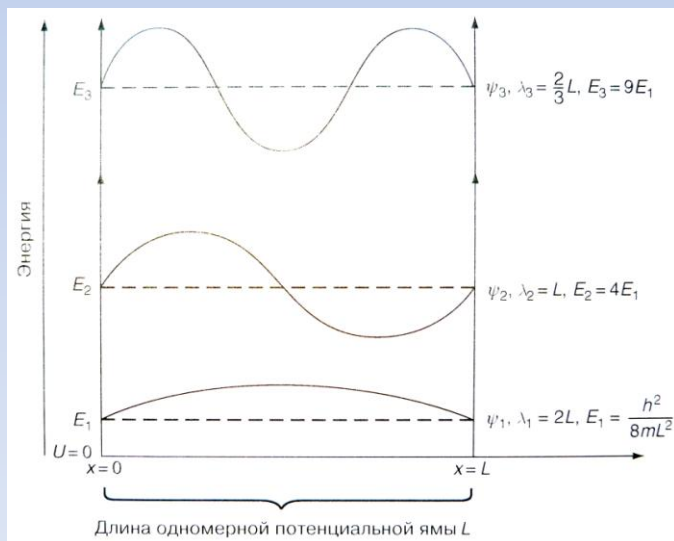


# 3. Физика наномира



- Размерное квантование
- Изменение структуры наночастиц
- Изменение энергии наночастиц
- Химические, механические, магнитные, оптические и электронные свойства наночастиц



# Размерное квантование

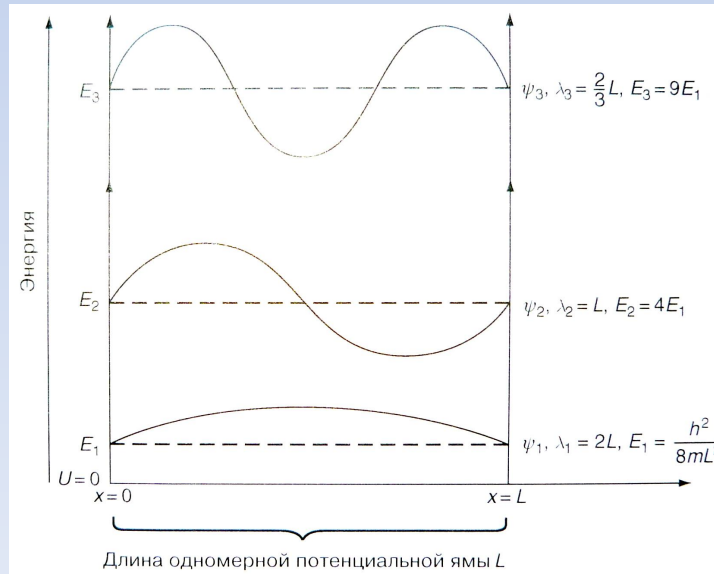


Длины стоячих волн:  $\lambda_n = \frac{2L}{n}$ , где  $n = 1, 2, 3, \dots$  - квантовое число состояния.

Волновые числа  $k_n = \frac{2\pi}{\lambda_n} = \frac{\pi}{L} n$ .

Волновые функции  $\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(k_n x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi}{L} n x\right)$ .

