

УДК 538.95

Атомистическое моделирование процесса формирования золото-кремниевых  
core-shell наночастиц

Н.Ю. Лопаницына

Московский физико-технический институт (государственный университет)

<sup>2</sup>Объединенный институт высоких температур РАН

[lopanitsyna@phystech.edu](mailto:lopanitsyna@phystech.edu)

В настоящее время существует большой интерес к исследованию нанообъектов типа core-shell [1,2,3], так как такие частицы обладают уникальными свойствами, применение которых может быть найдено в биологии, химии, медицине. В частности, core-shell частицы, одной из компонент которых является благородный металл, а другой – диэлектрик, обладают оптическим резонансом в видимом диапазоне [2,3], где частота резонанса зависит от геометрических параметров частиц. Таким образом, частоту можно варьировать, меняя толщину слоя оболочки и соотношение между объемами компонент. Настраиваемый резонанс в видимом и ближнем ИК диапазоне может быть использован в рамановской спектроскопии, а также для улучшения биологических и химических сенсоров, оптических фильтров и оптических ловушек. Золото-кремниевые частицы могут быть получены методом лазерной абляции, путем облучения ультракороткими лазерными импульсами многослойных пленок. Для того, чтобы синтезировать частицы с желаемыми характеристиками, необходимо понимать механизмы их формирования. В данной работе были рассмотрены процессы, происходящие при образовании золото-кремниевых core-shell частиц.

На начальном этапе были протестированы различные модели потенциала взаимодействия золота-кремния и оценены значения величин, важных для моделирования процесса формирования частицы. Было произведено сравнение экспериментальных данных по температурам плавления и поверхностным натяжениям для чистых компонентов [4], с результатами, полученных для разных моделей. Также была оценена скорость диффузии атомов золота и кремния в расплаве для разных потенциалов и сопоставлена с оценками этой же величины, сделанных на основе расчетов на основе расчетов по теории функционала электронной плотности.

Было произведено МД-моделирование процессов, происходящих при формировании core-shell частицы. Было выяснено, что при контакте жидкого золота и кристаллического кремния наблюдается плавление кремния в приповерхностном слое и смешение компонентов в соотношении, соответствующем составу эвтектического сплава золото-кремний [5].

Дальнейшего перемешивания золота и кремния не происходит. При контакте жидкое золото – жидкий кремний через несколько пикосекунд расплав становится гомогенным. Также было проведено моделирование охлаждения системы жидкое золото - кристаллический кремний. Было показано, что при скоростях охлаждения больших 1К/пс расплав золото-кремний в приповерхностном слое переходит в аморфное состояние, а при меньших скоростях - расплав кристаллизуется.

## Литература

1. *Xu Z., Hou Y., Sun S.* Magnetic core/shell Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>/Au and Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>/Au/Ag nanoparticles with tunable plasmonic properties // *Journal of the American Chemical Society*. – 2007. – v. 129. – №. 28. – p. 8698-8699.
2. *Mohapatra S.* [et al.] Synthesis of gold-silicon core-shell nanoparticles with tunable localized surface plasmon resonance // *Applied Physics Letters*. – 2008. – v. 92. – №. 10. – p. 103105.
3. *Liu P.* [et al.] Fabrication of Si/Au core/shell nanoplasmonic structures with ultrasensitive surface-enhanced Raman scattering for monolayer molecule detection // *The Journal of Physical Chemistry C*. – 2015. – v. 119. – №. 2. – p. 1234-1246.
4. *Григорьев И.С.* Физические величины Справочник. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 1232 с.
5. *Wolffebuttel R.F.* Low-temperature intermediate Au-Si wafer bonding; eutectic or silicide bond // *Sensors and Actuators A: Physical*. – 1997. – v. 62. – №. 1. – p. 680-686.