атомів.

Поляризовані потенціали

Більшість класичних силових полів неявно включають ефект поляризованості, наприклад, розширюючи часткові заряди, отримані з квантово-хімічних розрахунків. Ці часткові заряди є стаціонарними по відношенню до маси атома. Але моделювання молекулярної динаміки може явно моделювати поляризованість при введенні індукованих диполів за допомогою різних методів, таких як частинки або флуктуаційні заряди. Це дає можливість динамічного перерозподілу заряду між атомами, що відповідає місцевому хімічному середовищу.

Протягом багатьох років поляризовані симуляції МД рекламувалися як наступне покоління. Для гомогенних рідин, таких як вода, підвищена точність була досягнута за рахунок включення поляризованості. Деякі перспективні результати також були досягнуті для білків. Тим не менш, як і раніше невідомо, як найкраще наблизити поляризованість в моделюванні.

Потенціали в методах *ab initio*

У класичній молекулярній динаміці в силовому полі представлена одна поверхня потенційної енергії (зазвичай основний стан). Це є наслідком наближення Борна – Оппенгеймера. У збуджених станах, хімічних реакціях або коли потрібне більш точне подання, електронне поведінка може бути отримано з перших принципів за допомогою квантово-механічного методу, такого як теорія функціоналу густини. Це називається *Ab Initio Molecular Dynamics* (AIMD). Через вартість лікування електронних ступенів свободи обчислювальна вартість цих моделювань набагато вища, ніж класична молекулярна динаміка. Це означає, що AIMD обмежується меншими системами та коротшими періодами.

Ab initio квантово-механічні та хімічні методи можуть бути використані для розрахунку потенційної енергії системи на льоту, необхідної для конформації у траєкторії. Цей розрахунок зазвичай проводиться в тісному сусідстві координат реакції. Хоча можуть використовуватися різні наближення, вони ґрунтуються на теоретичних міркуваннях, а не на емпіричних підгонках. *Ab initio* розрахунки дають величезну кількість інформації, яка не доступна з емпіричних методів, таких як щільність електронних станів або інші електронні властивості. Істотною перевагою використання методів *ab initio* є можливість вивчення реакцій, які передбачають розрив або утворення ковалентних зв'язків, які відповідають декільком електронним станам.

2.3. Приклади взаємодії молекулярної динаміки.

КМ (квантово-механічні) методи дуже потужні. Проте, вони є обчислювально дорогими, а методи ММ (класична або молекулярна механіка) є швидкими, але страждають від декількох меж (вимагають великої параметризації; отримані оцінки енергії не дуже точні; не можуть бути використані для імітації реакцій, де ковалентні зв'язки розбиті / сформовані) і обмежені у своїх здібностях для надання точних деталей щодо хімічного середовища). З'явився новий клас методів, який поєднує в собі добрі точки розрахунку КМ (точності) і ММ (швидкість). Ці методи називаються змішаними або гібридними квантово-механічними і молекулярно-механічними методами (гібридний КМ / ММ).

Найважливішою перевагою гібридного методу КМ / ММ є швидкість. Витрати на виконання класичної молекулярної динаміки (ММ) у найбільш прямолінійних випадках шкали $O(n^2)$, де n - число атомів у системі. Це пояснюється головним чином терміном електростатичних взаємодій (кожна частинка взаємодіє з будь-якою іншою часткою). Однак, використання радіусу відсічення, оновлення періодичних парних списків і останнім часом зміни методу Евальда (PME) частинок-сітки зменшили це між $O(n)$ до $O(n^2)$. Іншими словами, якщо моделювати систему з подвоєною кількістю атомів, то для обчислювальної потужності потрібно в два-чотири рази більше. З іншого боку, найпростіші *ab initio* розрахунки, як правило, масштабу $O(n^3)$ або гірше (обмежені розрахунки Hartree – Fock були запропоновані для масштабування $O(n^{2.7})$). Щоб подолати цю межу, невелика частина системи обробляється квантово-механічно (зазвичай активна ділянка ферменту), а решта системи обробляється класично.

У більш складних реалізаціях існують методи КМ / ММ для обробки як легких ядер, сприйнятливих до квантових ефектів (таких як водні), так і електронних станів. Це дозволяє генерувати водневі функції (подібні до електронних хвильових функцій). Ця методологія була корисною для

дослідження явищ, таких як тунелювання водню. Одним з прикладів, де методами КМ / ММ є нові відкриття, є розрахунок переносу гідриду в ферментній дегідрогеназі печінки. У цьому випадку квантове тунелювання є важливим для водню, оскільки воно визначає швидкість реакції

Грубозернисті і зменшені уявлення

На іншому кінці деталі масштабу є грубозернисті і ґратчасті моделі. Замість того, щоб явно представляти кожен атом системи, використовуються "псевдо атоми" для представлення груп атомів. Моделювання МД на дуже великих системах може вимагати таких великих комп'ютерних ресурсів, що вони не можуть бути легко вивчені традиційними методами з усіма атомами. Аналогічним чином, моделювання процесів на довгих часових шкалах (за межами приблизно 1 мікросекунди) є надто дорогими, оскільки вимагають стільки кроків часу. У цих випадках іноді можна вирішити проблему, використовуючи зменшені уявлення, які ще називаються грубозернистими моделями.

Прикладами методів грубої зернистості (CG) є розривна молекулярна динаміка (CG-DMD) і Go-моделі. Грубозернистість виконується іноді з великими псевдо атомами. Такі об'єднані атомні апроксимації використовувалися в МД моделювання біологічних мембран. Впровадження такого підходу в системах, де цікавлять електричні властивості, може бути складним через складність використання власного розподілу заряду на псевдо атомах. Аліфатичні хвости ліпідів представлені декількома псевдо атомами шляхом збору від 2 до 4 метиленових груп у кожний псевдо атом.

Параметризація цих дуже грубозернистих моделей повинна проводитися емпірично, шляхом зіставлення поведінки моделі з відповідними експериментальними даними або моделюваннями всіх атомів. В ідеалі, ці параметри повинні враховувати як ентальпійний, так і ентропійний внесок у вільну енергію неявно. Коли грубозернистий виконується на більш високих

рівнях, точність динамічного опису може бути менш надійною. Але дуже грубозернисті моделі успішно використовувалися для вивчення широкого кола питань структурної біології, організації рідких кристалів і полімерних окулярів.

Приклади застосування грубозернистого:

- Дослідження складання білків і прогнозування структури білка часто проводять, використовуючи один або кілька псевдо атомів на амінокислоту;
- Фазові переходи з рідких кристалів були досліджені в обмежених геометріях та/або під час потоку з використанням потенціалу Гей-Берн, який описує анізотропні види;
- Полімерні склянки під час деформації досліджувалися за допомогою простих гармонічних або FENE пружин для з'єднання сфер, описаних потенціалом Леннард-Джонса;
- Надспіральні ДНК досліджували, використовуючи 1–3 псевдо атоми на базову пару, і навіть при меншій роздільній здатності;
- Упаковка подвійної спіральної ДНК в бактеріофаг досліджена з моделями, де один псевдо атом являє собою один оборот (близько 10 базових пар) подвійної спіралі;
- Структура РНК у рибосомах та інших великих системах була змодельована одним псевдо атомом на нуклеотид.
- Моделювання віртуальних клітин для вивчення взаємодії клітин і різних субстратів.

Найпростішою формою грубозернистого є об'єднаний атом (іноді його називають розширеним атомом) і використовувався в більшості раннього МД моделювання білків, ліпідів і нуклеїнових кислот. Наприклад, замість чіткої обробки всіх чотирьох атомів СН₃ метальної групи (або всіх трьох атомів метиленової групи СН₂), один представляє всю групу з одним псевдо атомом.

Звичайно, вона повинна бути належним чином параметризована так, що її Ван-дер-Ваальсова взаємодія з іншими групами має відповідну дистанційну залежність. Аналогічні міркування застосовуються до зв'язків, кутів і кручення, в яких бере участь псевдо атом. У такому вигляді об'єднаного представлення атома, як правило, виключаються всі явні атоми водню, за винятком тих, які мають здатність брати участь у водневих зв'язках (полярні водні). Прикладом цього є сила - CHARMM 19.

Полярні водні зазвичай зберігаються в моделі, оскільки належне оброблення водневих зв'язків вимагає досить точного опису спрямованості та електростатичних взаємодій між донорними і акцепторними групами. Гідроксильна група, наприклад, може бути як донором водневого зв'язку, так і акцептором водневого зв'язку, і це неможливо буде обробляти одним псевдо атомом ОН. Близько половини атомів у білку або нуклеїнової кислоти є неполярними водородами, тому використання об'єднаних атомів може забезпечити істотну економію в комп'ютерному часі.

Включення ефектів розчинника

У багатьох моделюваннях системи розчинників основна увага приділяється поведінці розчиненої речовини з невеликим інтересом до поведінки розчинника, особливо в тих молекулах розчинників, які знаходяться в областях, далеких від молекули розчиненої речовини. Розчинники можуть впливати на динамічну поведінку розчинених речовин за допомогою випадкових зіткнень і накладання фрикційного опору на рух розчиненої речовини через розчинник. Використання не прямокутних періодичних граничних умов, стохастичних кордонів і розчинних оболонок може допомогти скоротити кількість необхідних молекул розчинника і дозволити більшій частині обчислювального часу витратитись на імітацію розчиненої речовини. Можливо також включити ефекти розчинника без необхідної наявності явних молекул розчинника. Одним з прикладів такого підходу є використання потенційної середньої сили (PMF), яка описує, як змінюється

вільна енергія при зміні конкретної координати. Зміна вільної енергії, описана РМФ, містить усереднені ефекти розчинника.

Сили далекого польоту

Взаємодія довгого діапазону є взаємодією, в якій просторова взаємодія падає не швидше, ніж r^{-d} , де d - розмірність системи. Приклади включають взаємодії заряду-заряду між іонами і дипольними взаємодіями між молекулами. Моделювання цих сил є досить складним завданням, оскільки вони є значними на відстані, яке може бути більше половини довжини коробки з імітацією багатьох тисяч частинок. Хоча одне рішення було б значно збільшити розмір довжини коробки, цей підхід грубої сили менше, ніж ідеальний, оскільки моделювання стало б обчислювально дуже дорогим. Сферично усікаючи потенціал не може бути й мови, оскільки нереалістична поведінка може спостерігатися, коли відстань близька до відстані.

Керована молекулярна динаміка (КМД)

Моделювання з молекулярною динамікою (КМД) або силове моделювання зондують сили білка, щоб маніпулювати його структурою, потягнувши його за бажаними ступенями свободи. Ці експерименти можуть бути використані для виявлення структурних змін білка на атомному рівні. КМД часто використовується для моделювання подій, таких як механічне розгортання або розтягування.

Існують два типових протоколи КМД: один, в якому тягнеться швидкість тримається постійним, і той, в якому прикладена сила є постійною. Як правило, частина досліджуваної системи (наприклад, атом в білку) стримується гармонійним потенціалом. Сили потім застосовуються до конкретних атомів при постійній швидкості або постійній силі. Збирання зондів використовується для переміщення системи вздовж бажаної координати реакції шляхом зміни, наприклад, сил, відстаней і кутів, які маніпулюють в симуляції. Через парасольку, всі конфігурації системи - як

високоенергетичні, так і малоенергетичні - адекватно відбираються. Тоді зміна кожної конфігурації у вільній енергії може бути розрахована як потенціал середньої сили. Популярним методом обчислення РМФ є метод зваженого аналізу гістограми (WHAM), який аналізує ряд моделей моделювання зондових зразків.

Приклади додатків

Молекулярна динаміка використовується в багатьох галузях науки.

- Перше МД моделювання спрощеного процесу біологічного складання було опубліковано в 1975 році. Його моделювання, опубліковане в Nature, відкрило шлях для величезної області сучасного обчислювального згортання білків.
- Перше моделювання біологічного процесу МД було опубліковано в 1976 році. Його моделювання, опубліковане в «Природі», відкрило шлях для розуміння руху білків як важливого для функцій, а не тільки аксесуара.
- МД є стандартним методом для обробки каскадів зіткнення в режимі сплеску тепла, тобто ефектів, які енергетичне опромінення нейтронами та іонами мають на тверді та тверді поверхні.
- Моделювання МД успішно застосовувалося для прогнозування молекулярної основи найпоширенішої білкової мутації N370S, викликаючи хворобу Гоше. У подальшій публікації було показано, що ці сліпі прогнози свідчать про високу кореляцію з експериментальними роботами по одному і тому ж мутанта, опублікованому самостійно пізніше.
- Для дослідження впливу поверхневих зарядів на роз'єднувальний тиск тонких водяних плівок на металевих поверхнях використовувалися МД-моделювання.

- Моделювання МД використовуються разом з імітацією мультишлюзних зображень для розуміння особливостей зображень на електронному мікроскопі.
- Для розрахунку термодинаміки інкапсуляції дволанцюгових ДНК на гідрофобні і гідрофільні одностінні вуглецеві нанотрубки використовувалися розрахунки МД, пов'язані з алгоритмами гамільтоніан-зсуву.

Наведені нижче біофізичні приклади ілюструють значні зусилля для моделювання систем дуже великих розмірів (повний вірус) або дуже тривалий час моделювання (до 1,112 мілісекунд):

- Моделювання МД вірусу повної супутникової мозаїки тютюну (STMV) (2006 р., Розмір: 1 млн. Атомів, час моделювання: 50 нс, програма: NAMD) Цей вірус є невеликим вірусом ікосаедричної рослини, що погіршує симптоми інфекції вірусом мозаїки тютюну (TMV). Моделі молекулярної динаміки використовувалися для дослідження механізмів вірусної збірки. Уся частинка STMV складається з 60 однакових копій одного білка, що входять до складу вірусного капсиду (покриття), і 1063 нуклеотидного одноланцюгового генома РНК. Одним з ключових висновків є те, що капсид дуже нестійкий, коли всередині РНК немає. Моделювання займе один комп'ютерний настільний комп'ютер 2006 року, який триватиме близько 35 років. Це було зроблено в багатьох процесорах паралельно з безперервним зв'язком між ними.
- Складання симуляції головного убору Вілліна у всіх атомних деталях (2006, розмір: 20 000 атомів; час моделювання: 500 мкс = 500 000 нс, програма: Folding@home) Це моделювання виконувалося в 200000 процесорів учасників персональних комп'ютерів у всьому світі. У цих комп'ютерах була встановлена програма Folding@home, широкомасштабне розподілене обчислювальне зусилля, координоване Vijay Pande зі Стенфордського університету. Кінетичні властивості

білка головного убору Вілліна були досліджені за допомогою безлічі незалежних коротких траєкторій, керованих процесором без безперервного зв'язку в реальному часі. Одним із застосованих методів був аналіз вартості Pfold, який вимірює ймовірність складання перед розгортанням конкретної початкової конформації. Pfold надає інформацію про структури перехідних станів і впорядкування конформацію вздовж шляху складання. Кожна траєкторія в розрахунку Pfold може бути відносно короткою, але потрібні багато незалежних траєкторій.

- Довгі симуляції безперервної траєкторії були проведені на «Антоні», масово паралельному супер комп'ютері, спроектованому та побудованому навколо індивідуальних інтегральних схем (ASIC) та інтерконнектів D. E. Shaw Research. Найбільш довгий опублікований результат моделювання, виконаного за допомогою «Антоні», - це моделювання в 1,112 мілісекунди NTL9 при 355 К; Друге, незалежне моделювання 1.073-мілісекунди цієї конфігурації також було виконано (і багато інших моделей з безперервним хімічним часом понад 250 мкс). У роботі «Як швидко розкладаються білки» дослідники Крестен Ліндорф-Ларсен, Стефано Піана, Рон О. Дрор і Девід Е. Шоу обговорюють «результати моделювання молекулярної динаміки на атомному рівні, протягом періодів від 100 мкс до 1 мс, виявляють набір загальних принципів, що лежать в основі складання 12 структурно різноманітних білків. Дослідження цих різноманітних довгих траєкторій, що забезпечується спеціалізованим, спеціальним обладнанням, дозволяє їм зробити висновок, що "в більшості випадків складання слідує за єдиним домінантним маршрутом, в якому елементи нативної структури з'являються в порядку, високо корельованому з їх схильністю до формування в В окремому дослідженні «Антоні» був використаний для проведення 1,013-мілісекундного моделювання

динаміки нативного стану бичачого панкреатичного інгібітора трипсину (ВРПІ) при 300 К.

