

Министерство образования Республики Беларусь
Учреждение образования
Белорусский государственный университет
информатики и радиоэлектроники

УДК 539.196.2

Скачкова
Вероника Андреевна

Квантово-механическое моделирование
свойств наноструктурированных материалов
для биосенсорных устройств

АВТОРЕФЕРАТ

на соискание степени магистра технических наук
по специальности 1-41 80 03 Нанотехнологии и наноматериалы (в электронике)

Научный руководитель
Стемпичкий Виктор Романович
кандидат технических наук, доцент

Минск 2015

КРАТКОЕ ВВЕДЕНИЕ

В современном мире объектами широких теоретических и экспериментальных исследований являются наноструктурированные материалы из-за своих привлекательных свойств и малых размеров. Одним из самых многообещающих магнитных материалов как для технологических, так и для биомедицинских применений являются наночастицы Co , так как кобальт имеет ферромагнитные свойства, т. е. обладает намагниченностью в отсутствие внешнего магнитного поля. Кроме того, изменяя размер, форму, структуру и поверхностную анизотропию наночастицы Co , можно получать различные магнитные свойства наночастицы.

Одним из важнейших перспективных применений наночастиц Co являются биосенсоры. Там они используются в качестве покрытия углеродных и стеклоуглеродных электродов, для улучшения их чувствительности. Кроме биосенсоров, наночастицы кобальта имеют ряд медицинских и биологических применений. Использование магнитных наноматериалов для целевой доставки лекарств (с применением градиента магнитного поля), для гипертермии (то есть нагревания наночастицами опухоли под действием переменного магнитного поля), в качестве контрастного материала в магниторезонансной томографии и др.

Наночастицы кобальта сами по себе являются токсичными для человеческого организма, поэтому для биомедицинских применений они требуют биосовместимых покрытий, которые наносят на окисленную частицу. Для технических применений, наоборот требуются наночастицы чистого кобальта, что тоже проблематично в связи с легкой окисляемостью наночастиц в воздушной среде.

Поэтому важно исследовать зависимость свойств наночастиц от степени их окисления для более глубокого понимания поведения наночастиц в условиях окружающей среды.

Одним из путей решения данных проблем является теоретическое исследование с помощью компьютерного моделирования. Такие исследования в последнее время получили широкое распространение, поскольку, при правильном построении модели, они дают возможность получать достоверные результаты с меньшими затратами по сравнению с проведением дорогостоящих экспериментов.

Работа проводилась в рамках стажировки в Институте теоретической физики и астрономии Вильнюсского университета, Вильнюс, Литва за счет Литовской государственной стипендии Фонда поддержки образовательных обменов, международного белорусско-литовского проекта «Исследование электронных свойств наноструктур с комплексами магнитоактивных

дефектов», финансируемого БРФФИ (Ф15ЛИТ-004), а также в рамках выполнения задания 1.29 «Усовершенствовать и внедрить технологию получения и применения пробиотика Бацинил-К для кормопроизводства» подпрограммы 1 «Биопрепараты и технологии для обеспечения продовольственной, энергетической, фармакологической независимости республики и охраны окружающей среды» ГНТП «Новые биотехнологии и биопрепараты для сельского хозяйства, промышленности, здравоохранения и защиты окружающей среды» («Промышленные биотехнологии»), 2011-2015 годы на тему «Разработать методы и программные средства оптимизации параметров технологического процесса получения пробиотика Бацинил-К для кормопроизводства».

Цель диссертационной работы заключается в исследовании влияния числа атомов кислорода, присоединенных к наночастице Co_{18} на стабильность частицы.

Для достижения поставленной цели в работе решались следующие задачи:

- Произвести серию расчетов геометрической структуры наночастиц $Co_{18}O_n$ ($n = 5, 6, \dots, 14$) с целью структур с минимальной энергии;
- На основе анализа полученных результатов исследовать зависимость энергии связи в расчете на один атом наночастицы $Co_{18}O_n$ ($n = 5, 6, \dots, 14$) от числа прикрепленных атомов кислорода n ;
- Сделать выводы о стабильности окисленной наночастицы $Co_{18}O_n$.

Объектом исследования выбрана наночастицы кобальта.

Предметом исследования является зависимость стабильности наночастицы от числа присоединенных атомов кислорода.