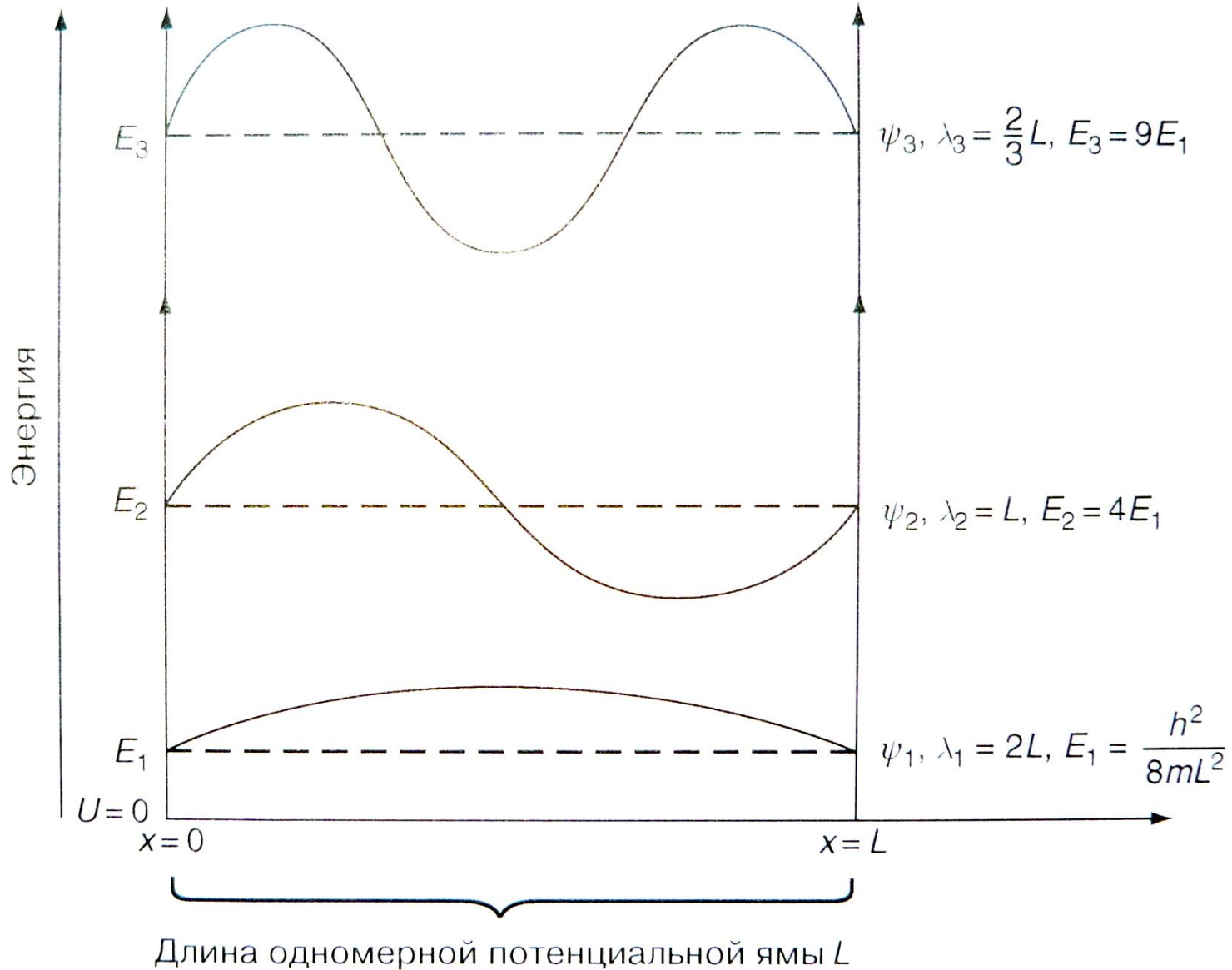
Уровни энергии  $E_n = \left(\frac{\pi}{L} n\right)^2 \frac{\hbar^2}{2m^*} \propto k_n^2 \propto n^2$ .