- Ці молекулярні моделювання використовувалися для розуміння механізмів видалення матеріалу, впливу геометрії інструменту, температури та параметрів процесу, таких як швидкість різання та сили різання. Він також використовувався для дослідження механізмів відшарування декількох шарів графена і вуглецевих нанопроходів.

Модель зануреного атома

Модель зануреного атома — підхід, що використовується для наближеного опису енергії взаємодії між двома атомами. Енергія — це функція від суми функцій відстані між атомом та його сусідами. Остання функція у оригінальній моделі Мюррея Доу (англ. Murray Daw) і Майка Баскеса (англ. Mike Baskes) представляє електронну густину. Модель пов'язана із теорією наближення сильного зв'язку, відомого також як модель Фінніса—Сінклера (Finnis-Sinclair model).

У застосуванні моделі потенціальна енергія i -го атома визначається так:

$$E_i = F_\alpha(\sum_{i \neq j} \rho_\alpha(r_{ij})) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \phi_{\alpha\beta}(r_{ij}), \quad (3)$$

Де r_{ij} - відстань між i -м та j -м атомами;

$\phi_{\alpha\beta}$ - функція парного потенціалу;

ρ_α - внесок до густини заряду електронів від i -го атома у місці розташування i -го атома;

F - це функція «занурення», яка представляє енергію, необхідну для поміщення i -го атома типу α у електронну хмару.

Метод ЕАМ є багаточастковим потенціалом і, оскільки густина електронної хмари— це сума внесків від великої кількості атомів, на практиці

для зменшення складності і, відповідно, часу розрахунків часто обмежують кількість сусідів так званим «радіусом обрізання».

Для застосування методу до простих однокомпонентних систем атомів потрібно задати три скалярні функції: функцію занурення, функцію парної взаємодії та функцію розподілу густини електронної хмари. Для бінарних сплавів необхідно вже 7 функцій: три функції парної взаємодії (A—A, B—B, A—B), дві функції занурення та дві функції розподілу густини електронних хмар. Зазвичай, ці функції доступні у табличному вигляді та інтерполюються кубічними сплайнами.

РОЗДІЛ 3. АНАЛІЗ РЕЗУЛЬТАТІВ ТА МОДЕЛЮВАННЯ.

3.1. Обчислення та збір даних.

Стиль `meam` обчислює парні взаємодії для різних матеріалів з використанням модифікованих потенціалів вбудованих атомів (MEAM) (Baskes). Концептуально, це розширення до оригінальних потенціалів EAM, що додає кутові сили. Таким чином, він підходить для моделювання металів і сплавів з кубовими структурами fcc, bcc, hcp і diamond, а також ковалентно пов'язаних матеріалів, таких як кремній і вуглець. Стиль `meam` - це переклад (зараз застарілого) коду `meam` з Fortran на C++. Вона функціонально еквівалентна `meam`, але є більш ефективною, і, таким чином, після виходу 12 грудня 2018 року LAMMPS було вилучено.

У формулі MEAM сумарна енергія E системи атомів задається:

$$E = \sum_i \left\{ F_i(\bar{\rho}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \phi_{ij}(r_{ij}) \right\}, \quad (4)$$

де F - енергія вкладання, яка є функцією атомної електронної щільності r_{ij} , а ϕ_{ij} - парна потенційна взаємодія. Пара взаємодії підсумовується по всіх сусідів J атома I в межах відсічення. Як і в EAM, характер багатомірного потенціалу MEAM є результатом вкладеного енергетичного терміну. Деталі обчислення вбудовування та енергії пар, реалізовані в LAMMPS, наведені в (Gullet) і посиланнях у ньому.

Різні параметри формул MEAM перераховані у двох файлах, які задаються командою `pair_coeff`. Це текстові файли ASCII у форматі, що відповідає іншим MD-кодам, які реалізують потенціали MEAM, такі як послідовний код DYNAMO і Warp. Кілька потенційних файлів MEAM з параметрами для різних матеріалів включено до каталогу "потенціали" розподілу LAMMPS з суфіксом «`meam`». Всі вони параметризовані з точки зору металевих блоків LAMMPS.

Зауважимо, що, на відміну від інших потенціалів, відсічення для потенціалів MEAM не задаються в команді `pair_style` або `pair_coeff`; вони вказуються в самих потенційних файлах MIM.

Щоб охопити всі типи атомів LAMMPS дві назви файлів призначені для бібліотеки та файлу параметрів відповідно. Аргументи `Si` і `C` (між іменами файлів) є двома елементами, для яких інформація буде вилучена з файлу бібліотеки. Перші три кінцеві аргументи `Si` відображають типи атомів LAMMPS 1,2,3 до елемента MEAM `Si`. Остаточний аргумент `C` відображає тип атома LAMMPS 4 до елемента MEAM `C`.

Якщо 2-е ім'я файлу вказано як `NULL`, файл параметрів не зчитується, що просто означає, що використовуються загальні параметри файлу бібліотеки. Використання специфікації `NULL` для файлу параметрів не рекомендується для систем з більш ніж одним типом елементів (наприклад, сплавів), оскільки очікується, що файл параметрів задає терміни взаємодії елементів, які не захоплюються інформацією у файлі бібліотеки.

Якщо значення зіставлення вказано як `NULL`, відображення не виконується. Це може бути використано, коли потенціал мембрани використовується як частина стилю гібридної пари. Значення `NULL` є заповнювачами для типів атомів, які будуть використовуватися з іншими потенціалами.

Якщо друге ім'я файлу `NULL`, імена елементів між двома іменами файлів можуть з'являтися в будь-якому порядку, наприклад, “`Si C`” або “`C Si`” у наведеному вище прикладі. Однак, якщо друге ім'я файлу не є `NULL` (як у прикладі вище), воно містить параметри, індексовані Fortran, для елементів, які передують цьому. Таким чином, ви повинні застрахувати список елементів між іменами файлів в порядку, узгодженому з тим, як індексуються значення у другому імені файлу.

Змішування, зміщення, таблиця, корекція хвоста, перезапуск, інформація rRESPA: Для пар типів атомів I, J і $I = J$, де типи I і J відповідають двом різним типам елементів, перемішування виконується за допомогою LAMMPS з параметрами, визначеними користувачем, як описано вище. Вам ніколи не потрібно вказувати команду `pair_coeff` з аргументами $I \neq J$ для цього стилю.

Цей стиль пари не підтримує параметри `shift_modify`, `shift` та `tail`. Цей стиль пари не записує інформацію до файлів бінарних перезавантажень, оскільки він зберігається в потенційних файлах. Таким чином, потрібно повторно вказати команди `pair_style` і `pair_coeff` у сценарії введення, який читає файл перезапуску.

Цей стиль пари може бути використаний тільки через ключове слово `pair` команди `run_style respa`. Він не підтримує внутрішні, середні, зовнішні ключові слова.

Обмеження у стилі `meam` надається в пакеті USER-MEAMC. Вона ввімкнена, лише якщо LAMMPS було створено з цим пакетом. Для отримання додаткових відомостей.

Максимальна кількість елементів, які можуть бути прочитані з файлу бібліотеки MEAM, визначається під час компіляції. Значення за замовчуванням - 5. Якщо вам потрібна підтримка додаткових елементів, ви повинні змінити визначення для константи «`maxelt`» на початку файлу `src / USER-MEAMC / meam.h` і оновити/перекompілювати LAMMPS. Немає обмеження на кількість типів атомів.

Експеримент над наностержням ZnO

Для росту нанородів ZnO ми використовували металоорганічне хімічне осадження парів (MOCVD) без допомоги будь-якого каталізатора. У техніці MOCVD, варіація діаметра та довжини наностержня регулюється температурою зростання. Ультрадисперсні нанострутники ZnO з діаметром менше 10 нм готували при високих температурах 800-1000° С, тоді як низькі температури зростання 400-600° С давали товсті нанострутники діаметром більше 20 нм. Під час росту нанородів витрати кисню та діетилцинку (DEZn), що використовувались як реагенти, знаходились у діапазоні 20 sccm та 1.0-3.0 sccm при температурі барботера DEZn -15° С відповідно. Типовий час зростання був у межах 0,5-2 годин.

Довільну структуру квантових ям $Zn_{1-x}Mg_xO/ZnO$, одну з найскладніших гетероепітаксійних структур, можна виготовити в нанострутниках, контролюючи товщину шару до декількох Å. Тут ми використовували шар сплаву $Zn_{1-x}Mg_xO$ ($x < 0,3$) як бар'єрний шар, оскільки він має невідповідність решітки менше 1%, а також більшу енергію основного зазору, ніж енергія ZnO. Товщина шару свердловини ZnO (L_w) коливався від 1,1 до 9 нм, тоді як товщина дна $Zn_{0,8}Mg_{0,2}O$ та верхні бар'єрні шари в нанородних ККВ були зафіксовані як 30 та 6 нм відповідно. Для росту шару $Zn_{1-x}Mg_xO$ в якості попередника Mg використовували бісциклопентадієніл - Mg (cp2Mg), а концентрацію Mg контролювали, змінюючи парціальний тиск попередника Mg. Енергетично-дисперсійна рентгенівська спектроскопія в камері з просвічуючою електронною мікроскопією була використана для визначення середньої концентрації Mg у шарах (Zn, Mg) O, яка становила близько 20%.

Геоструктури коаксіальних наностержнів $ZnO/Zn_{1-x}Mg_xO$ були синтезовані шляхом гетероепітаксійного зростання in-situ тонких шарів $Zn_{1-x}Mg_xO$ на наностержнях ZnO. MOVPE був використаний для виготовлення коаксіальних наностержнів $Zn_{1-x}Mg_xO/ZnO$ з різкою поверхнею розділу, однорідними складами та рівномірною товщиною шару.

Ми застосували двоступеневий процес MOCVD, що складається з (i) високотемпературного синтезу надтонких серцевинних нанородів ZnO та (ii) подальшої низької температури шари оболонки $Zn_{1-x}Mg_xO$, покриті серцевиною ZnO, для виготовлення коаксіальних гетероструктур ZnO/ $Zn_{1-x}Mg_xO$. На початковому етапі основні ультрадисперсні нанотрубки ZnO готували при 800–900 ° C з використанням діетилцинку (DEZn) та кисню в якості реагентів, а аргон - газ-носії. Діаметри нанородів, визначені за допомогою електронно-мікроскопічних зображень, були лише 9 нм із нормованим значенням стандартного відхилення (стандартне відхилення, поділене на середнє значення) 0,2–0,3. Наступні осадження шарів оболонки $Zn_{1-x}Mg_xO$ проводили in-situ при низькій температурі між 450–550 ° C додаванням біс-циклопентадієніл-Mg (cp2Mg) як попередника Mg в тій самій камері, що призводило до покриття шару $Zn_{1-x}Mg_xO$ над усіма нанородними поверхні ZnO. Вміст і товщину Mg у шарах $Zn_{1-x}Mg_xO$ легко контролювали, змінюючи швидкість потоку cp2Mg та час зростання відповідно. Покриття шару оболонки $Zn_{1-x}Mg_xO$ на надтонких нанотрутках ZnO було міцним і не відшаровувалось.

Гетероструктури коаксіальних нанородів GaN / ZnO виготовляли на підкладках Al₂O₃ та Si з використанням безкаталізаторної металорганічної парофазної епітаксії (MOVPE). Після приготування нанородів ZnO шари GaN вирощували епітаксіально на нанотрутках ZnO з використанням триметил-Ga (TMGa) та аміаку в іншій камері MOVPE. Типова швидкість потоку TMGa та аміаку становила 3,0 та 500–1000 sccm відповідно. Температура зростання була в межах 400–700 ° C. Середні діаметри коаксіальних наностержневих гетероструктур GaN / ZnO становили близько 14, 20 та 32 нм для росту 1, 5 та 10 хв відповідно. Оскільки середній діаметр ультрадисперсних нанородів ZnO в ядрі становить 7–8 нм, товщина шару GaN становить 2–3 та 5–7 нм для росту 1 та 5 хв відповідно, що також підтверджено за допомогою електронної мікроскопії з високою роздільною здатністю (HRTEM).

Для оптичних характеристик матеріалів вимірювали спектри фотолюмінесценції (PL) нанородів ZnO. Вимірювання PL проводили з використанням He-Cd-лазера безперервної хвилі ($\lambda = 325$ нм) як джерела збудження. Детальніше про вимірювання PL повідомлялося раніше.

Транзистори з польовим ефектом нанородів ZnO (FET) були виготовлені з використанням високоякісних нанородів ZnO та літографії електронного променя. Однокристалічні наностержни ZnO готували на Si або сапфіровій підкладці з використанням безкаталізаторної металорганічної парофазної епітаксії (MOVPE), а потім диспергували на SiO₂ / Si. Шар оксиду кремнію товщиною 250 нм був використаний як ізолюючий шар оксиду затвора на сильно легованій підкладці кремнію n-типу. Хороші омичні контакти були отримані покриттям шарів металу Au / Ti лише на кінцях нанородів і відпалом при 300 ° C протягом 2 хв. Металеві контакти джерела-стоку електроди були розділені на 2–5 мкм за допомогою електронно-променевої літографії та методу підйому. Металевий шар Au використовувався для отримання контактів Шотткі. Електричні характеристики ультрафіолетових транзисторів нанородів ZnO вимірювали при кімнатній температурі в навколишньому повітрі за допомогою електрометра та лічильника джерела напруги. Для вивчення ефекту пасивації поверхні на електричні властивості пристроїв нанородільні транзистори ZnO також покривали поліімідом, який часто застосовували для зменшити поверхневі ефекти в біполярних технологіях. Поліамід товщиною 2 мкм (n-метоксиметильований нейлон) наносили з використанням блешні і потім затвердівали при 120 ° C протягом 5 годин.

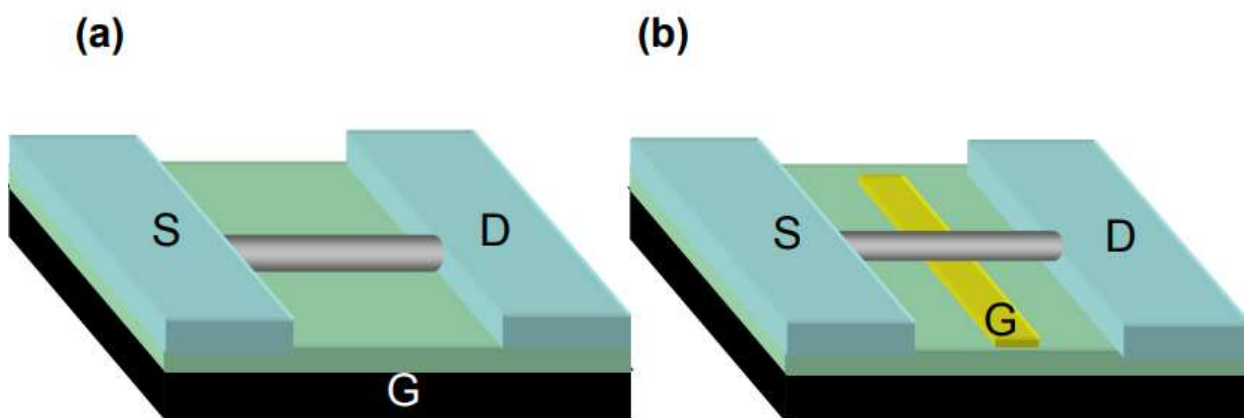


Рис. 2. Принципова ілюстрація нанородільних MOSFET (a) та MESFET (b) пристроїв ZnO.

Для виготовлення гетероепітаксціальних нанородільних електроприладів n-ZnO / p-GaN нанороділь n-ZnO вирощували вертикально на шарах p-GaN товщиною 3 мкм, покритих Al₂O₃ (0001), використовуючи MOVPE без каталізатора. Шари p-GaN демонстрували концентрацію носія р-типу $2 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$ і рухливість $10 \text{ см}^2 / \text{В} \cdot \text{с}$. Для росту MOVPE нанородів ZnO діетил-цинк (DEZn) та кисень використовувались як джерела реагенту, як повідомлялося раніше. Деталі параметрів росту нанородів ZnO на підкладках GaN такі самі, як і на сапфірових підкладках, за винятком потоку DEZn до ZnO зростання. Тобто, на початковій стадії росту ZnO лише DEZn з газом-носієм протікав протягом 30 с до зростання нанородів ZnO, щоб запобігти окисненню поверхні GaN.

