



Університети - партнери:

[Римський університет \(факультет математики\)](#)

[Університет м. Салермо \(факультет інформатики та математики\)](#)

[Університет м. Неаполя \(факультет інженерії\)](#)

[Болонський університет \(факультет математики\)](#)

[Університет м. Торонто](#)

[Університет м. Лісабон](#)

[Університет м. Барселона](#)

[Університет м. Нью-Йорк](#)

Протягом останніх років Фізико-Математичний факультет здійснює виконання спільних робіт з Лос Аламоською Національною лабораторією США (LANL). Ця лабораторія була заснована в 1943 році для здійснення Манхеттенського проекту по створенню атомної зброї.

Зараз у LANL ведуться фундаментальні дослідження з багатьох напрямків фізики з залученням вчених із різних країн світу.

Серія робіт, виконана за безпосередньої участі представника НТУУ "КПІ ім. Ігоря Сікорського" професора В. Горшкова, завершилась виданням книги "Magnetic resonance and microscope and a single spin measurement", World Scientific, 2006. Вона присвячена техніці реєстрації у твердому тілі окремих електронних спінів, що дає унікальний інструмент для досліджень у фізиці, хімії, біології та медицині.

Поширення початково когерентного лазерного пучка в турбулентній атмосфері. Зразок чисельного моделювання, що демонструє і фрагментацію, і блукання пучка (wandering).

Продуктивно здійснюється співпраця НТУУ "КПІ ім. Ігоря Сікорського" та LANL в області оптичних комунікацій, що здійснюються за допомогою лазерного променя

(проф. В. Горшков, аспірантка С. Тороус). Зв'язоку такого роду будуть притаманні висока комунікабельність, таємність та висока щільність інформації, що передається. Суттєвим фактором, який стримує реалізацію основних технічних рішень, є атмосфера, яка практично за будь-яких погодних умов є турбулентною. Навіть невеликі просторові варіації коефіцієнта заломлення приводять до викривлення лазерного пучка. В процесі поширення пучок фрагментується (розпадається на окремі промені) та відхиляється від початкового напрямку. Рівень прийнятого сигналу стає випадковим, що підвищує ймовірність помилок при декодуванні інформації. Дослідження, що проводяться на Фізико-Математичному факультеті, присвячені розвитку методів придушення флуктуацій сигналу детектора.

Широке застосування математичного моделювання при вивченні поширення у турбулентній атмосфері так званих частково-когерентних пучків (включаючи оптичні вихорі), дозволило домогтися зниження рівня флуктуацій сигналу в 20 разів. Такий показник є рекордним у світі на сьогоднішній день. Результати спільних робіт опубліковані в JOURNAL OF PHYSICS B: ATOMIC, MOLECULAR AND OPTICAL PHYSICS (2009), високо оцінені на щорічній конференції Photonics West-San Francisco-2009 та включені до переліку найвищих досягнень LANL у 2009 році.

One of the random phase distributions of the Phase Modulator (only the interval is shown);
b - The correlation function of the PM

а - Порівняння індексів сцинтиляцій когерентного гаусового пучка (криві 1, 2) та оптичного вихору (криві 1', 2'). В обох варіантах , усереднення проведено по 2500



станам атмосфери. b - Функція розподілу ймовірності для оптичного вихору. На стадії утвердження перебуває договір щодо співпраці на наступні три роки –

Memorandum of Understanding Between Los Alamos National Laboratory and National Technical University of Ukraine "KPI".

Припускається виконання спільних робіт в області

- Theory and modeling of propagation of light through the turbulent atmosphere;
- Theory and modeling of sensors and imagers;
- Modeling the dynamics of quantum systems interacting with the environment;

- Modeling of electromagnetic radiation scattering and absorption by NSS;
- Study of surface-enhanced Raman scattering (SERS) and fluorescence of molecules adsorbed on the NSS interfaces and on micro-resonators;
- Modeling of controlled growth of nano-particles.

Будинок (Лос Аламос, США), де мешкали відкривач нейтрино Д. Чедвік та батько плутонієвої хімії Richard Baker.



Центр провідних технологій у матеріалознавстві (Clarkson University, NY)

Протягом останніх трьох років ведеться активна співпраця, закріплена відповідною угодою, з Центром передових технологій у матеріалознавстві (Clarkson University, NY).