# Размерное квантование



$$E_n \propto 1/L^2$$



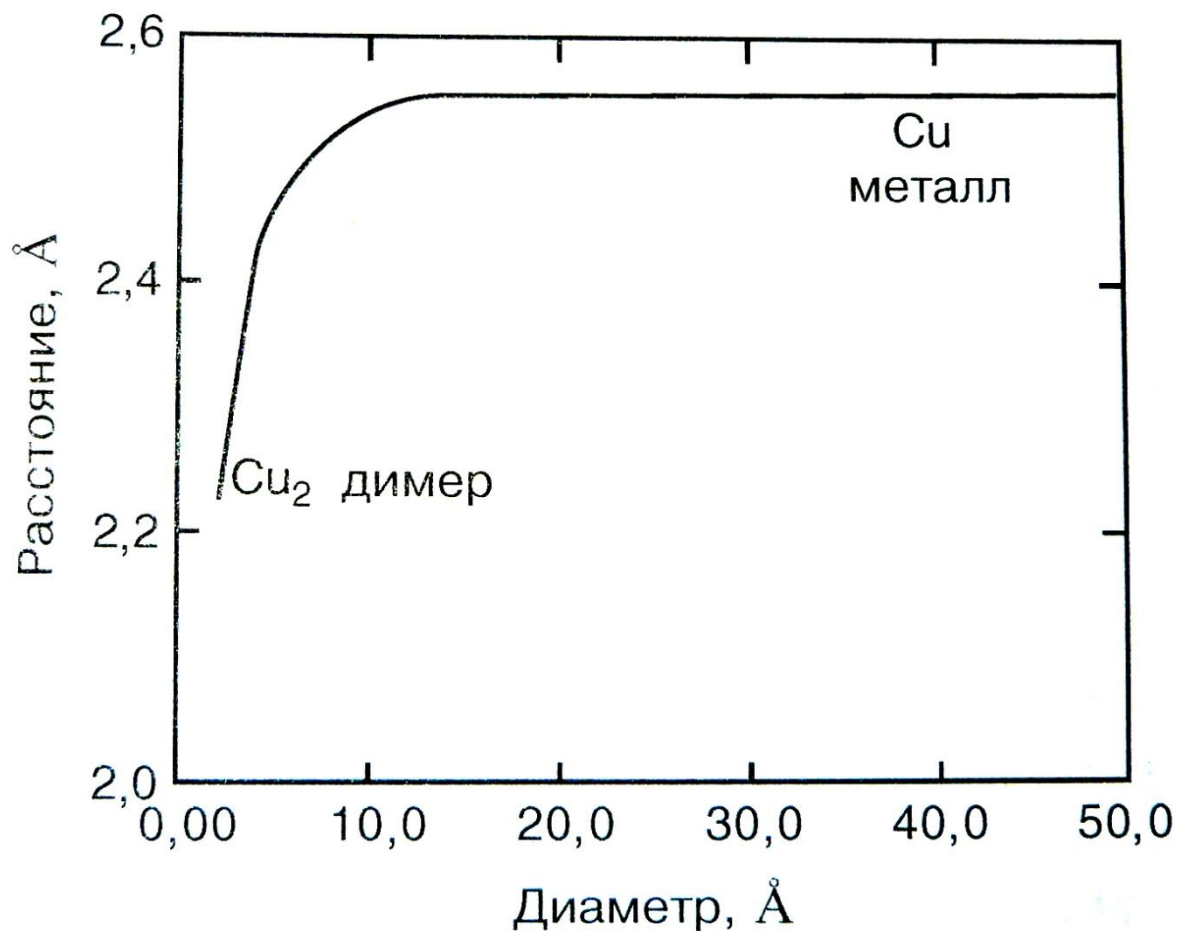
# Изменение структуры



## Изменение структуры наночастиц с уменьшением их размера:

- возрастание удельной площади поверхности и удельной поверхностной энергии;
- поджатие кристаллической решетки;
- изменение кристаллической структуры;
- исчезновение точечных дефектов;
- изменение закономерностей отжига дислокаций.