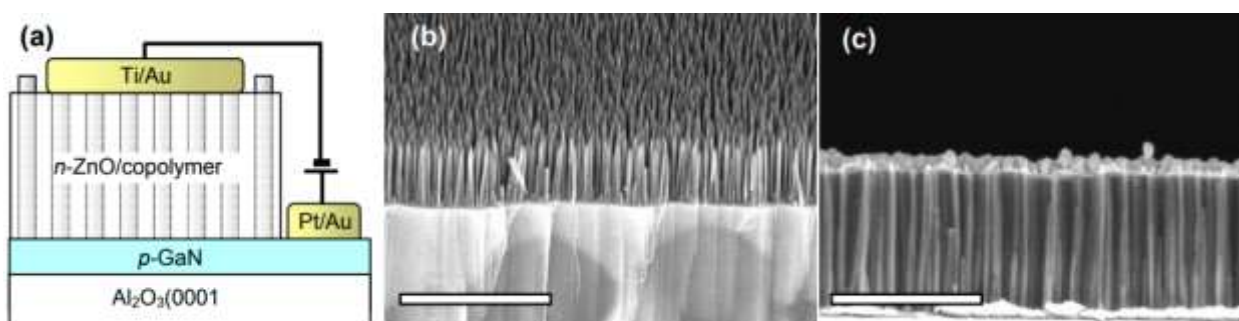


Рис. 3. а) Схематичне зображення пристрою гетероструктури нанородів p-GaN/n-ZnO. б) FE-SEM зображення нанотрубкових масивів ZnO, вирощених на p-GaN. Нанотропи ZnO добре вирівняні перпендикулярно поверхні GaN.

в) Зображення SEM у поперечному перерізі пристрою гетероструктури нанородів, виготовленого шляхом нанесення металевого двошару Au / Ti на селективно витравлені наконечники нанородів. Усі шкали мають 1 мкм.

Пристрої EL були виготовлені шляхом створення хороших омичних контактів як на p-GaN, так і на n-ZnO. Омичний контакт на pGaN був виготовлений шляхом випаровування двошарів Pt і Au. Типова товщина шару Pt та Au становила 100 Å та 500 Å відповідно. Після металізації p-GaN вільний простір між окремими наностержнями ZnO заповнювали тонким фоторезистом за допомогою спінового покриття. Потім слідувало селективне травлення фоторезисту під кисневою плазмою для отримання нанородівського масиву, вбудованого у фоторезист, лише з кінчиками нанострутника, оголеними 50-100 нм (рис. 3б). Для металізації нанородів n-ZnO на кінчики нанородів через тіньову маску шляхом випаровування електронно-променевим шаром осідали шари Ti товщиною Ti та товщиною Au Au товщиною 100 Å, що призводило до безперервного контактного шару на нанородях ZnO (рис. 3в). Хороші омичні контакти як на n-ZnO, так і на p-GaN були отримані швидким термічним відпалом при 300 і 500 °C протягом 1 хв відповідно. Характеристики EL та I – V пристроїв вимірювали шляхом подачі напруги постійного струму на пристрій за допомогою джерела вимірювань (Keithley 2400). Спектри EL вимірювали за допомогою монохроматора та системи детектування, обладнаної фотопомножувальною трубкою та лічильником фотонів, які використовувались для спектроскопії фотолюмінесценції. Всі вимірювання проводили при кімнатній температурі.

Однорідні наноструктури ZnO.

Скануюча електронна мікроскопія (SEM) виявляє загальну морфологію вирощених масивів нанородів ZnO. Для росту нанородів ZnO в якості реагентів використовували діетилцинк (DEZn) та кисень, а в якості газу-носія використовували аргон. Як показано на рис. 3 (а), вертикально вирівняні нанострутники ZnO демонстрували хорошу однорідність у своїх діаметрах,

довжинах та щільностях на всіх підкладках. Шляхом регулювання параметрів росту контролювали середні діаметри наностержень ZnO від 5 до понад 100 нм з чудовим вертикальним вирівнюванням та рівномірним розподілом довжини. Більше того, під час вимірювань просвічуючої електронної мікроскопії (ТЕМ) рідко спостерігались дислокації та дефекти укладання, оскільки зображення атомної решітки бездефектних монокристалічних нанородів ZnO показані на малюнках 4 (b) та 4 (e). Спектроскопія фотолюмінесценції (PL) була використана для дослідження радіаційних переходів, пов'язаних з дефектами нанородів ZnO. Як показано на рис. 3 (в), типовий спектр ФЛ високої роздільної здатності високоякісних нанородів ZnO, виміряний при 10 К, показує чотири різні піки екситонного випромінювання з вузькими значеннями ШІМ 1-3 меВ. Порівняно з раніше повідомленими положеннями піків ФЛ для високоякісних епітаксійних тонких плівок та об'ємних кристалів, пік ФЛ при 3.376 еВ та слабке плече при 3.384 еВ приписуються пікам вільного екситону (ХА, ХВ), тоді як піки ФЛ при 3.359 та 3.364 еВ приписуються піки екситонних зв'язків з нейтральними донорами.¹⁶ Спостереження піків вільного екситону для наностержнів ZnO при низькій температурі 10 К настійно свідчить про те, що нанострутники мають високу чистоту та чудову оптичну якість.

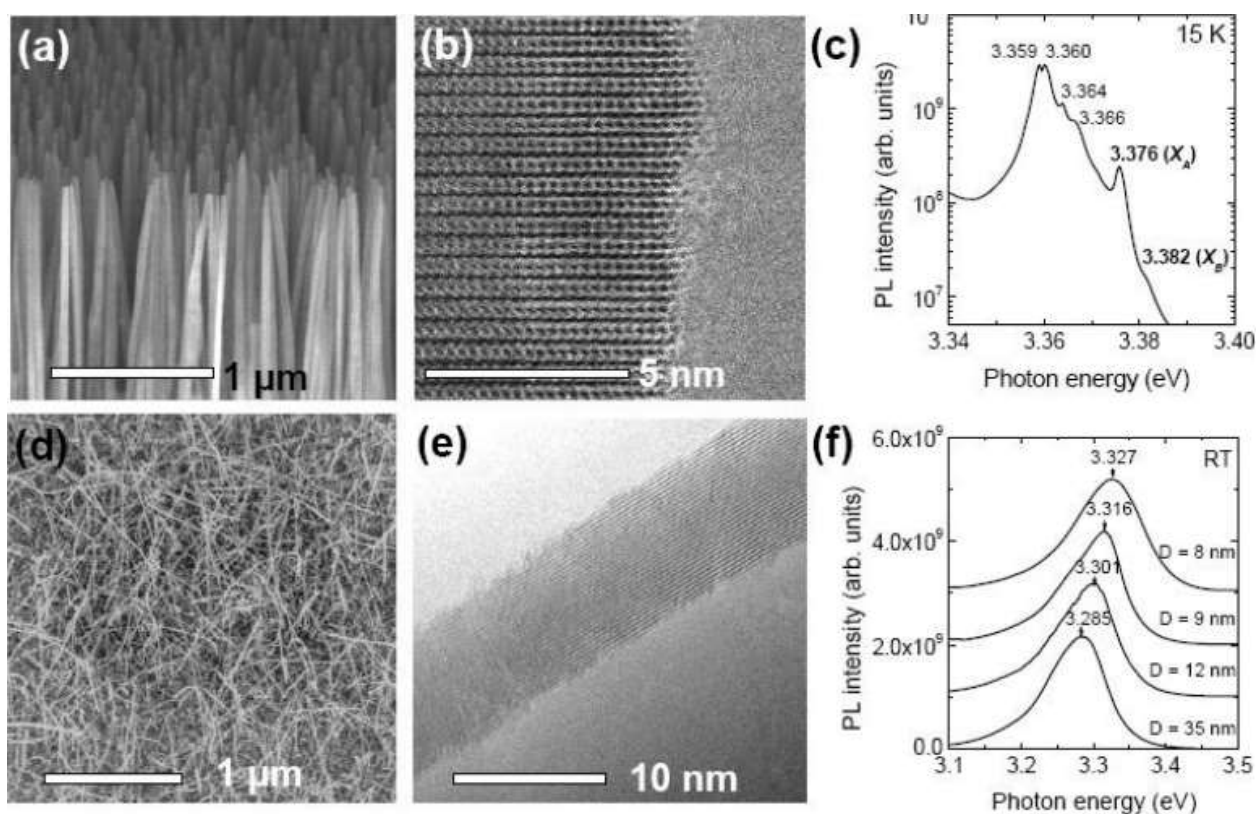


Рис. 4. Нанороджеві масиви ZnO, вирощені без каталізатора MOVPE. (a) зображення FE-SEM, (b) зображення HR-ТЕМ та (c) низькотемпературний спектр PL товстих нанородів ZnO із середнім діаметром 35 нм. (d) зображення FE-SEM, (e) зображення HR-ТЕМ і (f) спектри PL кімнатної температури ультрадисперсних нанородів ZnO.

Тим часом систематичний контроль діаметра нанотрубка ZnO був отриманий просто шляхом зміни умов росту. Параметри процесу при зростанні MOVPE, такі як швидкість потоку реагуючого газу, час росту та температура зростання, можуть впливати не тільки на діаметр, але і на співвідношення сторін наностержнів ZnO. Зокрема, ми можемо систематично контролювати діаметр наностержня, змінюючи температуру росту, одночасно фіксуючи інші параметри росту. Зображення HR-ТЕМ на рис. 4 (e) показує, що діаметр ультрадисперсного нанотрубка ZnO становить лише 8 нм. Зображення TEM також виявили впорядковані ґратчасті зображення надтонких нанородів ZnO, вказуючи на те, що вони майже не мають дефектів і монокристалічні. Крім того, спектри ФЛ ультрадисперсних нанородів ZnO з різними середніми

діаметрами 12, 9 та 8 нм демонстрували блюз-зсув домінуючих піків ФЛ на 16, 31 та 42 меВ відповідно (Рис. 4 (f)). Прості розрахунки також сильно припускає, що блюз-зміщення PL походить від одновимірного ефекту квантового обмеження в наностержнях ZnO.

Наностержень електронного пристрою ZnO.

Високоєфективні електронні нанопристрої можуть бути виготовлені з використанням наностержень ZnO, вирощених на безкаталізаторному MOVPE. Як одне із застосувань на нанопристрої, ми демонструємо виготовлення та характеристики пристроїв транзисторів. Контакти джерела / стоку були встановлені на кінцях нанопроводу за допомогою літографічних технік. Для напівпровідникових металевих транзисторів (МОП-транзисторів) третій електрод, сполучений через діелектрик, використовувався як затвор для варіювання електростатичного потенціалу. В нашому намаганні отримати високоєфективні MOSFET-компоненти з нанородів ZnO, омичні контакти з низьким опором були зроблені шляхом випаровування шарів металу Au / Ti на кінцях нанородів та відпалу при 300 ° C протягом 2 хв, а потім використана пасивація поверхні (поліамід, нметокси-метильований нейлон) (Рис. 5 (a)). Просте полімерне покриття ZnO нанород суттєво покращив характеристики FET та збільшив поточний коефіцієнт увімкнення / вимкнення з 7 до 10⁴—10⁵, а також збільшив провідність із 140 нС до 1,8 мкс. Крім того, електронна рухливість польового ефекту, оцінена за транспровідністю, демонструє максимальне значення 100021200 см² / Vs.²¹ Подальший контроль характеристик переходів М / SC на добрі омичні або контакти Шотткі на оксидних напівпровідникових наноматеріалах забезпечив багато інших електронних систем на основі оксиду нанопристрої. Зокрема, випрямний контакт бар'єра Шотткі утворюється між нанородом ZnO та металевим електродом Au для виготовлення діодів Шотткі (рис. 5 (b)) та складні діодні схеми для логічних операцій OR та AND (Рис. 5 (c)). Крім того, ці контакти М / SC Шотткі можуть бути використані в якості локальних затворів для

розробки індивідуально керованих транзисторів з польовим ефектом з металом-напівпровідником (MESFET) 22, що дозволяють інтегрувати ці активні пристрої в транзисторні схеми, такі як NOR і NOT логічні затвори через їх високу напругу та посилення потужності сигналу (рис. 5 (d)).

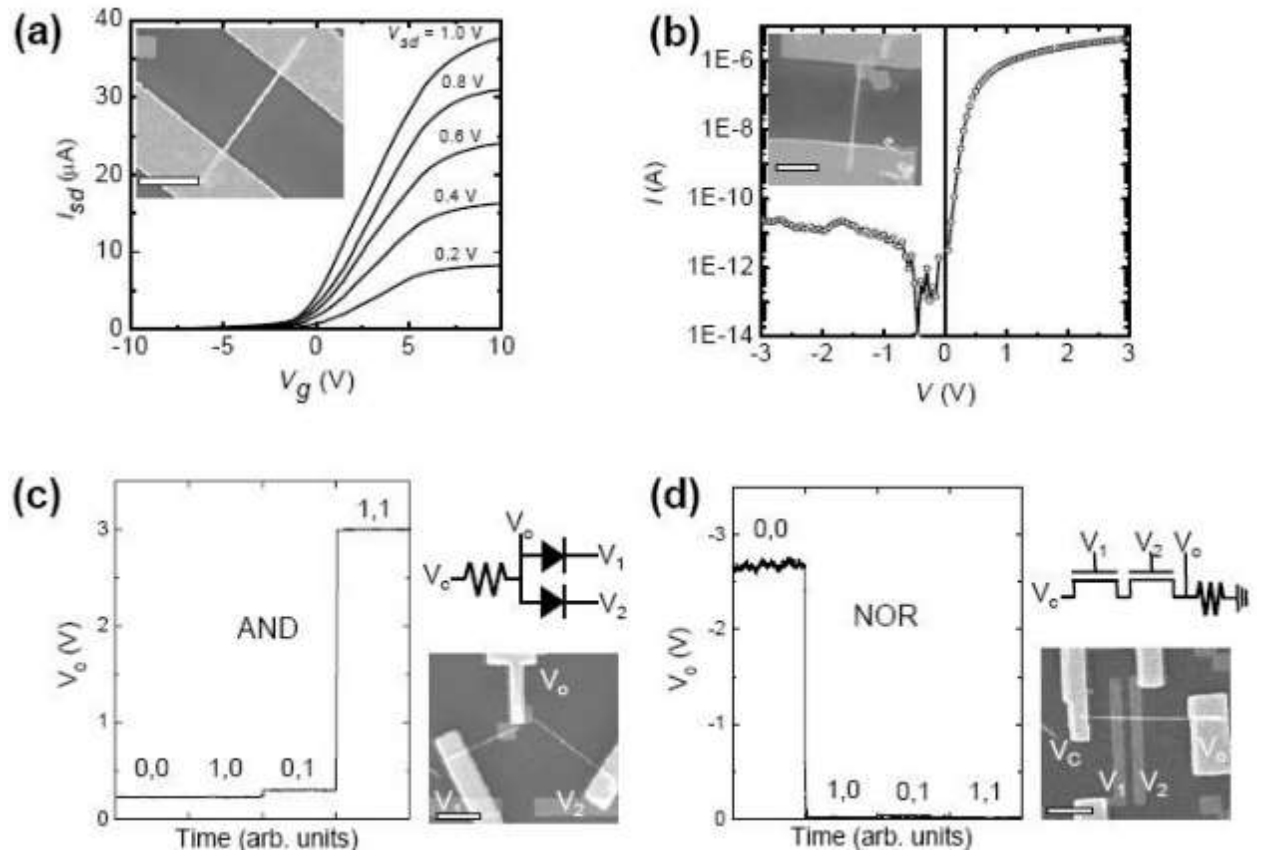


Рис. 5. Наномасштабні електронні пристрої на базі окремих нанородів ZnO. (a) Криві $I_{sd} - V_g$ для MN-транзисторів нанородів ZnO (b) $I - V$ характеристичні криві для нанородільного діода Шотткі ZnO. (c) нанород ZnO I логічний пристрій та (d) NOR логічний пристрій. Вставки - це зображення FE-EM зображень нанородільних пристроїв ZnO. Усі смуги шкал у (a) - (г) становлять 2 мкм.

Наностержень ZnO.

Нановідводи або нанодроти вважаються функціональними компонентами в електроніці та оптоелектроніці (Dekker, 1999; Hu et al., 1999, 2001). Синтез таких наноструктур із вбудованими квантовими структурами може забезпечити нові електричні або оптичні властивості завдяки утворенню

квантово обмежених станів. ZnO - цікавий напівпровідниковий оксид завдяки своїй високій енергії зв'язування екситону, здатності рости у вигляді нанопроволок та оптичному випромінюванню світла у видимому діапазоні. STEM є ідеальним інструментом для експериментального вивчення кореляції між профілями оптичного випромінювання світла через CL та атомною структурою наноструктур ZnO.