Роботи присвячені фізиці наносистем. Відомо, що властивості однієї і тієї ж речовини, що вміщена у частинці з розмірами до 100-200nm, суттєво відрізняються від фізичних та хімічних властивостей частинок мікронних (та вище) масштабів. Наночастинки знаходять найширше застосування у медицині, мікроелектроніці та навіть у сільському господарстві. Методика одержання наночастинок повинна забезпечити їх монодисперсність (однаковість розмірів) і контрольованість форми, від якої сильно залежать фізико-хімічні властивості частинок. Часто, в залежності від режимів утворення, форма частинок різна при одній і тій же вихідній речовині.

Форма наночастиць заліза, отримана в роботі - Wang, CM, DR Baer, JE Amonette, MH Engelhard, Y Qiang, and J Antony. 2007. "Morphology and oxide shell structure of iron nanoparticles grown by sputter-gas-aggregation." *Nanotechnology* 18:255603

Саме теорії управління формою наночастинок в процесі росту присвячені роботи фізиків НТУУ "КПІ" та Clarkson University. Зокрема показано, що правильні форми наночастинок у вигляді многогранників часто є результатом суттєво нерівноважних режимів дифузійного росту, якими можна керувати, змінюючи температуру системи та концентрацію вільних атомів (молекул) у ній.



Результати робіт, що потрапили на обкладинки журналів, Impact Factors яких, відповідно, 4.835, 4.034, 4.034, 3.122. шапки статей в них та шапка статті в Nature Communications.

Теоретичні рекомендації підтверджені реальними експериментами. Нижче представлені фрагменти однієї з останніх публікацій (2009). Чисельне моделювання здійснено за допомогою унікального алгоритму (В. Горшков, А. Завалов) , що дозволяє досить точно описувати динаміку систем із декількох мільйонів вільних атомів (молекул) і динаміку поверхневих атомів (молекул) наночастинок, що ростуть.

Встановлені закономірності в механізмах формування наночастинок викликали великий інтерес у колі спеціалістів, а сама стаття стала предметом уваги на багатьох сайтах, починаючи від сайту космічного агентства NASA та закінчуючи медичними сайтами.

Сторінка на AZoNano.com наведена нижче::

AZO NANO ACS Journal Features "Modeling of Growth Morphology of Core-Shell Nanoparticles"

Published on December 3, 2014 at 4:15 AM

An article co-authored by Clarkson University Professor of Physics Vladimir Privman and Professor Vyacheslav Gorshkov recently made the front page of a **leading journal of the American Chemical Society.**



The article, "Modeling of Growth Morphology of Core-Shell Nanoparticles," was featured on the cover of American Chemical Society's Journal of Physical Chemistry C, in volume 118, issue 43, and appears on pages 24,959 to 24,966.

Journal of Physical Chemistry C publishes studies on energy conversion and storage; energy and charge transport; surfaces, interfaces, porous materials and catalysts; plasmonics, optical materials and hard matter; physical processes and nanomaterials and nanostructures.

In the article, the kinetic Monte Carlo modeling approach, which uses repeated random samplings to obtain results, is shown to reproduce smooth-shell and cluster-structured shell growth morphologies identified in recent experiments on core-shell noble-metal nanoparticle synthesis, including the formation of smooth epitaxially grown shells of use in catalysis.

The researchers identify not only growth regimes that yield smooth shells, but also those that lead to the formation of shells made of small clusters. This developed modeling approach allows for them to qualitatively study the effects of temperature and supply the shell-metal atoms on the resulting shell morphology when grown on a presynthesized nanocrystal core.

Privman said the best material for catalysis is platinum, but platinum is expensive. This research explores theoretic modeling to develop a systematic approach to grow smooth shells on cores from materials that are cheaper and whose catalytic performance is more effective.

"There is always an issue of efficiency or cost, especially when you make very small particles for catalysis," V. Privman said.

Clarkson's collaboration with the National Technical University of Ukraine gives this work an international dimension. With the article featured on the cover of the journal, both universities gain more exposure for their research. It gives us visibility at Clarkson University and National Technical University of Ukraine, not only domestically but also internationally.