

Modellering af metal nanopartikler (Nano 4)

Når metal nanopartikler belyses vil spredning og absorption af lyset afhænge markant af partiklens materiale (guld, sølv, kobber, osv.), partiklens form (er den rund, aflang, pyramideformet...), hvor stor den er, og hvilke omgivelser partiklen befinder sig i (vand, glas, en halvleder ...). Det kan give sig udslag i at farven af en væske indeholdende nanopartikler afhænger af partiklernes materiale, form og størrelse.

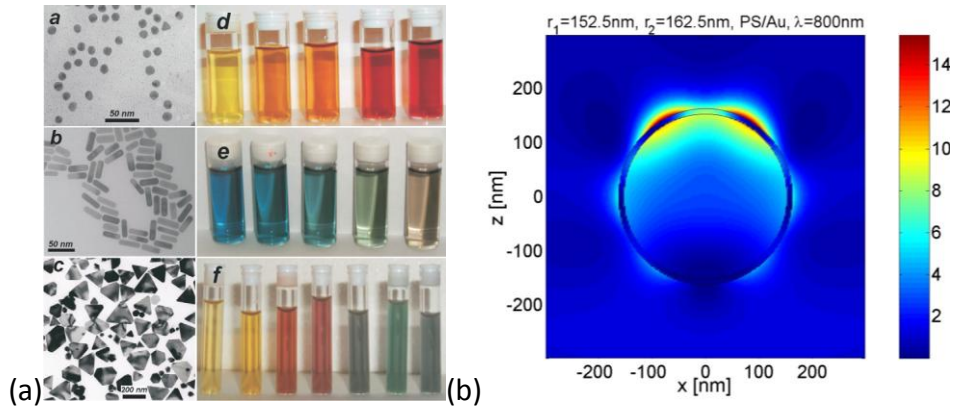


Fig. 1: (a) Figuren taget fra Ref. [1] viser eksempler på væsker med forskellig farve afhængig af form og størrelse af guldnanopartikler i væsken. (b) Beregning af elektrisk felt ved resonansbølglængden 800nm for en 305nm diameter polystyrenkugle dækket af et 10nm lag guld.

I projektet vil der være fokus på (semi-)analytisk og numerisk modellering af diverse metal partiklers optiske egenskaber.

Metoder der kan komme i betragtning:

- Kvasistatisk spredningsteori benyttes for små partikler (sammenlignet med bølglængden)
 - Analytisk beregning for kugler og ellipsoider
 - Numerisk løsning for mere generelle geometrier baseret på elektrisk potential teori
- Spredningsteori for større partikler (sammenlignelige i størrelse med bølglængden)
 - Runde partikler kan modelleres vha Mie spredningsteori (Løsning af vektoriel bølgligning via rækkeudvikling af feltet i sfæriske bølgetyper)
 - For mere generelle geometrier kan vi endvidere forsøge os med varianter af DDA-metoden (Diskret Dipol Approximation)

Alt efter interesser er det også muligt at forsøge at fremstille nanopartikler med skæve geometrier i stil med dem vist i Fig. 1 via kemisk udfældning af et metal i form af nanopartikler i en kemisk reaktion. Inspiration til metoder kan findes i f.eks [1,2]. Herefter kan partiklerne undersøges i et spektrometer og med mikroskop.

[1] Luis M. Liz-Marzán, "Nanometal: formation and color", materials today, 26-31, (Feb. 2004).

[2] X. Wang, J. Zhuang, Q. Peng, Y. Li, "A general strategy for nanocrystal synthesis", Nature **437**, 121-124 (2005).

Vejledere: Thomas Søndergaard, Peter Fojan