Для вивченого випадку, розглянутих нижче, наностержни ZnO вирощували з використанням безкаталізаторної металоорганічної парофазної епітаксії. Зростанню квазі-1D-наноструктур, тобто наностелець, сприяло переважне зростання вздовж осі c ZnO. Попередник Mg був введений у камеру росту для епітаксійного росту шарів $Zn_{0.8}Mg_{0.2}O$ на кінчику наностержнів. За відсутності частинок каталізатора цей механізм росту призводить до мінімального змішування, різких меж розділу з ZnO та регульованої товщини свердловин. Детально про процес росту повідомляється в інших місцях. Точне регулювання товщини дозволяє генерувати квантово обмежені стани в зазорі i , отже, зростаючий зсув синього кольору із зменшенням товщини шару.

Рисунок 6 показує електронні мікрофотографії наностержнів при різному збільшенні. Скануюча електронна мікроскопія (рис. 6 (a)) показала, що наностержни були добре вирівняні по відношенню один до одного з однорідними довжинами та діаметрами. Зображення ADF STEM, записані зі збільшенням збільшення (рис. 6 (b) - (d)), чітко виявляють атомну структуру квантових ям. Інтерфейси між шарами ZnO та $Zn_{0.8}Mg_{0.2}O$ виглядають атомарно різкими. Шар $Zn_{0.8}Mg_{0.2}O$ має дещо темніший контраст, ніж ZnO, завдяки механізму Z -контрасту. Зображення атомної роздільної здатності структури квантових ям виявляє наявність надрешітки у напрямку зростання, що, можливо, вказує на структурне впорядкування вакансій кисню.

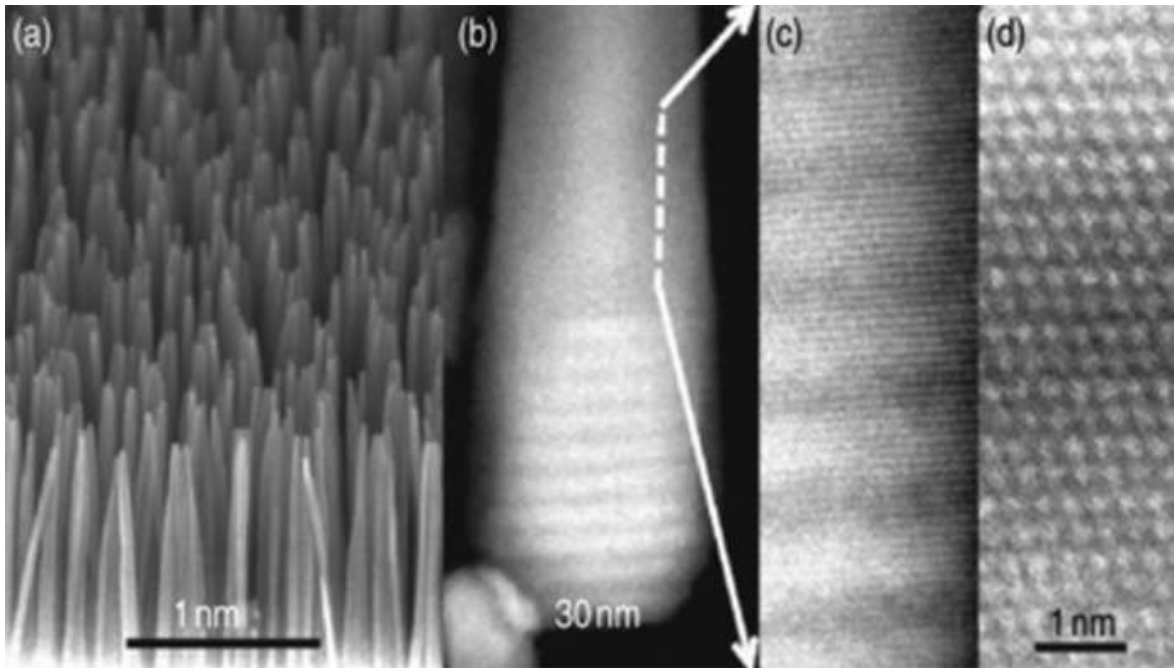


Рис. 6. (а) Зображення із скануючою електронною мікроскопією (SEM), що показує вертикально вирівняний масив нанородів ZnO, із кількома квантовими ямами $Zn_{0,8}Mg_{0,2}O / ZnO$ на кінчику. (b) - (d) зображення HAADF зі збільшенням збільшення, що показують структуру квантових ям.

Введення системи оптичного детектування в полюсний пристрій STEM дозволяє виявляти сигнали CL, генеровані первинним електронним пучком. Тому стає можливим записувати сигнали CL одночасно з інтенсивністю АПД і ВР під час сканування променя через зразок. 7 показує АПД і CL-зображення, записані з пучка нанородів ZnO. З рис. 7 видно, що лише деякі нанороді мають CL, тоді як інші не демонструють жодного оптичного випромінювання. Причини такої поведінки поки не зрозумілі. Однак описані тут можливості STEM зможуть вирішити такі питання шляхом кореляції сигналів CL з атомною структурою, складом та морфологією нанородів ZnO при атомній роздільній здатності. З розвитком високоефективних широкодіапазонних світловипромінюючих матеріалів, таких як нітриди групи III, потенціал досліджень CL з високою роздільною здатністю представляється високим, що дозволяє, можливо, співвідношення структур дислокаційних ядер та вмісту домішок з радіаційними характеристиками рекомбінації.

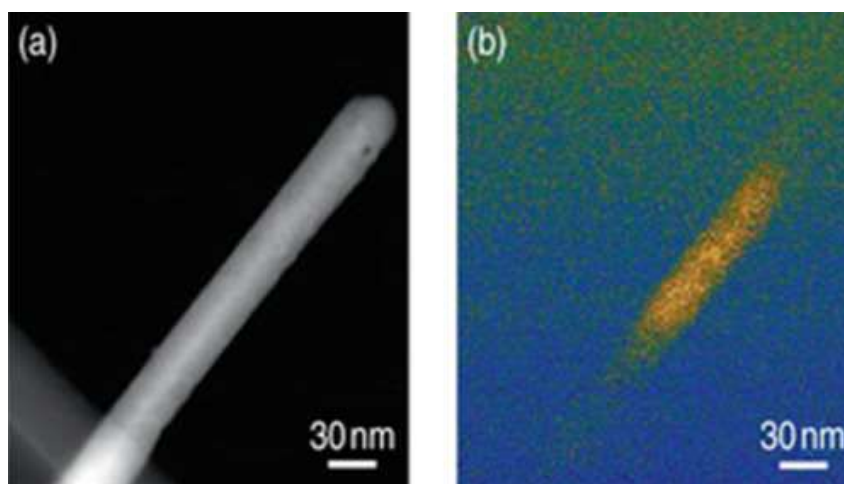


Рис. 7. Висококутове кільцеве темнопле (HAADF) зображення (а) однієї нанопроволоки ZnO. Одночасно було записано зображення з використанням сигналів катодолюмінесценції (CL) (b), що випромінюються з тієї ж нанопровідниці ZnO внаслідок опромінення електронним пучком.

3.2. Результати і обговорення срібного наностержня.

Аналіз розміру та морфології срібних нанородів.

На рис. 8 (а) - (в) показано зображення SEM та TEM зображень синтезованих срібних нанородів за допомогою фазового підходу. Загалом, синтезовані матеріали мають високу концентрацію срібних нанородів із випадковою орієнтацією. Розмір нановородів становив ~ 100 нм в діаметрі і ~ 5 мкм в довжину. Елементний аналіз (EDS), як показано на малюнку 1 (d), ваговий відсоток елемента Ag становить до 97,10%, а зразок містить невеликі сліди Pd та Al (елемент Al надходить із підкладки), вказуючи, що отриманий продукт по суті складається з чистого Ag. Ці результати показали, що у срібних нанородів були однорідні процеси росту.

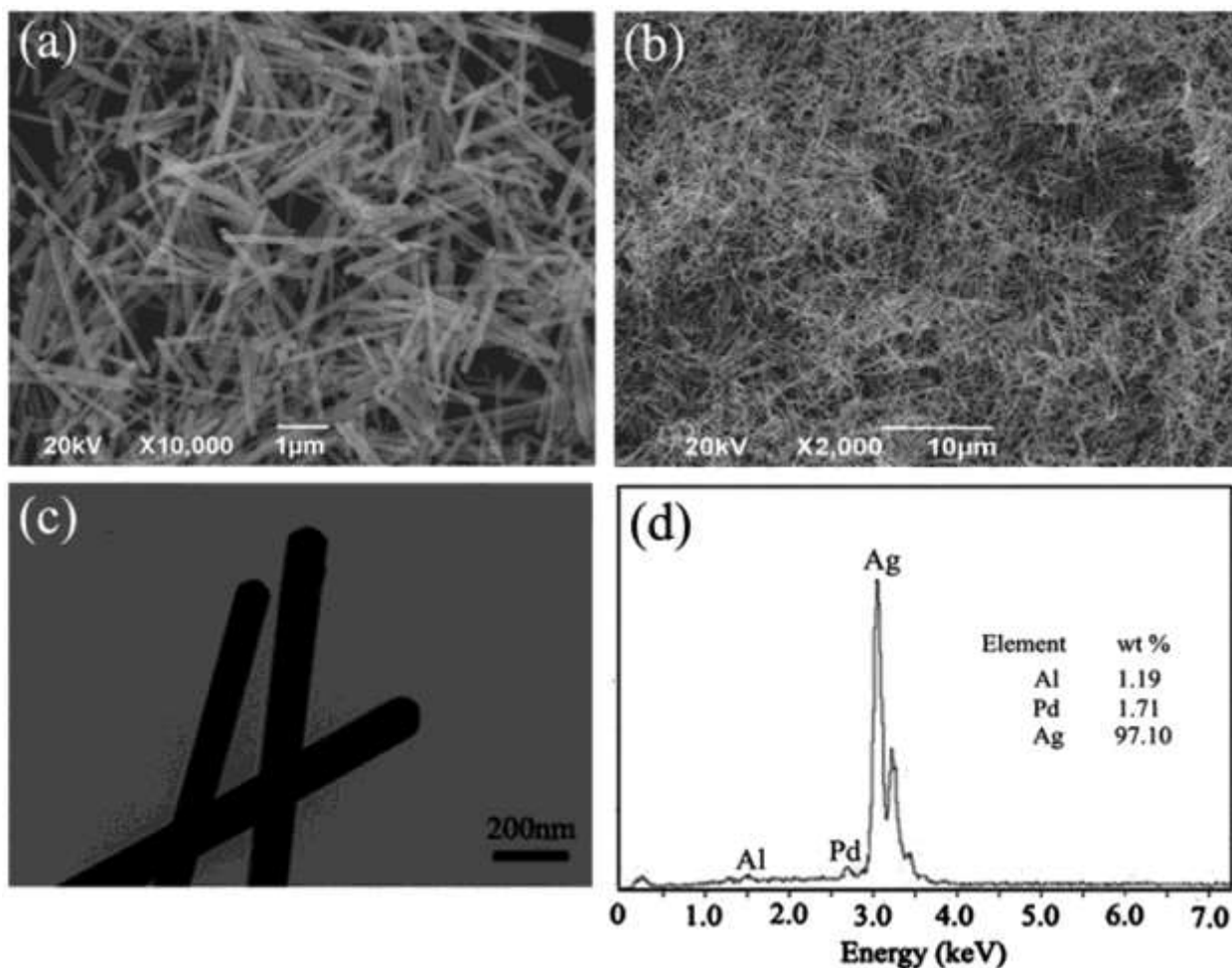


Рис. 8. Зображення та ЕЦП срібних нанородів (а, б: СЕМ; в: ТМЕ; г: ЕЦП).

Структурна характеристика срібних нановородів.

Діаграма XRD нанородів Ag показана на рисунку 9. Отримані чотири характерні піки при $38,1^\circ$, $44,3^\circ$, $64,5^\circ$ та $77,3^\circ$, і всі дифракційні піки індексувались до дифракції (111), (200), (220) та (311) площини. Ці результати є узгодженням кубового (ГЦК) одинарного кристалу Ag, зосередженого на грані, що вказує на те, що ГЦК структура Ag зберігається в цих наностеленах. Співвідношення інтенсивності між піками (111) та (200) представляє трохи більше теоретичного співвідношення, мається на увазі, що кристалічна площина переважної орієнтації (111) багата на срібні нанородівки. Константа решітки, розрахована за цією рентгенограмою, становила $4,0881 \text{ \AA}$, що добре узгоджувалося з поданими даними ($a = 4,086 \text{ \AA}$, файл JCPDS 04-0783).

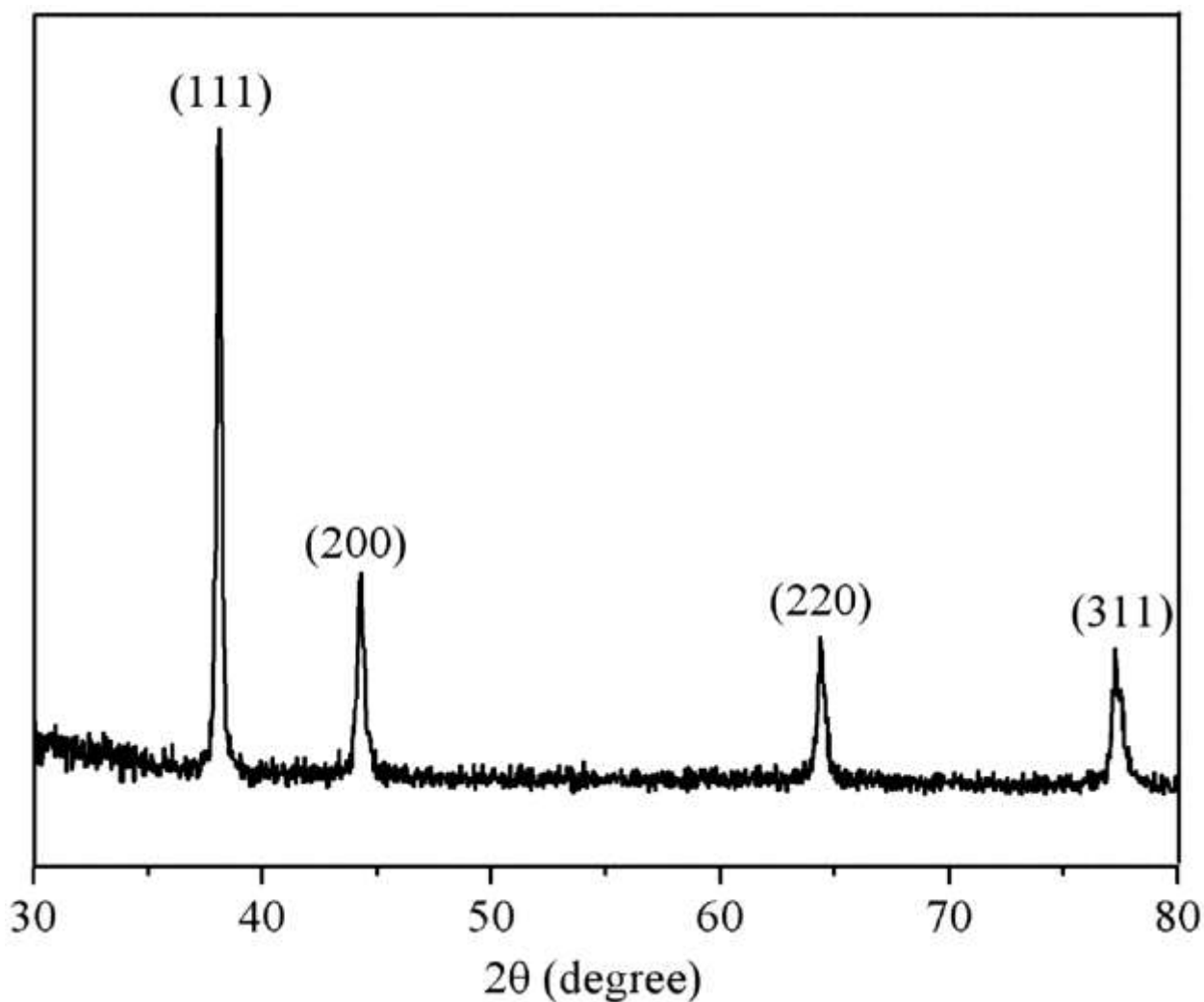


Рис. 9. Рентгенограмна картина нанородів Ag, що вказує на ГЦК структуру срібла.

