

Όνομα: Αρτεμία Στυλιανουδάκη

A.M:1975

Πανεπιστήμιο Κρήτης, Τμήμα Μαθηματικών και Εφαρμοσμένων  
Μαθηματικών

## Shape-Dependent Single - Electron Levels for Au Nanoparticles

Στις μέρες μας η Κβαντομηχανική αποτελεί το θεωρητικό υπόβαθρο για τη μελέτη όλων των φαινομένων που συμβαίνουν στον μικρόκοσμο. Όσα αδυνατούσε να περιγράψει η Κλασική Μηχανική για τα άτομα και τα σωματίδια τους (ηλεκτρόνια, πρωτόνια, κλπ), τις συναρτήσεις που τα περιγράφουν και το πώς άτομα δημιουργούν χημικές ενώσεις και δεσμούς, απαντώνται από τα θεωρήματα και τις εξισώσεις της Κβαντικής Φυσικής.

Η εξίσωση Schrodinger αποτελεί τη βασική εξίσωση της Κβαντομηχανικής για την επίλυση ενός προβλήματος και στη γενική περίπτωση η μορφή της χρονοεξαρτημένης εξίσωσης είναι η ακόλουθη:

$$\left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(x, y, z) \right] \cdot \psi_i(x, y, z) = E_i \psi_i(x, y, z)$$

Όπου  $E_i$  και  $\psi_i$  είναι οι ιδιοενέργειες και οι ιδιοκαταστάσεις του συστήματος αντίστοιχα.

Ανάλογα το πρόβλημα και τις συνοριακές του συνθήκες, η εξίσωση Schrodinger και η κυματοσυνάρτηση θα εξαρτώνται από μία μεταβλητή (μονοδιάστατο πρόβλημα), ή δύο (δισδιάστατο), ή τρεις (τριδιάστατη περίπτωση). Κάθε φορά επιλέγεται και το κατάλληλο σύστημα συντεταγμένων για την επίλυση του προβλήματος, με βάση τη συμμετρία που το διέπει.

Με κατάλληλη μέθοδο μπορεί να χρησιμοποιηθεί και να λυθεί η εξίσωση Schrodinger για την εύρεση του σχήματος νανοσωματιδίων. Αυτό είναι και το θέμα που θα απασχολήσει την παρουσίαση αυτή. Όπως αναφέρεται και στο άρθρο του Georgios D. Barmparis et all (2016), το σχήμα, η μορφή των μεταλλικών νανοσωματιδίων παίζει ιδιαίτερα σημαντικό ρόλο για την επιλογή και αποτελεσματική λειτουργία τους ως ετερογενής καταλύτες και κυρίως ως φωτοκαταλύτες, αλλά και γενικά σαν οπτοηλεκτρονικές διατάξεις. Οπότε κρίνεται σημαντικός ο έλεγχος πειραματικά του σχήματος των νανοσωματιδίων αυτών, στο συγκεκριμένο άρθρο γίνεται κυρίως η μελέτη για νανοσωματίδια Χρυσού (Au) .

Γενικά, η μέθοδος καθορισμού του σχήματος ενός νανοσωματιδίου είναι μία δύσκολη διεργασία, που εν γένει απαιτεί συνδυασμό τεχνικών. Από την άλλη, είναι γνωστό ότι η διάταξη των κβαντισμένων ενεργειών στα νανοσωματίδια μετάλλων επηρεάζεται από το σχήμα τους, το σχήμα εξαρτάται από την κρυσταλλική δομή του υλικού. Η ιδέα λοιπόν είναι ότι αν μπορεί να μετρήσει κάποιος ένα σύνολο ενεργειακών καταστάσεων των ηλεκτρονίων ενός συγκεκριμένου υλικού, τότε μπορεί να συμπεράνει ποιο είναι το σχήμα του νανοσωματιδίου που δίνει αυτήν την κατανομή ενεργειών.

Επομένως, σε αυτήν την παρουσίαση θα γίνει αναφορά σε αυτή τη μέθοδο, της επίλυσης της εξίσωσης Schrodinger και την εύρεση των ιδιοενεργειών και ιδιοκαταστάσεων για διάφορες διατάξεις νανοσωματιδίων, τις δύο που εμφανίζουν και την υψηλότερη συμμετρία, την κυβική και την σφαιρική. Και έπειτα, για άλλους σχηματισμούς, οι οποίοι προκύπτουν από νανοσωματίδια ενώσεων από χρυσό με οργανικές ή ανόργανες ενώσεις. Για νανοσωματίδια που η ενεργός τους επιφάνεια δεν καλύπτεται από κάποιο διαφορετικού τύπου υπόστρωμα, η μορφή τους είναι πιο κοντά στην κυβική, ενώ για άλλα που είναι επικαλυμμένα με ένα στρώμα CO, το σχήμα τους προσεγγίζει εκείνο μίας σφαίρας. Θα γίνει αντιληπτό ότι η μέθοδος αυτή δίνει αποτελέσματα που αποκρίνονται και συμφωνούν σε μεγάλο βαθμό με τις πειραματικές μετρήσεις. Θα φανεί δηλαδή η εξάρτηση των ιδιοενεργειών, των ιδιοκαταστάσεων, της πυκνότητας καταστάσεων και του εκφυλισμού των ενεργειακών σταθμών από το σχήμα των νανοσωματιδίων.

Αυτή η μελέτη προσδοκά να δημιουργήσει ένα πρόσφορο έδαφος για τον καθορισμό και τη μελέτη της μορφής των νανοσωματιδίων χρησιμοποιώντας τη μέθοδο που αναφέρθηκε παραπάνω. Έτσι, θα επιτευχθεί ο καλύτερος και αποδοτικότερος σχεδιασμός καταλυτών και άλλων διατάξεων, με υψηλή ενεργειακή απόδοση για ένα πλήθος εφαρμογών.

### **Βιβλιογραφία:**

[1]: Georgios D. Barmparis, Georgios Kopidakis, Ioannis Remediakis. (2016). Shape-Dependent Single Electron Levels for Au Nanoparticles, 9(4), 301.

[2]:Wikipedia ( πρόσβαση στις 17/04/2019)