# Изменение структуры



**Изменение расстояния между атомами меди  
в зависимости от размера частицы**

# Изменение структуры



Число вакансий в кристалле, содержащем  $N$  узлов решетки,

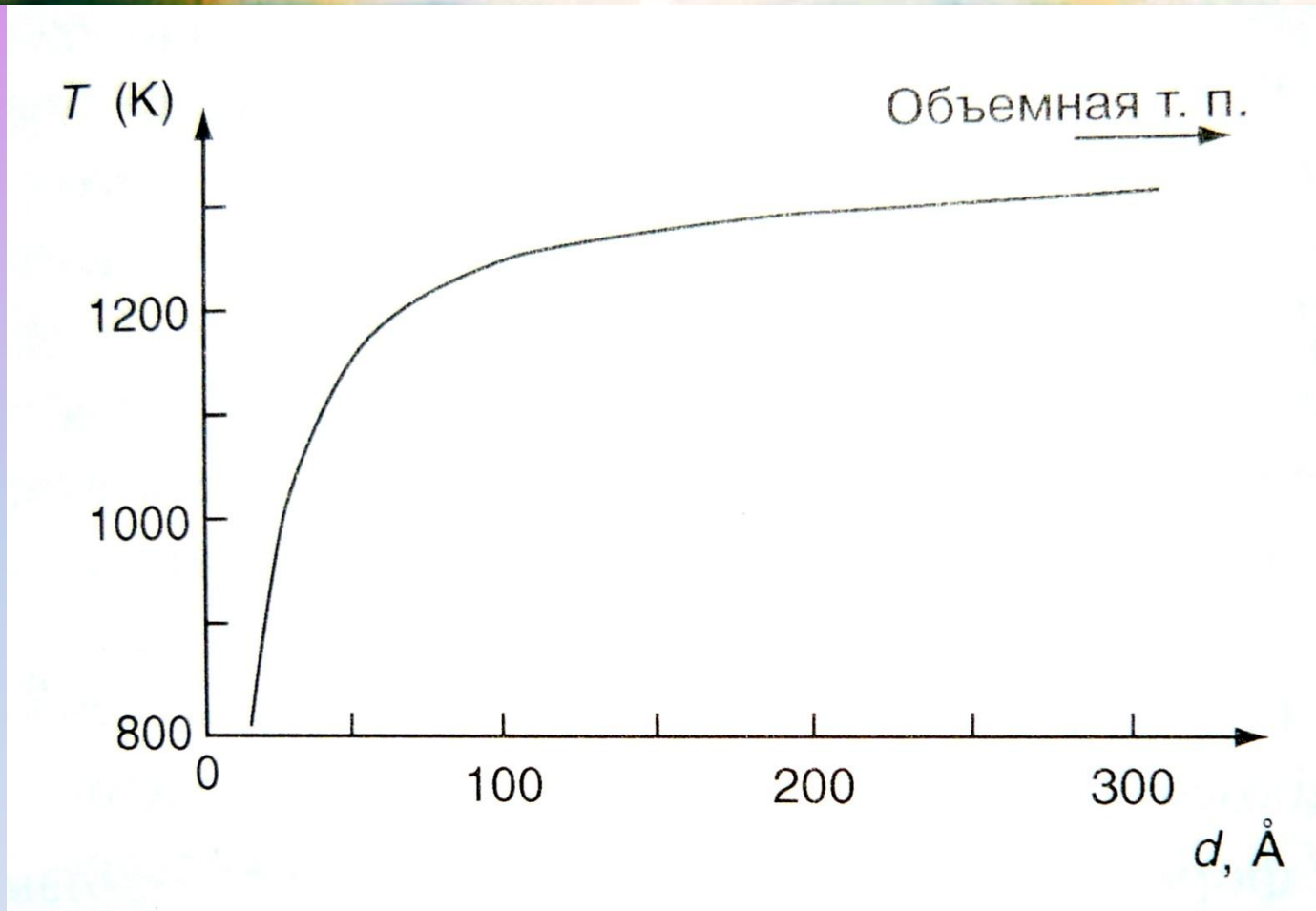
$$n_v = Ne^{-\frac{q}{kT}} = Ne^{-\frac{Q}{RT}},$$

где  $q$  – энергия образования одной вакансии, а  $Q = N_A \cdot q$  – моля вакансий.  $q \sim \sigma a^2$ , где  $\sigma \sim 1-3$  Дж/м<sup>2</sup> – поверхностная энергия, а  $a$  – размер кристаллической ячейки, приходящейся на один атом.

Если  $\sigma \sim 2,5$  Дж/м<sup>2</sup>, а  $a \approx 2,5 \cdot 10^{-10}$  м, то  $Q = N_A \cdot \sigma a^2 \sim 9 \cdot 10^4$  Дж/моль. Получается, что  $n_v/N \sim 2,4 \cdot 10^{-16}$  при  $T = 300$  К,  $\sim 6,5 \cdot 10^{-7}$  при  $T = 600$  К и  $\sim 5 \cdot 10^{-4}$  при  $T = 1000$  К.

