
Локальная атомная структура наночастиц золота в силикатных стеклах по данным EXAFS и DFT моделирования

*В.В. Срабионян, С.Ю.Каптелинин, А.В. Скиданенко, В.А.Дурыманов,
Г.Б.Сухарина*

Южный федеральный университет, Россия

Аннотация:Золотые наночастицы в стеклянных матрицах представляют большой интерес, так как обладают многообещающими оптическими свойствами, обусловленными наличием поверхностного плазмонного резонанса. В работе представлены результаты исследования влияния термической обработки на локальную структуру наночастиц золота в стеклянной матрице на основе теории функционала плотности и спектроскопии рентгеновского поглощения.

Ключевые слова:наночастицы золота, EXAFS, DFT, термическая обработка, стеклянная матрица, дефекты в наночастице, локальная атомная структура.

Введение

В предыдущей работе было показано, что ионы металлов, находящихся в стекле, в частности, ионы серебра способны к взаимодействию с наночастицами золота [1]. В связи с более высокой подвижностью ионов Sn в приповерхностном слое стекла мы должны учитывать вклад, вносимый ими в спектры протяженной области рентгеновского поглощения (далее - EXAFS). Более того, поскольку ионы олова обладают меньшей химической активностью по сравнению с ионами других легких металлов, присутствующих в стеклянной матрице, им легче проникать в толщу золотых наночастиц, что увеличивает их вклад в EXAFS спектры.

Основной целью данного исследования является определение влияния термообработки при температуре 300° С на структуру наночастиц в силикатных стеклах, в частности определение наиболее вероятной модели локальной атомной структуры золотых наночастиц, посредством EXAFS анализа [2, 3] экспериментальных спектров и DFT моделирования.

Результаты и обсуждение

Анализ данных, полученных из измерений EXAFS

В данной работе на основе EXAFS анализа L_3 -края золота была исследована структура золотых наночастиц в силикатных стеклах до и после термообработки. На рис.1 представлено сопоставление $|F(R)|$ экспериментальных L_3 Au EXAFS спектров золотой фольги (рис.1 -а) и образцов стекла после 10 лазерных импульсов с различной толщиной начального золотого слоя на поверхности до и после термообработки: Au-6 нм и Au-6 нм /Т (Рисунок 1а), Au-10 нм и Au-10 нм /Т (Рисунок 1б), Au-70 нм и Au-70 нм /Т (Рисунок 1с). Наблюдаются существенные различия соотношения величин $|F(R)|$ двух основных пиков А и В экспериментальных спектров между образцами Au-6 нм (А:В=1.79) и Au-6 нм /Т (А:В=1.47), Au-10 нм (А:В=1.72) и Au-10 нм /Т (А:В=1.59). В то же время, различия соотношения величин $|F(R)|$ между образцами Au-70 нм и Au-70 нм /Т (Рисунок 1с) незначительны (А:В=1.55), что сопоставимо со значением для фольги золота. Интерпретация рассматриваемых изменений в поведении $|F(R)|$ для образцов до и после термообработки с разной толщиной золота на поверхности стекла была выполнена посредством обработки EXAFS спектров L_3 -краев золота в соответствующих образцах. Осциллирующие части $\chi(k)$ экспериментальных спектров EXAFS (k -волновое число фотоэлектронов) были обработаны с использованием оригинальной методики, позволяющей уменьшить влияние корреляции между подгоночными параметрами на полученную структурную информацию [4, 5]. Таким образом, применяемый подход позволяет определить долю (С) атомов во внутренней (обычно структурно упорядоченной) области средней монометаллической наночастицы, а также получить средние значения структурных параметров, характеризующих поверхностную область.