Дослідження ультрафіолетового випромінювання на наноструктурних сріблах.

На рисунку 10 представлений спектр поглинання УФ-випромінювання розчину етанолу нанородів срібла. Слабкий плечовий пік при 355 нм належить до оптичних сигнатур срібних наностержнів, і на цьому малюнку показана широка смуга поглинання при $\lambda_{max} = 420$ нм, що обумовлено коливанням електронів зони провідності при поверхневому плазмонному резонансі [23–27]. Положення плазмонної смуги поглинання залежить від розміру частинок, співвідношення сторін та діаметра нанопроволок або наностержнів [28]. У цьому випадку широка смуга поглинання демонструє, що кінцевим продуктом

має бути наявність як срібних нанородів, так і дисперсних частинок, що узгоджується з попередніми електронно-мікроскопічними дослідженнями, як показано на малюнку 1 (а).

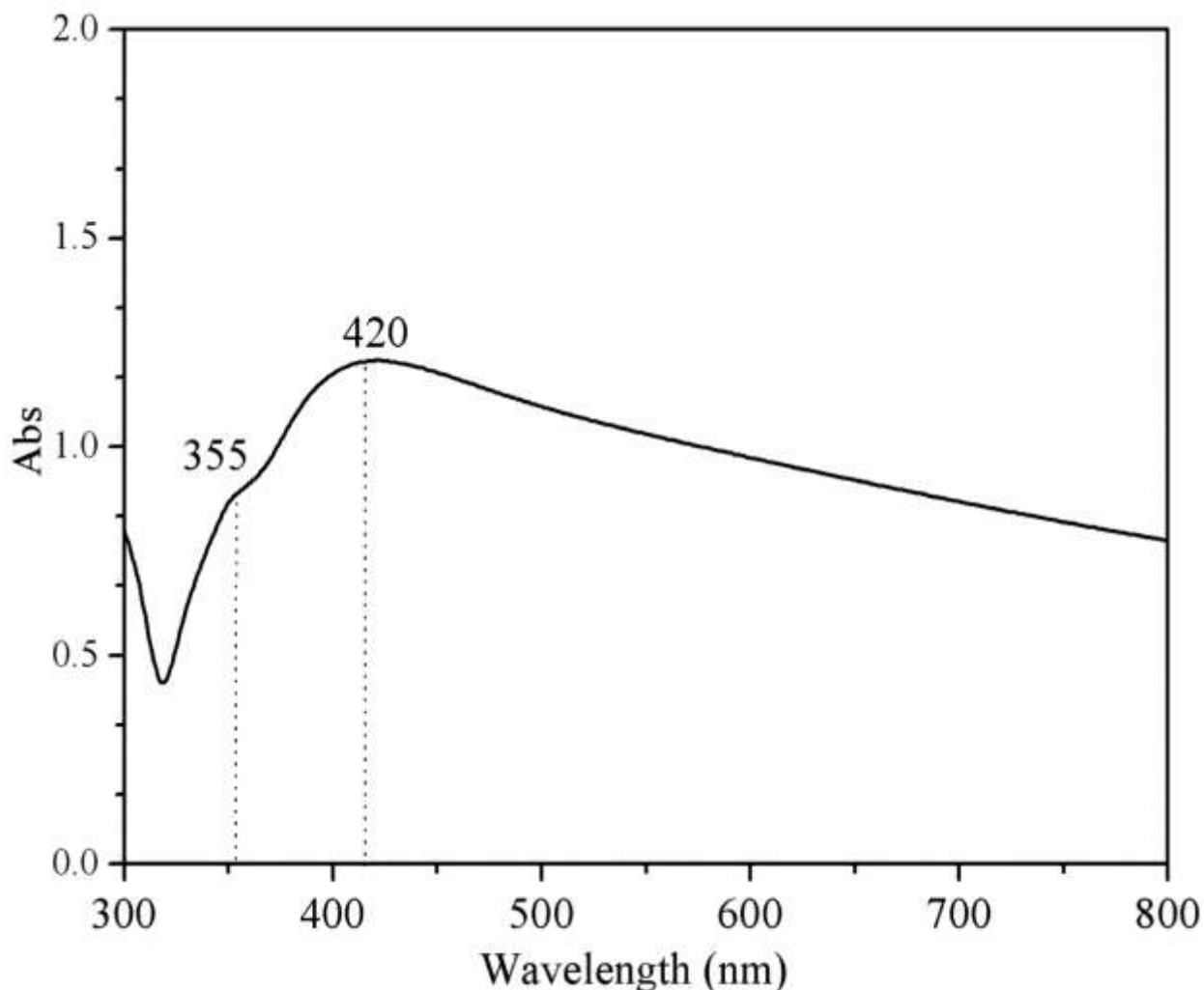


Рис. 10. УФ-видимий спектр поглинання продукту.

Вплив молярного співвідношення PVP та AgNO₃

Встановлено, що молярне співвідношення повторюваної одиниці PVP та AgNO₃ відіграє важливу роль у синтезі срібних нанородів. На рисунку 11 показано морфологію SEM синтезованих продуктів, взятих з різних мольних співвідношень, молярне відношення PVP до AgNO₃ збільшено з 1,5 до 10. На рис. 11 (а) та (b) показано, що зразок має багато аморфних частинок і дрібних стрижнів. Коли молярне співвідношення було збільшено до 3,5: 1 (рис. 11в), зразок мав низку срібних нановородів із випадковою орієнтацією, прийнятні

для практичного використання, а діаметр і довжина стрижнів були рівномірними. З подальшим збільшенням молярного відношення PVP до AgNO_3 (рис. 11г та д), деякі стрижні стають неоднорідними вздовж поздовжньої осі; кількість колоїдних частинок зростає. Середній розмір наночастинок щілини становить ~ 100 нм, і жодних срібних нанородів не спостерігалося, як показано на рисунку 11 (f). Можна зробити висновок, що відповідне молярне співвідношення PVP до AgNO_3 було сприятливим для утворення однорідних срібних нанородів, і відносно низьке відношення PVP до AgNO_3 може призвести до неповного покриття не тільки швидкозростаючих торців, але і бічну поверхню кожного нанородяга. Неповне покриття PVP на бічних поверхнях не може ефективно пасивувати ці грані, це може призвести до форматування великої кількості аморфних частинок, а наностержни стали товщі. Порівняно високе молярне відношення PVP до AgNO_3 спричинило високе покриття PVP на всіх гранях насіння, що призвело до ізотропного методу росту.

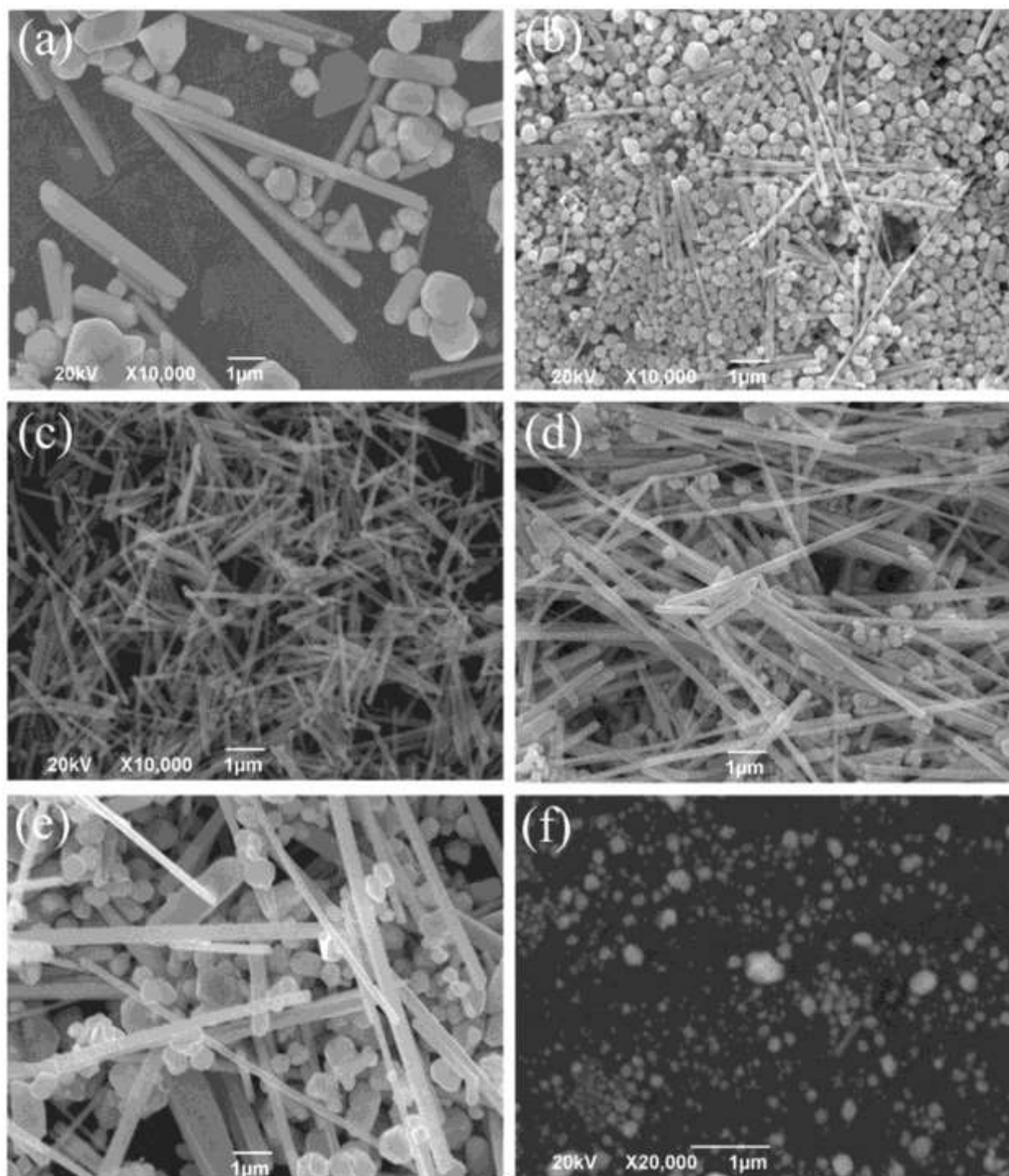


Рис. 11. Зображення SEM синтезованих продуктів з різним молярним співвідношенням між PVP та $AgNO_3$. (a) $n_{PVP} / n_{AgNO_3} = 1,5$; (b) $n_{PVP} / n_{AgNO_3} = 2,5$; (c) 3,5; (d) 4,5; (e) 5,5; (f) 10. Інші умови були тими ж, що показані на рис. 8.

3.2.1. Властивості нанострутних конструкцій.

Нанородільні структури GaGdN вирощували на підкладках Si (001) з нативним шаром SiO₂ методом радіочастотного посиленого плазмою MBE (RF-MBE) в багатих азотом умовах. Після термічного очищення підкладки Si при 870 ° C протягом 15 хв буферні шари LT GaN вирощували при 450 ° C протягом 60 с. Потім відпал проводили при 850 ° C протягом 10 хв в активованій плазмою атмосфері азоту з подальшим ростом наностержнів GaN при 800 ° C протягом 15 хв. Потім вирощували нанострутники GaGdN. Нарешті, шари GaN осаджувались для запобігання окисленню поверхні наностержнів GaGdN.

Коли наностержні GaGdN вирощувались при високих температурах субстрату, наприклад, при 850 ° C, діаметр наностержника підтримувався постійним, незалежно від довжини наностержня. Однак при вирощуванні в LTs, наприклад при 550 ° C, для збільшення вбудованої концентрації Gd, використання високого потоку Gd поступово збільшувало діаметр наностержнів GaGdN із прогресом зростання та погіршувалась кристалічна якість наностержнів. Для вирішення цієї проблеми були вирощені наностержні структури GaGdN / GaN SL, як показано на рис. 12 (а).

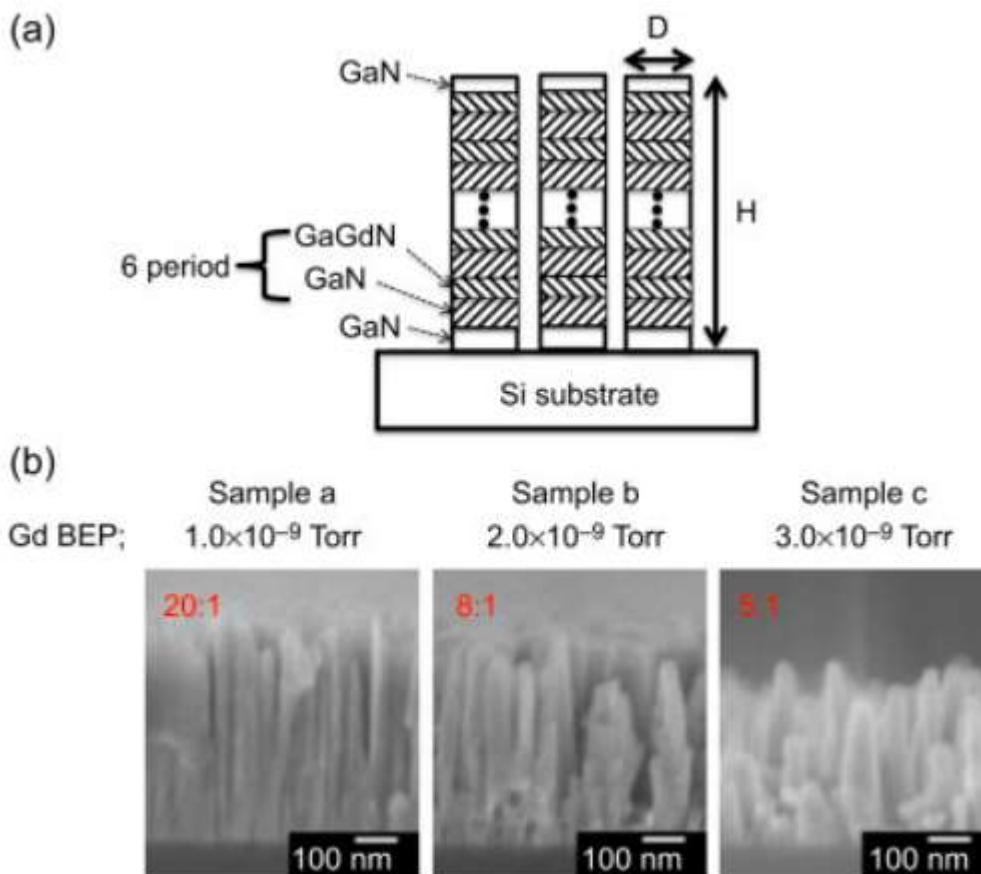


Рис. 12. (a) Схематичний вигляд вирощених наноструктур GaGdN / GaN SL. (b) Зображення SEM у поперечному перерізі для наноструктур GaGdN / GaN SL як функції еквівалентного тиску пучка Gd (BEP).

Фотографії скануючої електронної мікроскопії (SEM) для цих наностержнів структури GaGdN / GaN SL з різним співвідношенням сторін нанородів (відношення висоти до діаметра). На цих наностержнях GaGdN на кривих M-H при RT спостерігали чіткий гістерезис і насичення. Крім того, за рахунок зміни співвідношення сторін нанородів було покращено вертикальне намагнічування, як показано в таблиці 1 Для реалізації CP-LD, вертикально намагнічених по суті потрібні шари DMS.

	Ga flux (Torr)	Gd (%)	Aspect ratio (H/D)	M_r ratio (M_r/M_s)- $ (M_r/M_s) $
A	1×10^{-9}	1.2	20	0.97
B	2×10^{-9}	2.2	8	0.94
C	3×10^{-9}	8.7	5	0.28

Таблиця 1. Коефіцієнт залишкової намагніченості (M_r) для нанострутневих структур GaGdN як функція пропорції нанороділь (висота / діаметр).

M_s - намагніченість насичення.

3.2.2. Приготування детекторного реагенту.