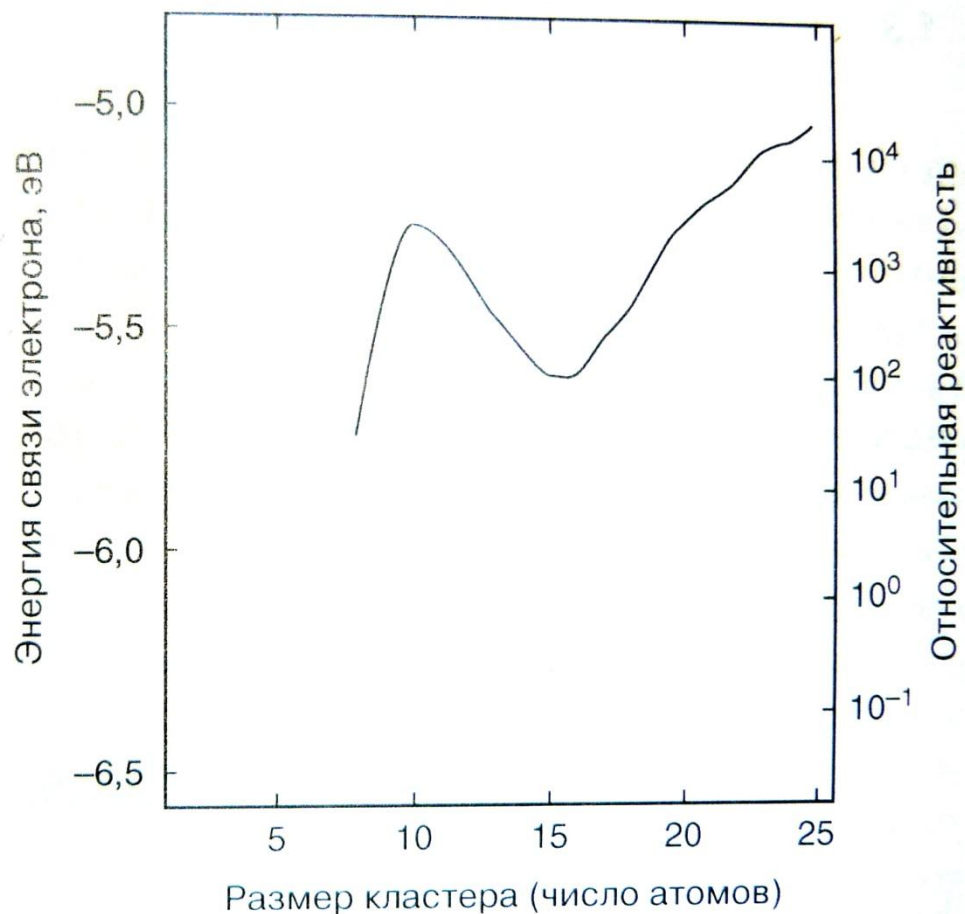
Рассмотрим частицу диаметром  $d = 50$  нм, имеющую постоянную решетки  $a \approx 0,25$  нм. Она будет содержать  $N \sim 8 \cdot 10^6$  атомов, а для равновесного числа вакансий в итоге получится

$$n_v \ll 1 \text{ при } 300 \text{ К и } n_v \sim 5 \text{ при } 600 \text{ К.}$$