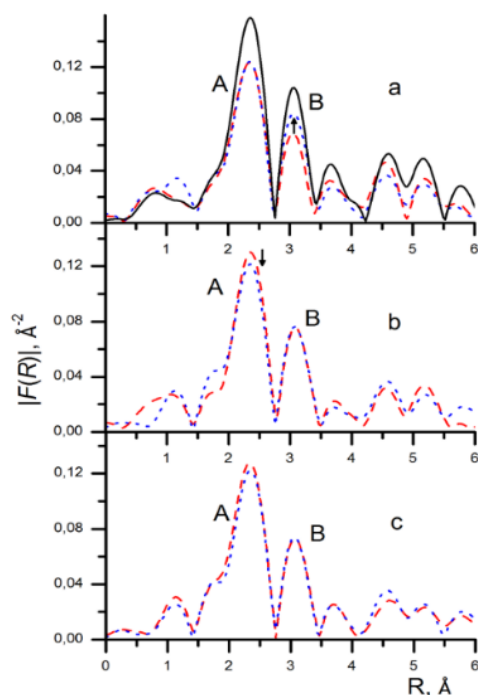


Рис.1. – Величины $|F(R)|$, $\chi(k)$, полученные на интервале Δk : $k_{min}=3.0 \text{ \AA}^{-1}$ и $k_{max}=9.5 \text{ \AA}^{-1}$ для экспериментального EXAFS спектра L_3 -края золота в золотой фольге (черная сплошная кривая) – рис (а), в образцах стекла до (красная пунктирная кривая) и после термообработки (синяя пунктирная кривая). (а) – пленка золота толщиной 6 нм, (б)-пленка золота толщиной 10нм, (с)- пленка золота толщиной 70 нм.

Для каждого из исследуемых образцов экспериментальный EXAFS сигнал усредняется по всем неэквивалентным позициям атомов золота. Одна из самых простых предлагаемых моделей наночастиц учитывает два возможных положения поглощающего атома золота [6]: Au(1)- атомы внутренней области наночастицы; Au(2) – атомы приповерхностной области, которая обычно содержит искажения решетки, дефекты и примеси. Справедливость этой модели подтверждается данными представленными на рис.1, где воспроизведены все пики $|F(R)|$ для исследуемых образцов (рис 1, а-с), которые по положению соответствуют пикам $|F(R)|$ золотой фольги для расширенного R - диапазона (до 5.5 \AA), но с меньшими значениями амплитуды. Это указывает на наличие ГЦК структуры для части атомов золота, которые расположены в упорядоченной области ядра наночастиц. Далее мы будем их обозначать как Au(1), согласно работе [6]

осциллирующая часть $\chi(k)$ EXAFS спектров L_3 -краев золота в исследуемых образцах имеет вид:

$$\chi_{model}(k) = C\chi_{Au(1)}(k) + (1 - C)\chi_{Au(2)}(k), \quad (1)$$

где C -доля атомов Au(1), а $\chi_{Au(2)}(k)$ -вклад атомов золота приповерхностной области наночастицы, которые обозначается как Au(2). Чтобы уменьшить число подгоночных параметров и корреляции между ними, но в тоже время обеспечить достоверность полученных структурных данных, вклад $\chi_{Au(1)}(k)$, согласно работе [4], был учтен как:

$$\chi_{Au(1)}(k) = \chi_{Au-foil}^{experiment}(k) \cdot \exp(-2 \cdot \Delta\sigma_{Au(1)}^2 k^2),$$

где функция $\chi_{Au-foil}^{experiment}(k)$ получена из экспериментального EXAFS спектра L_3 -края Au в золотой фольге и, следовательно, включает точный вклад от первой и последующих сфер окружения атомов Au(1). Множитель $\exp(-2\Delta\sigma_{Au(1)}^2 k^2)$, учитывает различия в структурном упорядочении координационных сфер атома золота в наночастицеи золотой фольге. Таким образом, мы используем всего два подгоночных параметра для описания $F(R)$: параметры S_i и $\Delta\sigma_{Au(1)}^2$. Для учета вклада от атомов приповерхностного слоя в приближении однократногорассеяния фотоэлектрона на ближайших атомах окружения согласно [4] в формуле(1)присутствуетслагаемое $\chi_{Au(2)}(k)$. Для атомов Au(2), множитель $S_0^2(Au - Au)$, учитывающий эффекты многоэлектронного возбуждения и возбуждения всей системы атомов, которые не учитываются в исходной моделиодночастичного приближения, принимался равным значению, характерному для золотой фольги 0.89. Фурье анализ на основе выражения (1) в диапазоне 1.4-3.5 Å для локальных структур золота в наночастицах воспроизводит все особенности экспериментального $|F(R)|$ в расширенном диапазоне(до 5.5 Å), для исходного образца и образца после термообработки.