GNR, діаметром приблизно 10 нм і довжиною 40 нм, був наданий д-ром Олександром Ораєвським (TomoWave Laboratories, Х'юстон, Техас) для використання в цьому дослідженні (рис. 12). GNR були ковалентно зв'язані з комерційними моноклональними антитілами (Ab), вирощеними проти трьох специфічних агентів HTLV (тип 1), ВІЛ (тип 1) та Гепатит-В (ВГВ). Всі антитіла були отримані від Abscam. Після отримання антитіла розбавляли до концентрації 20 мкг / мл, а аліквоти зберігали замороженими при -20°C до використання. GNR були кон'юговані з антитілом для виявлення для отримання цільового контрастної речовини з сильним сигналом ОА. Після тіюляції БНР, білки антитіл кон'югували з паличками за допомогою хімічної хімії кон'югації (тобто ковалентний зв'язок утворювався в результаті реакції з 1-етил-3-(3-диметиламінопропіл) карбодіїмідом гідрохлоридом (EDC, Pierce, Rockford, IL)). Після реакції ГНР пегілювали, щоб покрити непрореаговані золото. Спряжений Агенти Ab-GNR розводили 1:50 у фосфатному сольовому розчині, а потім використовували в обсязі 100 мкл за протоколом NanoLISA.

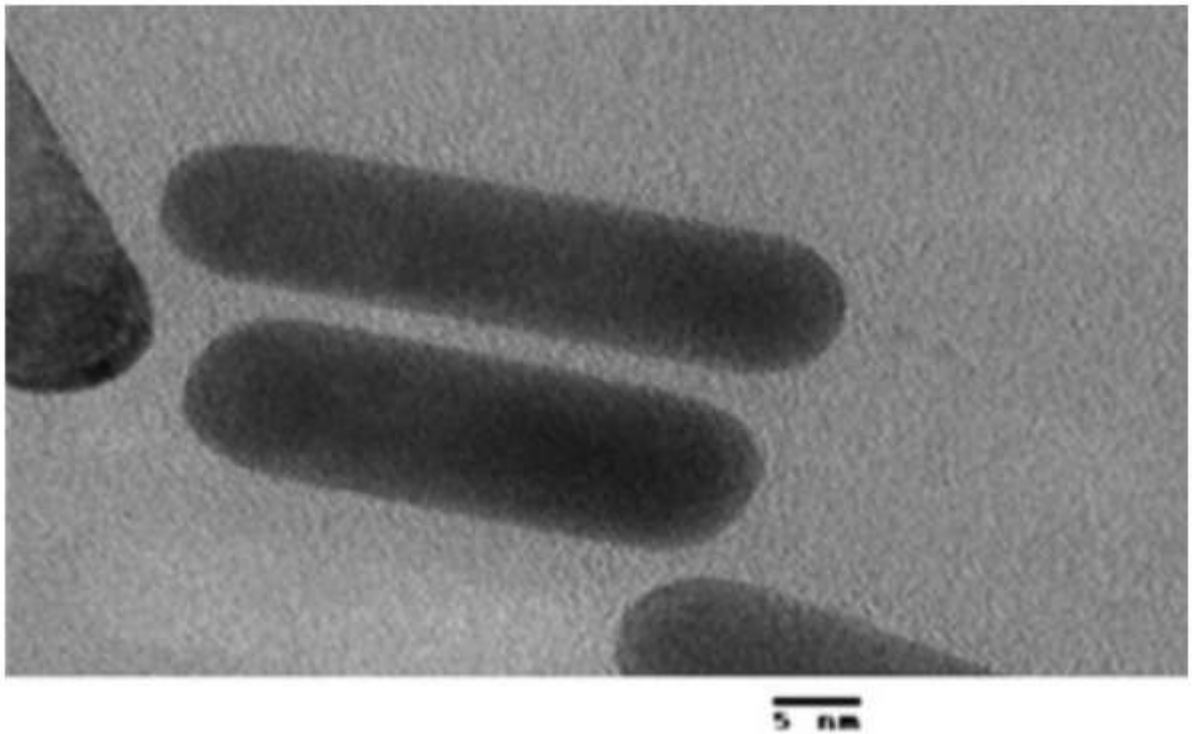


Рис. 13. Промінна електронна мікрофотографія золотих нанородів, що використовуються для NanoLISA.

Метою кон'югації було отримання функціоналізованих наночастинок, що складаються з нанородяга, приєднаного до безлічі молекул Ab, як схематично показано на рисунку 14. У наведеному прикладі цільовий антиген адсорбувався на пластиковому субстраті, а детектуючий Ab з кон'югованим GNR був пов'язаний з цільовим білком. Після процесу адсорбції незв'язаний Ab-GNR вимивали зі свердловини. Решта комплекси GNR дали сильну реакцію OA порівняно із лунками, у яких відсутній цільовий білок, у яких специфічного зв'язування цільових контрастних речовин не відбулося. Середня площа поверхні GNR становила приблизно 1400 nm^2 порівняно із середнім розміром моноклональних антитіл 20 нм. Теоретично, GNR такого розміру, якщо він буде насичений зв'язаним білком, матиме в середньому 4–5 Ab.

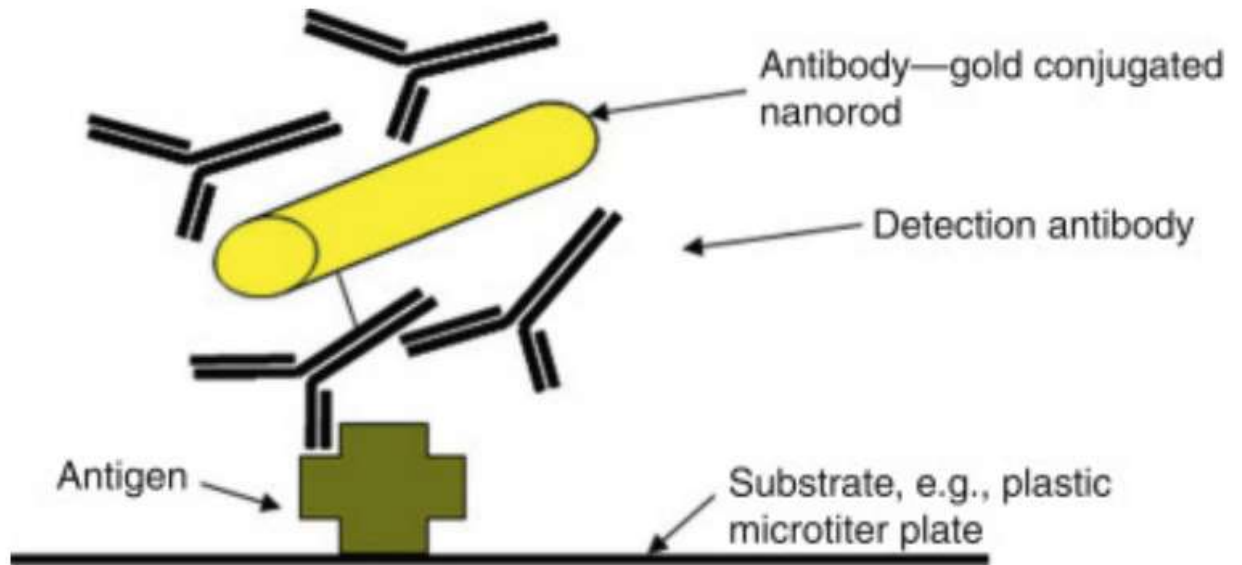


Рис. 14. Оптоакустичне виявлення вірусного антитіла за допомогою функціоналізованих нанородів золота (GNR). На схемі показано конструкцію аналізу: антитіла для виявлення кон'юговані з GNR. Якщо у зразку присутній комплементарний антиген, антитіло зв'язується з ним і вимірюється сильним сигналом ОА, генерованим GNR, при збудженні відповідним імпульсом лазерної довжини хвилі. Від Maswadi et al. (2011).

3.2.3. Наноманіпуляція із системою доповненої реальності.

Нанородів маніпулюють, щоб продемонструвати ефективність та результативність нанороботизованої системи на основі АСМ. На рисунку 14 А зображено срібний наностержень (діаметр 100 нм, довжина 1,3 мкм), нанесений на поверхню полікарбонату заздалегідь створеною траншеєю. Рисунок 15 В та С - це візуальний зворотний зв'язок у режимі реального часу, який відображається в системі доповненої реальності. Візуальний дисплей показує, що нанопровід успішно вдавнено в траншею. Реальний результат від нового зображення АФМ, як показано на рис. 14 D, має той самий результат, що і в інтерфейсі доповненої реальності, як показано на рис. 14 С. З цих знімків ми бачимо, що візуальне відображення може дуже добре відповідати дійсним результатам маніпуляцій. Кілька етапів маніпуляцій можна виконувати

послідовно без проміжного сканування зображення, що, в свою чергу, свідчить про підвищену ефективність та ефективність наноманіпуляції на основі АСМ.

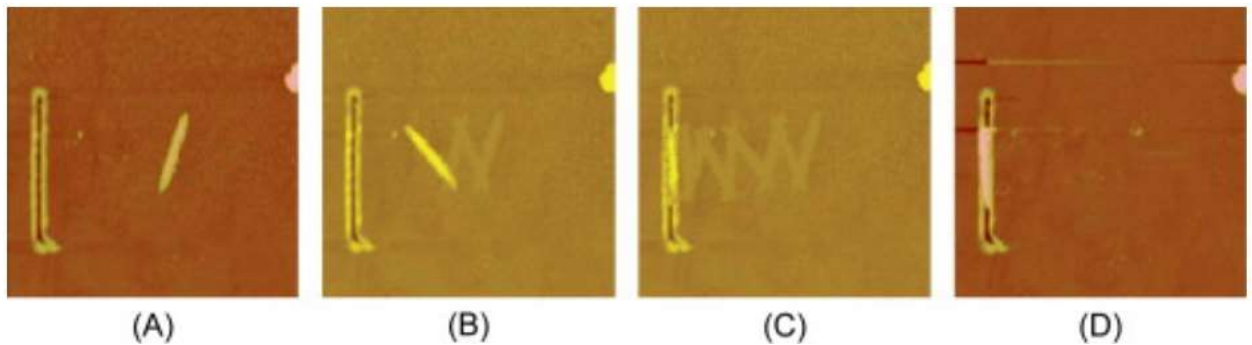


Рис. 15. (А) Срібна нанопроволока діаметром 100 нм і довжиною 1,3 мкм на гладкій полікарбонатній поверхні в діапазоні сканування 5 мкм × 5 мкм. Траншея створюється заздалегідь на поверхні шляхом вписування наконечника в поверхню. (В) і (С) Зображення відображається в інтерфейсі доповненої реальності. Операція штовхання нанопроволоки забиває дріт у кріплення. (D) AFM-зображення шляхом нового сканування після останньої операції натискання.

3.3. Моделювання наностержня для питань виробництва процесорів.

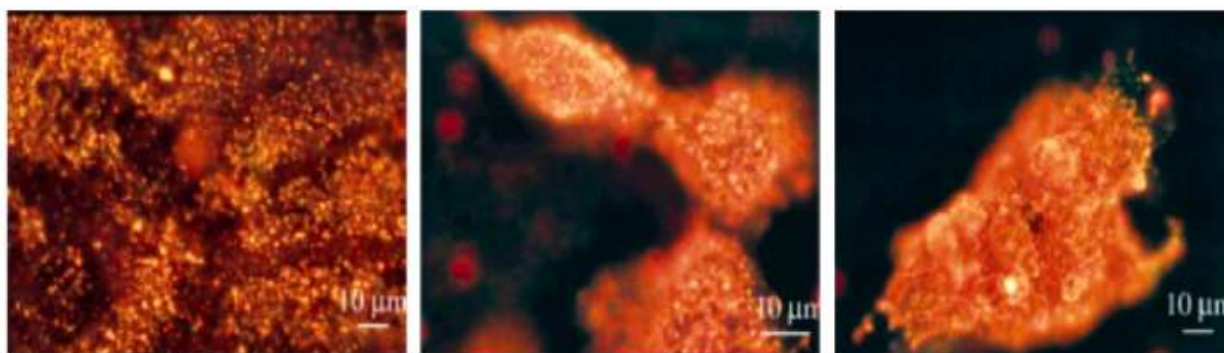
Результати показують, що золоті нановородки мають дві смуги поглинання: поздовжню смугу LSPR та смугу TSPR. Смуга TSPR має меншу залежність від співвідношення довжини та діаметра стрижнів, а смуга TSPR фіксована, а міцність масиву слабка. Однак поздовжня смуга LSPR дуже чутлива до показника заломлення навколишнього середовища, який залежить від співвідношення довжини до діаметра наностержня. Тим часом, із збільшенням відношення довжини до діаметра підготовленого наностержня золота, поздовжній LSPR має значний червоний зсув і дуже чутливий до будь-яких змін показника заломлення навколишнього середовища. Отже, посилення поздовжнього LSPR забезпечує оптимізацію оптичних, теплових та акустичних властивостей золотих наностержня, що призводить до більш широких застосувань у зондуванні, біомедицині та виявленні. Поздовжній

LSPR має велику залежність від розміру, морфології та навколишнього середовища середовища золотих наностержня, тому його можна використовувати в різних сенсорних додатках, змінюючи співвідношення сторін підготовлених наностержень золота. Поздовжній LSPR підвищує ймовірність міжзонних променевих переходів, що робить можливим досягнення двофотонної люмінесценції (TPL) та багатофотонної люмінесценції (MPL), яких важко досягти. Ця властивість виявилася корисною для біологічної ефективності протягом останніх кількох років. Після посилення поздовжнього LSPR енергія поглинання може виділяти велику кількість енергії до золотих наностержнів і може виділятися до швидкої нерадіаційної форми навколишнього середовища, щоб генерувати високе тепло, завдяки чому наностамби золота можуть використовуватися як тепло для обробки основні захворювання, такі як реагент на рак. Поздовжній LSPR забезпечує сильний підсилюючий ефект поверхневого електричного поля на золотих нанострутниках. Згідно з принципом, згідно з яким електромагнітне посилення посилює комбінаційне розсіювання, наностержня із золота можуть бути використані як раманівські посилювачі для посилення молекулярного раманівського розсіяння поблизу поверхні, яке називається поверхнево-посиленим раманівським розсіюванням (SERS). Можна бачити, що нанохвости золота можуть бути використані як субстратні матеріали SERS для біомедичного зображення або виявлення.

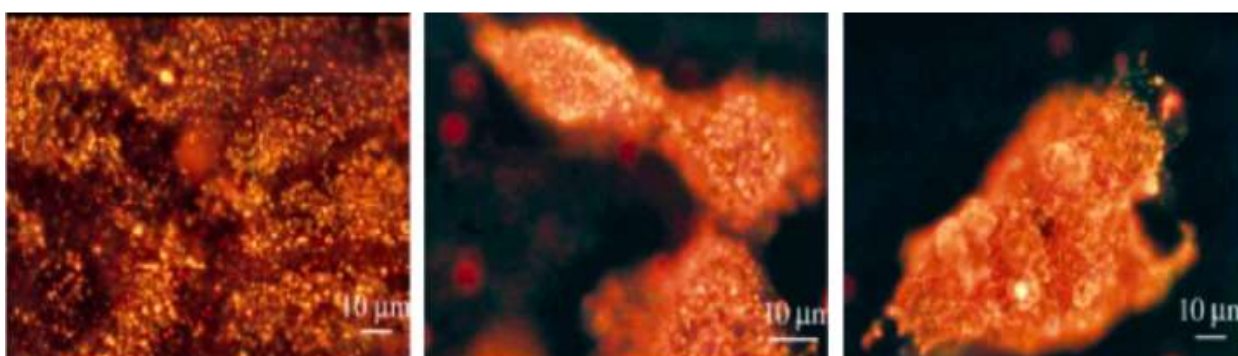
Застосування в біомедицині.