На защиту выносится следующее *положение*:

Результаты квантово-механического моделирования свойств наночастицы Co_{18} в базисах 6-31G и 6-311G показали, что увеличение числа присоединенных к наночастице Co_{18} , атомов кислорода от 5 до 14 приводит к росту энергии связи в расчете на один атом, что обуславливает повышение стабильности окисленной наночастицы. Наиболее стабильной по результатам анализа ширины зоны НОМО-LUMO является наноструктура $Co_{18}O_{13}$.

Результаты обобщенных исследований, докладывались и обсуждались на XXIII международной научно-практической конференции аспирантов, магистрантов и студентов «Физика конденсированного состояния», 58th Scientific Conference for Students of Physics and Natural Sciences: Open Readings 2015, Vilnius, Lithuania, а также опубликованы в виде соответствующих тезисов и материалов конференций. Результаты исследования свойств наночастиц кобальта, будут представлены на XVI международной конференции NDTCS'2015.

По материалам диссертации опубликовано и подготовлено к опубликованию 4 работ. Из них 1 статья в научном журнале, 2 статьи в сборниках материалов научных конференций, 1 тезис доклада.

Диссертационная работа состоит из титульного листа, содержания, введения, трех глав, заключения и списка использованных источников из 86 наименований. Полный объем диссертационной работы составляет 67 страницы, в том числе 5 таблиц – в объеме 1 страницы и 13 рисунков – в объеме 8 страниц.

Библиотека БГУИР

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

В **первой главе** проведен анализ физических и химических методов получения магнитных наночастиц, описаны свойства наночастиц кобальта, а также проведен анализ современного состояния компьютерного моделирования свойств магнитных наночастиц кобальта.

Вторая глава содержит в себе краткое описание сущности и основных уравнений методов компьютерного квантово-механического моделирования молекулярных систем, в частности метода Хартри-Фока и метода Кона-Шэма, а также описание основных функциональных возможностей программного комплекса GAUSSIAN 03, который использовался при выполнении исследований, представленных в диссертации.

В **третьей главе** представлены результаты моделирования наночастиц Co_{18}O_n ($n = 5, 6, \dots, 14$) с использованием базиса 6-31G, а также наночастиц Co_{18}O_m ($m = 1, 2, \dots, 10$) с использованием базиса 6-311G. Проведен анализ свойств наночастиц кобальта в зависимости от числа атомов кислорода, прикрепленных к поверхности наночастиц, в частности зависимость ширины зоны НОМО-LUMO и энергии связи, рассчитанной на один атом.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В магистерской диссертации описаны результаты исследования стабильности наночастиц кобальта, покрытых кислородом, выполненные с применением методов квантово-механического моделирования. Основные результаты проведенных исследований заключаются в следующем:

1. Окисление наночастиц Co_{18} при помещении в воздушную среду (открытый воздух) приводит к снижению магнитных свойств.

2. Посредством квантово-механического моделирования с использованием программного комплекса GAUSSIAN'03 проведены исследования по построению и моделированию геометрических структур наночастиц Co_n , покрытых разным числом атомов кислорода (от 5 до 14). После проведения глобальной геометрической оптимизации, полученные структуры показывают стремление к сферической форме наночастиц Co_{18}O_n при $n > 9$. В тоже время, при меньшем числе присоединенных атомов кислорода, исходная структура наночастицы Co_{18} изменяется незначительно.

3. Расчет энергии связи, приходящейся на один атом, показал, что она увеличивается при увеличении числа присоединенных атомов кислорода. Это означает, что стабильность наночастицы Co_{18}O_n увеличивается с ростом n .

4. Скорость роста энергии связи при увеличении числа присоединенных атомов кислорода уменьшается, что говорит о том, что наночастица постепенно насыщается кислородом.

5. В случае, когда дополнительный атом кислорода незначительно увеличивает энергию связи на атом, основная часть энергии этого атома используется для деформации структуры наночастицы Co_{18} .

6. Проведение исследований в двух различных базисах, 6-31G и 6-311G, показало, что более предпочтительным базисом для проведения дальнейших исследований является более специфичный базис 6-311G, с использованием которого были получены меньшие энергии и меньшие энергии связей. В то же время, поведение наночастиц Co_{18}O_n аналогично: энергия связи на атом увеличивается с увеличением числа атомов кислорода, присоединенных к наночастице; скорость роста энергии связи замедляется при увеличении числа присоединенных атомов кислорода.