**Изменение температуры плавления наночастиц золота в зависимости от их размера**

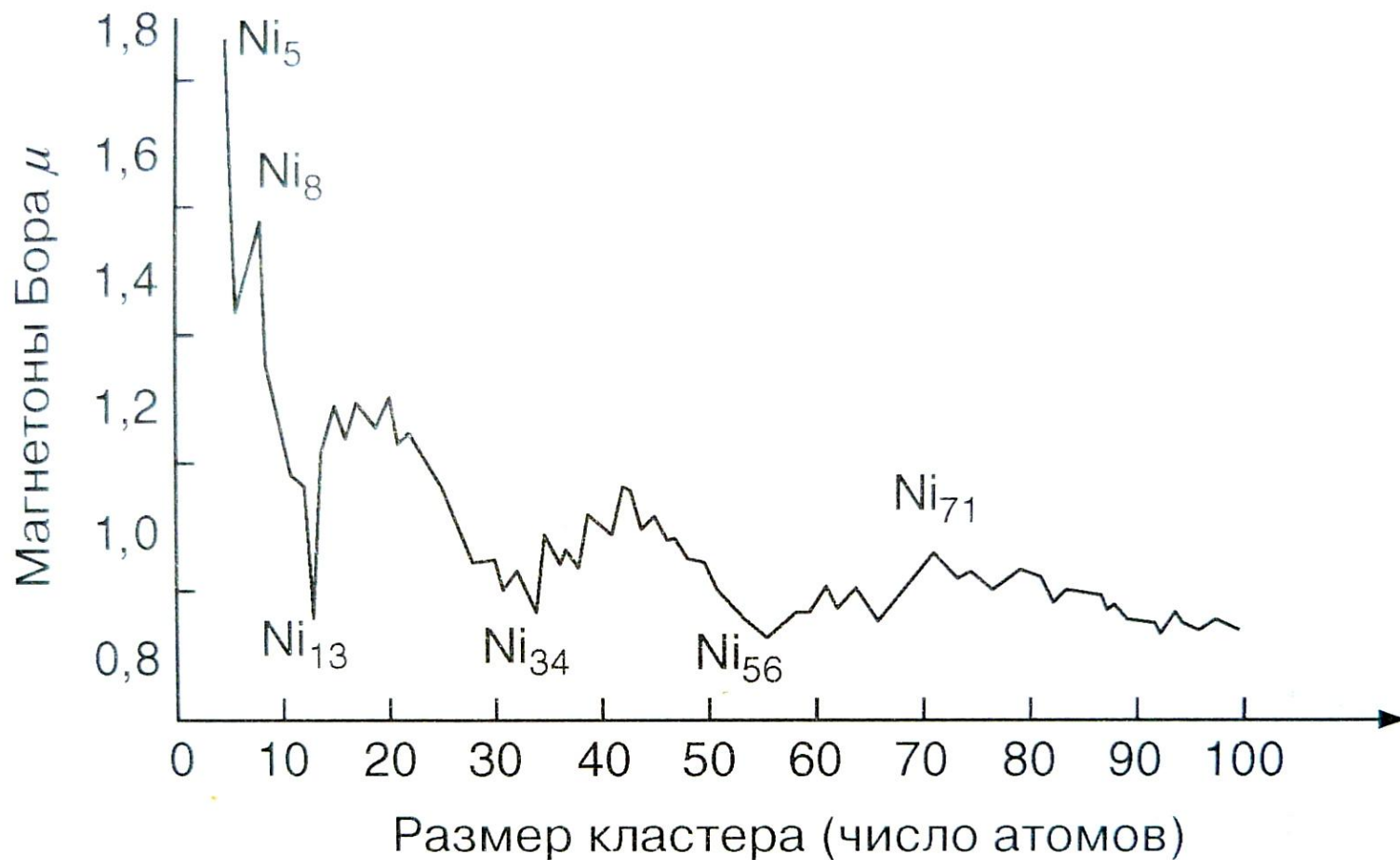
# Свойства наночастиц



**Энергия связи электрона и относительная реактивность кластеров железа по отношению к газообразному водороду**



# Свойства наночастиц



**Магнитный момент атома никеля в зависимости от размера кластера**



**Коллоидные растворы квантовых точек CdSe разного размера**



- 1. Какие значения может принимать волновое число электрона в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной  $L$ ?**
- 2. Как энергия электрона в бесконечно глубокой потенциальной яме зависит от квантового числа  $n$  и от ширины ямы  $L$ ?**
- 3. Объясните, сколько вакансий может быть в нанокристалле и почему?**