Для наночастиц золота в образце Au-70 нм были получены следующие значения для параметров Дебая-Валлера и доли атомов в ядре: $\Delta\sigma_{Au(1)}^2 = 0.0003 \text{ \AA}^2$ и $C = 48 \%$ и практически не меняются после термообработки. В тоже время подобная процедура подгонки, основанная на выражении (1), не позволила описать различия в величинах пиков А и В $|F(R)|$ между образцами до и после термообработки в серии образцов Au-6 нм и Au-10 нм. Это указывает на наличие более сложной структуры и состава приповерхностной области золотых наночастиц, которые зависят от начальной толщины золотой пленки и термообработки образцов. Следовательно, подходящая структурная модель для оболочки золотых наночастиц должна включать возможные внедренные атомы других металлов стеклянной матрицы, которые расположены на поверхности частицы и связаны с атомами кислорода. Для предлагаемой модели мы использовали результаты работы [6], в которой говорится, что золотые наночастицы формируются в приповерхностной области стекла (<30 нм), где концентрация атомов олова наиболее высока. Кроме того, имеются результаты STEM-EDX анализа для исходных образцов Au-70 нм [7], которые показывают, что наночастицы золота в силикатном стекле окружены ионами Na и Mg, которые обладают высокой способностью к окислению. Следовательно, эти ионы вместе с оловом могут быть включены в подгоночную модель как ближайшее окружение поглощающего атома золота Au(2). Мы можем учесть соответствующие межатомные взаимодействия в качестве отдельных членов во втором слагаемом $\chi_{Au(2)}(k)$ выражения (1). Однако, подгонка, основанная на таком расширенном выражении для второго слагаемого $\chi_{Au(2)}(k)$, требует большего числа варьируемых параметров, что значительно превышает максимально возможное количество структурных параметров [8]. Поэтому в работе использовались приближения, которые позволяют уменьшить

количество членов в слагаемом $\chi_{Au(2)}(k)$ выражения (1) и, как следствие, уменьшить количество подгоночных параметров:

-проникновение атомов Sn в приповерхностную область наночастиц золота более вероятно по сравнению с атомами Na, Mg, поскольку они обладают более высокой способностью к окислению[9]. Следовательно, в приповерхностной области частиц золота в ближнем окружении некоторых из поглощающих атомов Au(2) присутствуют атомы Sn, а также возможно атомы Mg и Na, однако, наиболее вероятно, что атомы Mg и Na расположены на поверхности частицы и окружены атомами кислорода. В таком случае взаимодействие атомов благородного металла поверхности частицы с окружающими атомами кислорода стеклянной матрицы незначительно. Поскольку фазы и амплитуды обратного рассеяния, вычисленные для атомных пар Au-Mg и Au-Na, являются близкими друг другу, выделить различия вкладов от связей Au-Mg и Au-Na из экспериментальных AuL₃EXAFS спектров довольно сложно. Кроме того, согласно целям нашего исследования, в этом не было необходимости, поэтому эти вклады были объединены в рамках одного сигнала и одного слагаемого, обозначенного как $\chi_{Au(2)-Mg,Na}(k)$, амплитуды обратного рассеяния для подгонки были взяты для атомов Mg. Согласно этому приближению второе слагаемое $\chi_{Au(2)}(k)$ в выражение (1) представлено как:

$$\chi_{Au(2)}(k) = N_1\chi_{Au(2)-Au(2)}(k) + N_2\chi_{Au(2)-Sn}(k) + N_3\chi_{Au(2)-Mg,Na}(k), \quad (2)$$

где $\chi_{Au(2)-Au(2)}(k)$, $\chi_{Au(2)-Sn}(k)$, $\chi_{Au(2)-Mg,Na}(k)$ – вклады от атомных пар Au(2)-Au(2), Au(2)-Sn, Au(2)-Mg,Na, а N_1, N_2, N_3 – соответствующие координационные числа.