Дальнейшие исследования предполагают изучение влияния окисления наночастицы Co_{18}O_n на ее магнитные и электронные свойства, а также определение поверхностных свойств наночастиц Co_{18} и Co_{22} .

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ АВТОРА

[1-А] Бурко, В. А. Исследование механизма взаимодействия бактерии *Bacillus subtilis* с поверхностью кремния посредством квантово-механических методов моделирования / В. А. Бурко, Я. В. Долгая, В. Р. Стемпицкий, В. В. Баркалин // Материалы междунар. науч.-технич. конф., приуроч. к 50-летию МРТИ-БГУИР, Минск, 18-19 марта 2014, г.: в 2 ч. / Бел. гос. ун-т инф-ки и радиоэл-ки; редкол А. Н. Осипов [и др.]. - Минск, 2014. - Ч. 2. - С.52-53.

[2-А] Burko, V. The quantum mechanical modeling of interaction between fragment of bacterial cell wall and silicon surface / V. Berko, Y. Douhaya, A. Berezhnaya // 57th Scientific Conference for Students of Physics and Natural Sciences: Open Readings 2014, Vilnius, Lithuania, March 19-21, 2014 / Students' Scientific Association, Faculty of Physics, Vilnius University. - Vilnius, 2014. - P. 210.

[3-А] Бурко, В. А. Исследование механизма взаимодействия бактерии *Bacillus subtilis* с поверхностью кремния посредством квантово-механических методов моделирования / Бурко В. А., Долгая Я. В. // Сборник тезисов и список участников XLVIII Школы ПИЯФ по физике конденсированного состояния «ФКС-2014», С.-Петербург, Россия, 10-15 марта 2014 г. / Перетбургский инст. ядерн. физики им. Б. П. Константинова. - Санкт-Петербург, 2014. - С. 167.

[4-А] Бурко, В. А. Квантово-механическое моделрование взаимодействия фрагмента клеточной стенки бактерии с поверхностью кремния / В. А. Бурко, Я. В. Долгая, А. В. Бережная // Материалы XXII международной научно-практической конференции аспирантов, магистрантов и студентов «Физика конденсированного состояния», Гродно, 17-18 апр. 2014 г. / Гр. гос. ун-т им. Я. Купалы; редкол. В. Г. Барсуков [и др.]. - Гродно, 2014. - С. 3-4.

[5-А] Бурко, В. А. Квантово-механическое моделирование механизмов взаимодействия фрагмента клеточной стенки бактерии с поверхностью кремния / В. А. Бурко, Я. В. Долгая, В. Р. Стемпицкий // Доклады БГУИР. - 2014. - №1(87). - С. 23-28.

[6-А] Скачкова, В. А. Магнитные свойства ZnO, легированного переходными металлами (Co, Fe, Ni, Cu) / В. А. Скачкова, М. С. Зеленина, О. А. Козлова // Матриалы XXIII международной научно-практической конференции аспирантов, магистрантов и студентов «Физика конденсированного состояния», Гродно, 16 апреля 2015 г. / Гр. гос. ун-т им. Я. Купалы; редкол. В. Г. Барсуков [и др.]. - Гродно, 2015. - С. 135-136.

[7-А] Zialenina, M. Magnetic properties of transition-metal-doped ZnO // M. Zialenina, V. Skachkova // 58th Scientific Conference for Students of Physics and Natural Sciences: Open Readings 2015, Vilnius, Lithuania, March 24-27, 2015 /

Students' Scientific Association, Faculty of Physics, Vilnius University. - Vilnius, 2015. - P. 224.

[8-A] Skachkova, V. Quantum mechanic investigations stability of the Co_{18}O_n ($n=1, 2, \dots, 10$) nanoparticles / V. Skachkova, J. Tamuliene, V. Stempitsky // 16th International Workshop on New Approaches to High-Tech: Nano-Design, Technology, Computer Simulations NDTCS-2015, September 22-25, 2015, Grodno, Belarus / (in print).

Бібліотека БГУМР