У ближній інфрачервоній області фон розсіювання світла організмами слабкий, тоді як золоті наностержни мають сильне розсіяння. А завдяки релеєвському розсіянню на поверхневому плазмонному резонансі, нанородівки із більшим співвідношенням сторін особливо придатні для розсіювання реагентів зображення. Відповідно до цієї характеристики, успішно застосували нанородів золота на клітинах для досягнення поверхневого плазмонного резонансного зображення, що призвело до великої

практики використання їх фототермічного ефекту для знищення пухлинних клітин. Рецептор поверхні епідермального фактора росту злоякісної пухлинної клітини (EGFR) надмірно виражений щодо доброякісних пухлинних клітин. Наночастинки золота, модифіковані анти-EGFR, можуть бути використані як контрастні речовини для реалізації маркування зображень пухлинних клітин, як показано на рисунку 16. використовували нанотропи золота, модифіковані поліелектролітом, для розсіювання зображень пухлинних клітин шляхом електростатичного мічення специфічних антитіл. Група Бен-Якара з Техаського університету використовувала двофотонну люмінесценцію (TPL) для золотих нанородів для тривимірної флуоресцентної візуалізації біологічних зразків та реалізувала візуалізацію ракової клітини шкіри A431 з високою експресією EGFR. Золоті наностержні контролюються за розмірами та морфологією, мають велику площу поверхні та легкі для модифікації поверхні; мають високу стабільність і низьку токсичність; а також може використовуватися для носіїв наркотиків або фототермотерапії. Серед них Коул та ін. виявили, що нанохвості золота мають високу ефективність фототермічного перетворення, що забезпечує теоретичну основу для фототермічної терапії. Віджая та ін. виявив, що нитки ДНК можуть вибірково вивільнятися за допомогою лазерного опромінення навантажених ДНК золотих нанородів, що забезпечує новий напрямок доставки медичних препаратів. З цієї точки зору перспектива застосування нанородів золота в біомедицині дуже широка.



(a)



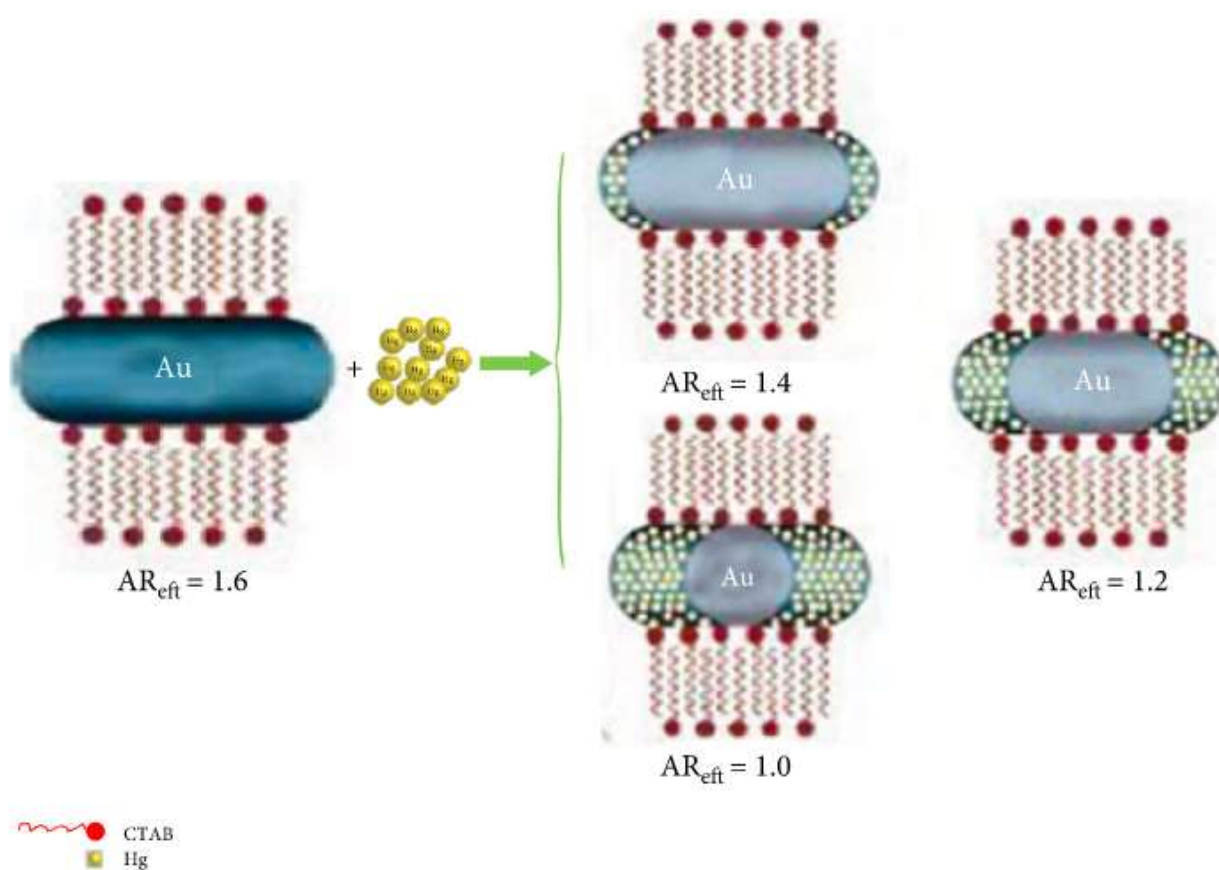
(b)

Рис. 16 (а) Зображення, що розсіюють світло наносфер EGFR / Au після інкубації з клітинами протягом 30 хв при кімнатній температурі. (б) Зображення, що розсіюють світло нанородів проти EGFR / Au після інкубації протягом 30 хв при кімнатній температурі.

Застосування у виявленні.

Відкриті або модифіковані поверхнею нанохвості золота можуть бути зібрані впорядковано під дією певних молекул або іонів або агломерату в неупорядкованому порядку, щоб викликати зміни в їх характерних спектрах. Виходячи з цього принципу, можна виявити наявність цих специфічних молекул або іонів у розчині та визначити їх вміст. Рекс та співавт. використовував реакцію амальгами, обмежену кінцями нанородів золота, для завершення точного та надійного аналізу іонів ртуті fg / L шляхом спектральних змін екстинкції, спричинених зменшенням співвідношення сторін наностержнів, як показано на рисунку 17. Zhu et in. підготував

тиольований зонд ДНК, адсорбований на золотих наноструктурах, і сформував збірку нанородільного золота SS із сигналом PCD шляхом взаємодії T-Hg²⁺ + -T шляхом селективного комплексоутворення тиміну на іонах ртуті, який можна використовувати для виявлення іонів ртуті. Ван та співавтор. використовували реакцію між антигенами антитіл, щоб продемонструвати виявлення кольору на основі нанородних мембран із золотом, покритих кремнеземом. Вони використовували аскорбінову кислоту для зменшення іонів ртуті, що також спричиняло значний колір в результаті реакції амальгами із золотом та досягало виявлення іонів ртуті. Введення мезопористого діоксиду кремнію може додатково поліпшити біобезпеку матеріалу, а шар кремнію може також захищати золоті наностержні як ядра.



(a)

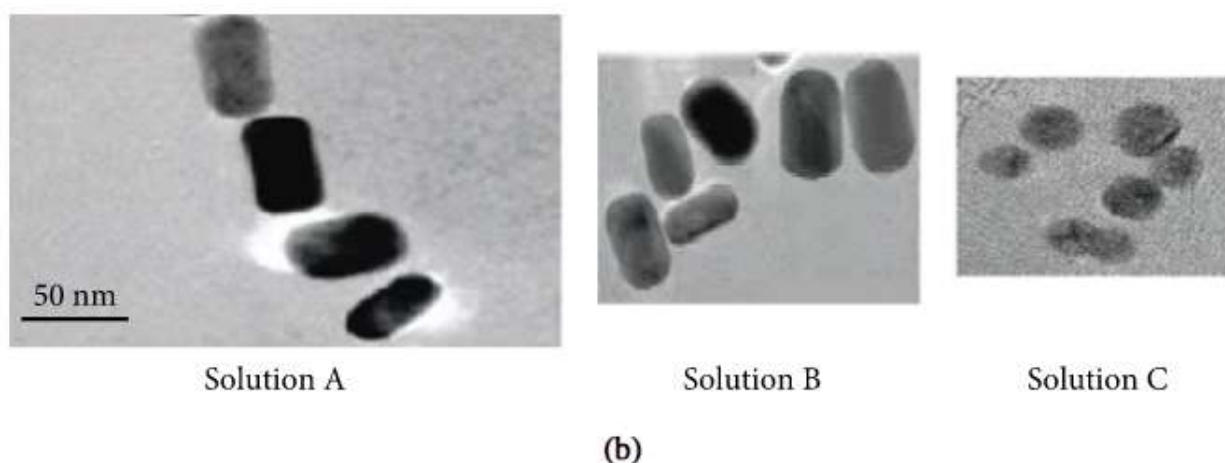


Рис. 17. (a) Принципова схема реакції змішання нанородів Hg та золота. (b) Реакція головки нанородиль Hg та золота на довгі / зменшення співвідношення діаметру наностержнів.

Застосування в оптичному зберіганні та каталізації інформації.

Встановлено, що пристрій для зберігання інформації великої ємності можна підготувати, використовуючи перестроювання довжини хвилі та поляризаційну залежність наностержнів золота, оскільки нанострутники збуджують та накопичують фотонну енергію для поглинання деформації після поглинання випромінювання. Виходячи з чутливості відношення довжини до діаметра золотих нановородів до їх поздовжньої довжини хвилі LSPR, наностержни золота з різним співвідношенням сторін можуть реєструвати свою деформацію лазерами різної довжини хвилі, збільшуючи тим самим щільність зберігання. Чон та ін. використовував лазерне опромінення золотих наностержнів, а потім використовував поздовжній LSPR для спектрального кодування оптичного накопичувача високої щільності після деформації наностержнів золота. Перес-Юсте та ін. підготували композитну нанородильну плівку PVA-Au і виявили, що при опроміненні плівки лазером, змінюючи кут поляризації падаючого світла, опромінені та неопромінені ділянки суттєво відрізнялися через розмір золота наностержні, тому це явище можна використовувати для оптичного друку. Qu et al. прикріпив наночастинки срібла до поверхні золотих нанородів і зшив композит до

фотонно-електродного трубопроводу Pt / n-Si / Ag. Було встановлено, що введення золотих нановородів значно посилювало фотокаталітичну активність, а спектральна залежність вказувала на каталітичне посилення, отримане від поздовжнього LSPR, як показано на рисунку 18. Малі розміри наночастинок Pt мають хороші каталітичні характеристики, але для того, щоб для збереження дисперсності наночастинок Pt, наностержни золота можуть бути використані як субстрат для іммобілізації наночастинок Pt. Ван та співавт. наносив субмоношар Pt на наностамби золота для поліпшення каталітичних показників окислення мурашиної кислоти. Він та ін. наносив сплав AgPt на наностамби золота, щоб суттєво інгібувати отруєння CO.

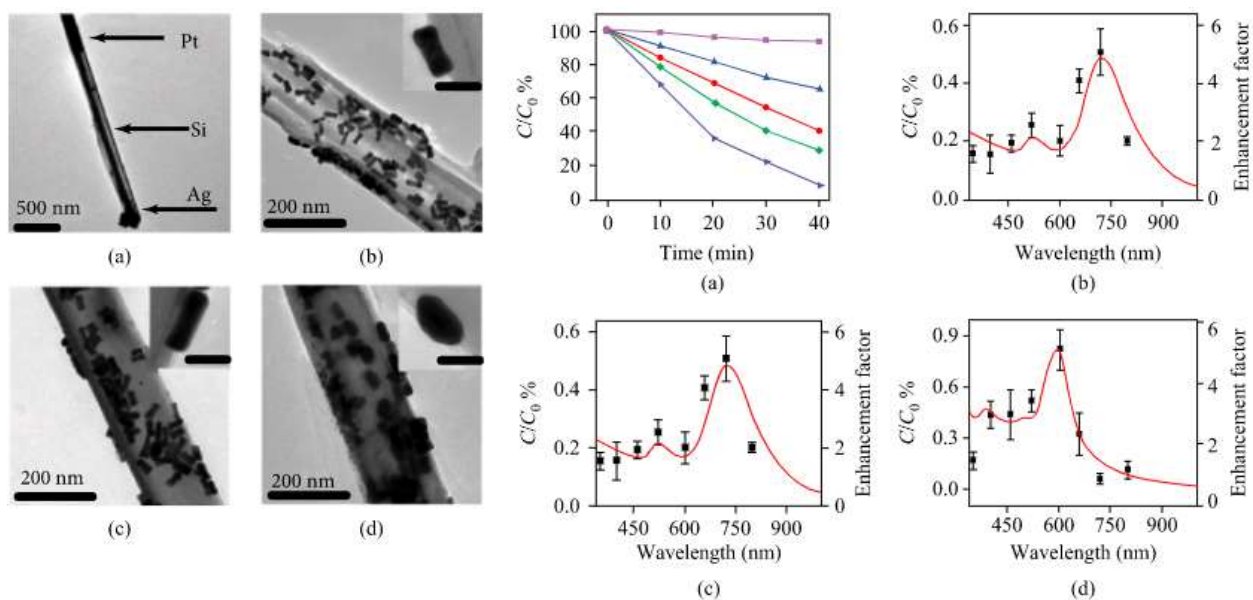


Рис. 18. Електронна мікрофотографія нанородів золота, прикріплених до фотодіодів, класифікується як LSPR-залежне посилення фотокаталітичної активності.

РОЗДІЛ 4. ТЕХНІКА БЕЗПЕКИ ПРИ РОБОТІ З ПЕРСОНАЛЬНИМ КОМП'ЮТЕРОМ

4.1. Забезпечення техніки безпеки та охорони праці при роботі з ПК

Безпека робочого місця забезпечується рядом факторів. Нижче наводиться характеристика кожного з них.

1. Правильний вибір робочого місця - дисплей (монітор) є джерелом електромагнітного випромінювання. Рекомендується встановлювати захисний екран для зниження впливу електромагнітного випромінювання від задньої частини іншого дисплея. Неприпустимо влаштовувати робочі місця близько одне від іншого. Розміщувати комп'ютер необхідно подалі від опалювальних приладів і виключати попадання на нього прямих сонячних променів. Неприпустимо працювати навпроти бічної або задньої частини іншого дисплея, якщо відстань до нього - менше 2 м.

2. Розташування оргтехніки:

- системний блок поміщається на надійну поверхню (міцний стіл, масивна підставка / тумба) так, щоб виключати навіть випадковий його струс;
- дисплей необхідно встановлювати на такій висоті, щоб центр екрана був на 15-20 см нижче рівня очей. Відстань від очей до екрана - не менше 50 см;
- клавіатура розташовується на відстані 15-30 см від краю стільниці або на спеціальній висувній дошці.

Не рекомендується установка комп'ютера (і клавіатури) на поверхню, яка створює відблиски і легко «збирає» статичну електрику (оргскло, полірована і покрита лаком дошка). Необхідно стежити, щоб папери або будь-які предмети не закривали вентиляційні отвори працюючих апаратів.

3. Робочі меблі:

- крісло - ширина і глибина сидіння щонайменше 40см.; спинка: висота опорної поверхні 30 ± 2 см.; ширина не менше 38 см .;

підлокітники: довжина не менше 25 см; ширина 5-7 см., висота над сидінням 23 + 3 см .;

- стіл - розміри робочої поверхні (стільніці): довжина - 80-120 см.; ширина - 80-100 см.; висота (відстань від підлоги до робочої поверхні) 68-85 см; оптимальна висота 72,5 см .;
- підставки - для рук: опорна планка для зап'ястя - плоска або вигнута пластина з м'якого матеріалу; поміщається перед клавіатурою. Для ніг: ширина не менше 30 см; довжина (глибина) не менше 40 см.

4. Приміщення:

- площа одного робочого місця з комп'ютером - не менше 6м²;
- освітлення має бути природним і штучним. Рекомендується працювати в приміщенні, де вікна виходять на північ або північний схід. Місцеве освітлення не повинно створювати відблиски на поверхні екрана дисплея. Стримувати потік надмірного світла від вікон слід за допомогою жалюзі (або тканинних штор);
- чистота обов'язкова при роботі за комп'ютером. Вологе прибирання приміщення слід проводити щодня. Неприпустима запиленість повітря, статі, робочої поверхні столу і техніки. Приміщення має бути обладнане системами вентиляції, кондиціонування та опалення. Забороняється робота на комп'ютері в підвальних приміщеннях.

5. Мікроклімат:

- температура повітря - від 21 до 25 °С (в холодну пору року); від 23 до 25°С (в теплу пору року);
- вологість повітря (відносна) - від 40 до 60%. Неприпустимі різкі перепади температури і вологість повітря більше 75%;
- іонізація повітря - позитивно заряджені іони, що утворюються у приміщенні, дуже шкідливі для здоров'я, вони викликають швидке

стомлення, головний біль, почастішання пульсу та дихання (через недостатнє надходження кисню в кров).

Не обов'язково вимикати комп'ютер на час невеликих перерв у роботі. Перед підключенням/від'єднанням пристроїв введення-виведення потрібно повністю відключати цю техніку і комп'ютер від електромережі. При появі запаху гару або при виявленні пошкодження ізоляції, обриву проводу слід негайно відключити пристрої (краще - загальне електроживлення) і повідомити про несправність керівнику. Забороняється торкатися до задньої панелі працюючого системного блоку (процесора). Неприпустимо попадання вологи на системний блок, дисплей, клавіатуру та інші пристрої (краще не ставити поруч горнятко з чаєм або кавою, стакан з соком). При інтенсивній роботі різко зростає напруженість електричного поля на клавіатурі і «миші». Від тертя рук про них через 0,5-1 годину роботи електростатичний потенціал досягає 10-20 кВ / м, що має на організм шкідливий вплив. Працювати з «мишею» потрібно на спеціальному килимку.

Необхідно кілька разів протягом робочої зміни (краще щогодини) змочувати руки водою, щоб знімати електростатичні заряди, а по завершенні роботи вимити з милом руки і обличчя, щодня протирати вологою серветкою екран дисплея, клавіатуру, «миша» - прибирати статичну електрику, регулярно проводити вологу антистатичну обробку приміщення.

Правильна робоча поза дозволяє уникати перенапруження м'язів, сприяє кращому кровотоку і диханню. Слід сидіти прямо (не сутулячись) і спиратися спиною об спинку крісла. Прогинати спину в поперековому відділі потрібно не назад, а, навпаки, трохи вперед. Неприпустимо працювати, розвалившись у кріслі. Така поза викликає швидке стомлення, зниження працездатності. Щоб не травмувати хребет, важливо:

- уникати різких рухів;
- піднімаючись/сідаючи, тримати голову і торс прямо.

Необхідно знайти таке положення голови, при якому менше напружуються м'язи шиї. Рекомендований кут нахилу голови - до 20°. У цьому випадку значно знижується навантаження на шийні хребці і на очі.

Положення рук і ніг: під час роботи за комп'ютером необхідно розслабити руки, тримати передпліччя паралельно підлозі, на підлокітниках крісла, кисті рук - на рівні ліктів або трохи нижче, зап'ястя - на опорній планці. Тоді пальці отримують найбільшу свободу пересування. Не слід високо піднімати зап'ястя і вигинати кисті - це може стати причиною болю в руках і оніміння пальців. Можна надягати легкі рукавички без пальців, якщо холонуть руки. Коліна повинні розташовуватися на рівні стегон або трохи нижче. При такому положенні ніг не виникає напруга м'язів. Не можна схрещувати ноги, класти ногу на ногу - це порушує циркуляцію крові через здавлювання судин. Краще тримати обидві стопи на підставці або на підлозі. Необхідно зберігати прямий кут (90°) в області ліктювих, тазостегнових, колінних і гомілковостопних суглобів.

Дихання і розслаблення м'язів: під час роботи за комп'ютером необхідно:

- дихати ритмічно, вільно, глибоко, щоб забезпечити киснем всі частини тіла;
- тримати в розслабленому стані плечі і руки - в руках не буде напруги, якщо плечі опущені;
- частіше моргати і дивитися вдалину. Це сприяє зволоженню і очищенню поверхні очей. Мала рухливість і тривала напруга очних м'язів можуть стати причиною порушення акомодатії.

При відчутті втоми якоїсь частини тіла необхідно зробити глибокий вдих і сильно напружити втомлену частину тіла, після чого затримати дихання на 3-5 секунди і на видиху розслабитися; можна повторити. При відчутті втоми очей потрібно протягом 2-3 хвилин окинути поглядом кімнату, спрямовувати погляд на різні предмети, дивитися вдалину (у вікно).

Якщо різко виникло загальне стомлення, з'явилося тремтіння зображення на екрані дисплея (погойдування, сіпання, брижі), слід повідомити про це керівника.

ВИСНОВОК

У цьому дослідженні було розглянуто безкаталізаторне зростання MOVPE вертикально добре вирівняних масивів нанородів ZnO для наностержнів ZnO високої чистоти. Ця епітаксійна техніка росту була додатково досліджена для розробки виготовлення складних гетероструктур нанородів, включаючи структури нанородів MQW $ZnO/Zn_{1-x}Mg_xO$ та коаксіальних нанородів гетероструктур. Зокрема, контрольовані розмірами гетероструктури нанородів $ZnO/Zn_{1-x}Mg_xO$ демонстрували систематичні зсуви піків ФЛ через ефект квантового обмеження. Високоякісні монокристалічні нанотрони ZnO використовувались як будівельні блоки для виготовлення високоефективних транзисторів нанородів ZnO, демонструючи велику провідність 1,9 мкС та високу рухливість електронів вище 1000 см² / Вс. Крім того, контрольовані характеристики напівпровідникового з'єднання метал / оксид на добрі омичні контакти або контакти Шотткі на нанотрубках ZnO додатково забезпечували виготовлення високоефективних діодів Шотткі, MESFET і логічних затворів. Гетероепітаксійний ріст вертикально добре вирівняних нанородів ZnO на підкладках p-GaN був використаний для виготовлення світловипромінюючих пристроїв, що демонструють сильну видиму електролюмінесценцію.

Підводячи підсумок, ми продемонстрували м'який метод синтезу монодисперсних срібних нанородів (~ 100 нм у діаметрі та ~ 5 мкм у довжину) за допомогою PVP як захисного агента. На основі рентгенографічних аналізів отримані срібні наностержні були підтверджені як фазово чисте кристалічне срібло з гранітоцентрованою кубічною (ГЦК) структурою. Він може контролювати розмір і форму продуктів, регулюючи параметри синтезу, такі як молярні співвідношення та швидкість введення двох розчинів.

Золоті наностержні (Au NR) привернули великий науковий інтерес завдяки своїм унікальним оптичним властивостям, регульованому співвідношенню сторін та простому модифікуванню поверхні в галузі

біосенсибілізації, біовізуалізації та діагностики та виявлення хвороб. У цьому огляді ми представляємо вичерпний огляд різних методів отримання нанородів золота, включаючи метод твердих матриць, електрохімічний метод, фотохімічний метод, метод опосередкованого насінням зростання, метод вторинного росту та метод аморфного насіння. Також будуть детально обговорені унікальні оптичні властивості нанородів золота та їх застосування в біомедичній галузі, виявленні, каталізі та зберіганні інформації.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. M. T. T. Nguyen, D. H. Nguyen, M. T. Pham, H. V. Pham, and C. D. Huynh, “Synthesis and vertical self-assembly of gold nanorods for surface enhanced raman scattering,” *Journal of Electronic Materials*, vol. 48, no. 8, pp. 4970–4976, 2019. View at: [Publisher Site](#) | [Google Scholar](#)
2. J. Wang, J. Han, C. Zhu et al., “Gold nanorods/polypyrrole/m-SiO₂ core/shell hybrids as drug nanocarriers for efficient chemo-photothermal therapy,” *Langmuir*, vol. 34, no. 48, pp. 14661–14669, 2018. View at: [Publisher Site](#) | [Google Scholar](#)
3. Y. Yu, M. Zhou, W. Zhang et al., “Rattle-type gold nanorods/porous-SiO₂ nanocomposites as near-infrared light-activated drug delivery systems for cancer combined chemo-photothermal therapy,” *Molecular Pharmaceutics*, vol. 16, no. 5, pp. 1929–1938, 2019. View at: [Publisher Site](#) | [Google Scholar](#)
4. P. Wang, W. Sun, Q. Wang et al., “Iodine-labeled Au nanorods with high radiochemical stability for imaging-guided radiotherapy and photothermal therapy,” *ACS Applied Nano Materials*, vol. 2, no. 3, pp. 1374–1381, 2019. View at: [Publisher Site](#) | [Google Scholar](#)
5. P. K. Pathak, A. Kumar, and B. B. Prasad, “Functionalized nitrogen doped graphene quantum dots and bimetallic Au/Ag core-shell decorated imprinted polymer for electrochemical sensing of anticancerous hydroxyurea,” *Biosensors and Bioelectronics*, vol. 127, pp. 10–18, 2019. View at: [Publisher Site](#) | [Google Scholar](#)
6. S. I. Park and H.-M. Song, “Synthesis of prolate-shaped Au nanoparticles and Au nanoprisms and study of catalytic reduction reactions of 4-nitrophenol,” *ACS Omega*, vol. 4, no. 4, pp. 7874–7883, 2019. View at: [Publisher Site](#) | [Google Scholar](#)
7. Hopkins, DS, Pekker, D, Goldbart, PM and Bezryadin, A. 2005. Quantum interference device made by DNA templating of superconducting nanowires. *Science*, 308: 1762–1765. [[Crossref](#)], [[PubMed](#)], [[Web of Science](#) ®], [[Google Scholar](#)]

8. El-Sayed, MA. 2001. Some interesting properties of metals confined in time and nanometer space of different shapes. *Acc. Chem. Res.*, 34: 257–264. [[Crossref](#)], [[PubMed](#)], [[Web of Science ®](#)], [[Google Scholar](#)]
9. Zhong, Z, Wang, D, Cui, Y, Bockrath, MW and Lieber, CM. 2003. Nanowire crossbar arrays as address decoders for integrated nanosystems. *Science*, 302: 1377–1379. [[Crossref](#)], [[PubMed](#)], [[Web of Science ®](#)], [[Google Scholar](#)]
10. Liu, GH and Yu, X. 2011. Silver nanowires-based transparent, flexible, and conductive thin film. *Nanoscale. Res. Lett.*, 6: 75–83. [[Crossref](#)], [[PubMed](#)], [[Web of Science ®](#)], [[Google Scholar](#)]
11. Li, Y, Qian, F, Xiang, J and Lieber, CM. 2006. Nanowire electronic and optoelectronic devices. *Mater. Today*, 9: 18–27. [[Crossref](#)], [[Web of Science ®](#)], [[Google Scholar](#)]
12. Sun, YG, Gates, B, Mayers, B and Xia, YN. 2002. Crystalline silver nanowires by soft solution processing. *Nano. Lett.*, 2: 165–168. [[Crossref](#)], [[Web of Science ®](#)], [[Google Scholar](#)]
13. Salerno, M, Krenn, JR, Lamprecht, B, Schider, G, Ditlbacher, H, Felidj, N, Leitner, A and Aussenegg, FR. 2002. Plasmon polaritons in metal nanostructures: The optoelectronic route to nanotechnology. *Opto-Electron. Rev.*, 10: 217–224. [[Web of Science ®](#)], [[Google Scholar](#)]
14. Xiong, J, Wang, Y, Xue, QJ and Wu, XD. 2011. Synthesis of highly stable dispersion of nanosized copper particles using L-ascorbic acid. *Green Chem.*, 10: 1039–1043. [[Google Scholar](#)]
15. Rabani, E, Reichman, DR, Geissler, PL and Brus, LE. 2003. Drying-mediated self-assembly of nanoparticles. *Nature*, 426: 271–274. [[Crossref](#)], [[PubMed](#)], [[Web of Science ®](#)], [[Google Scholar](#)]
16. Youn, DH, Kim, SH, Yang, YS, Lim, SC, Kim, SJ, Ahn, SH, Sim, HS, Ryu, SM and Shin, DW. 2009. Electrohydrodynamic micropatterning of silver ink using near-field electrohydrodynamic jet printing with tapered-outlet nozzle. *Appl. Phys. A*, 96: 933–938. [[Crossref](#)], [[Web of Science ®](#)], [[Google Scholar](#)]

17. Caswell, KK, Bender, CM and Murphy, C. 2003. Seedless. *surfactantless wet chemical synthesis of silver nanowires*. *Nano. Lett.*, 3: 667–669. [[Google Scholar](#)]
18. Park, BK, Jeong, S, Kim, D, Moon, J, Lim, S and Kim, JS. 2007. Synthesis and size control of monodisperse copper nanoparticles by polyol method. *J. Colloid. Interf. Sci.*, 311: 417–424. [[Crossref](#)], [[PubMed](#)], [[Web of Science ®](#)], [[Google Scholar](#)]
19. Zhou, Y, Yu, SH, Wang, CY, Li, XG, Zhu, YR and Chen, ZY. 1999. A novel ultraviolet irradiation photoreduction technique for the preparation of single-crystal Ag nanorods and Ag dendrites. *Adv. Mater.*, 11: 850–852. [[Crossref](#)], [[Web of Science ®](#)], [[Google Scholar](#)]
20. Wang, XK, Shao, L, Guo, WL, Wang, JG, Zhu, YP and Wang, C. 2009. Synthesis of dendritic silver nanostructures by means of ultrasonic irradiation. *Ultrason. Sonochem.*, 16: 747–751. [[Crossref](#)], [[PubMed](#)], [[Web of Science ®](#)], [[Google Scholar](#)]
21. Zhu, JJ, Liu, SW, Palchik, O, Kolytyn, Y and Gedanken, A. 2000. Shape-controlled synthesis of silver nanoparticles by pulse sonoelectrochemical methods. *Langmuir*, 16: 6396–6399. [[Crossref](#)], [[Web of Science ®](#)], [[Google Scholar](#)]
22. Rodriguez-Sanchez, L, Blanco, MC and Lopez-Quintela, MA. 2000. Electrochemical synthesis of silver nanoparticles. *J. Phys. Chem. B*, 104: 9683–9688. [[Crossref](#)], [[Web of Science ®](#)], [[Google Scholar](#)]
23. Zhou, Y, Yu, SH, Wang, CY, Li, XG, Zhu, YR and Chen, ZY. 1999. A novel ultraviolet irradiation photo-reduction technique for preparation of single crystal Ag nanorods and Ag dendrites. *Adv. Mater.*, 11: 850–852. [[Crossref](#)], [[Web of Science ®](#)], [[Google Scholar](#)]
24. Sadjadi, MAS, Sadeghi, B, Meskinfam, M, Zare, K and Azizian, J. 2008. Synthesis and characterization of Ag/PVA nanorods by chemical reduction method. *Physica E*, 40: 3183–3186. [[Crossref](#)], [[Google Scholar](#)]
25. Chen, H, Gao, Y, Yu, H, Zhang, H, Liu, L, Shi, Y, Tian, H, Xie, S and Li, J. 2004. Structural properties of silver nanorods with fivefold symmetry. *Micron*, 35: 469–474. [[Crossref](#)], [[PubMed](#)], [[Web of Science ®](#)], [[Google Scholar](#)]

26. Hurst, SJ, Payne, EK, Qin, L and Mirkin, CA. 2006. Multisegmented one-dimensional. *nanorods prepared by hard template synthetic methods*, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 45: 2672–2692. [[Crossref](#)], [[PubMed](#)], [[Web of Science ®](#)], [[Google Scholar](#)]
27. Shankar, KS and Raychaudhuri, AK. 2005. Fabrication of nanowires of multicomponent oxides: Review of recent advances. *Mater. Sci. Eng. C*, 25: 738–751. [[Crossref](#)], [[Web of Science ®](#)], [[Google Scholar](#)]
28. Huang, NM, Lim, HN, Radiman, S, Khiew, PS, Chiu, WS, Hashim, R and Chia, C H. 2010. Sucrose ester micellar-mediated synthesis of ag nanoparticles and the antibacterial properties. *Colloids Surf. A*, 353: 69–76. [[Crossref](#)], [[Web of Science ®](#)], [[Google Scholar](#)]
29. Itakura, T, Torigoe, K and Esumi, K. 1995. Preparation and characterization of ultrafine metal particles in ethanol by UV irradiation using a photoinitiator. *Langmuir*, 11: 4129–4134. [[Crossref](#)], [[Web of Science ®](#)], [[Google Scholar](#)]
30. Foss, CA Jr, Hornyak, GL, Stockert, JA and Martin, CR. 1994. Template-synthesized nanoscopic gold particles: Optical spectra and the effects of particle size and shape. *J. Phys. Chem.*, 98: 2963–2971. [[Crossref](#)], [[Web of Science ®](#)], [[Google Scholar](#)]
31. Link, S, Mohamed, MB and El-Sayed, MA. 1999. Simulation of the optical absorption spectra of gold nanorods as a function of their aspect ratio and the effect of the medium dielectric constant. *J. Phys. Chem. B*, 103: 3073–3077. [[Crossref](#)], [[Web of Science ®](#)], [[Google Scholar](#)]
32. Jana, NR, Gearheart, L and Mutphy, CJ. 2001. Wet chemical synthesis of high aspect ratio cylindrical gold nanorods. *J. Phys. Chem. B*, 105: 4065–4067. [[Crossref](#)], [[Web of Science ®](#)], [[Google Scholar](#)]