На рисунке 2 представлена лучшая подгонка для образцов Au-бнм и Au- бнм/Г, полученная для модели локальной структуры Au согласно выражению (1), с вкладом $\chi_{Au(2)}(k)$ определяемым выражением (2).

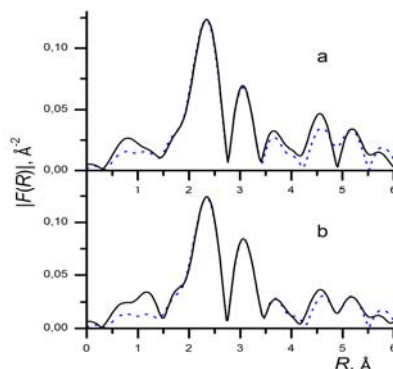


Рис. 2.–Сравнение значений $|F(R)|$ экспериментальных EXAFS L_3 -края Au (сплошная черная кривая) в исходном образце Au-6нм (a) и в образце после термообработки Au-6нм/T (b) с теоретическими функциями, полученными подгонкой, основанной на выражениях (1), (2) для $\chi(k)$ (пунктирная синяя кривая).

Как видно из рисунка 2, для предполагаемой модели локальной структуры Au особенности экспериментальных $|F(R)|$ функций воспроизведены для расширенного R-интервала (до ~ 5.5 Å). Значения структурных параметров для образцов Au-6нм и Au-10нм представлены в таблицах 1 и 2, соответственно.

Таблица №1.

Параметры локальной структуры атомов Au в золотых наночастицах для образцов Au-6нм до и после термообработки, полученные из экспериментальных спектров EXAFS L_3 -края Au в результате подгонки, основанной на выражениях (1) и (2).

| Образец Au-6 нм | | | | | | | | | | |
|-----------------------------|------------------------------|----------------|-------|------------------------|----------|-------|------------------------|-------------|-------|------------------------|
| Ядро AuNP: Au(1) - атомы | | Оболочка Au NP | | | | | | | | |
| | | Au(2)-Au(2) | | | Au(2)-Sn | | | Au(2)-Mg,Na | | |
| C | $\Delta\sigma^2, \text{Å}^2$ | R, Å | N_1 | $\sigma^2, \text{Å}^2$ | R, Å | N_2 | $\sigma^2, \text{Å}^2$ | R, Å | N_3 | $\sigma^2, \text{Å}^2$ |
| 0.69 | 0.0004 | 2.78 | 7.9 | 0.0086 | 3.11 | 1.5 | 0.0086 | 3.32 | 0.6 | 0.0089 |
| Образец Au-6 нм/T | | | | | | | | | | |
| Ядро AuNP: Au(1) - атомы | | Оболочка Au NP | | | | | | | | |
| | | Au(2)-Au(2) | | | Au(2)-Sn | | | Au(2)-Mg,Na | | |
| C | $\Delta\sigma^2, \text{Å}^2$ | R, Å | N_1 | $\sigma^2, \text{Å}^2$ | R, Å | N_2 | $\sigma^2, \text{Å}^2$ | R, Å | N_3 | $\sigma^2, \text{Å}^2$ |
| 0.58 | 0.0003 | 2.83 | 10.0 | 0.0113 | 2.95 | 0.9 | 0.0113 | 3.54 | 0.4 | 0.011 |

Таблица №2.

Параметры локальной структуры атомов Au в золотых наночастицах для образцов Au-10нм до и после термообработки, полученные из экспериментальных спектров EXAFS L_3 -края Au в результате подгонки, основанной на выражениях (1) и (2).

| Образец Au-10нм | | | | | | | | | | |
|-----------------------------|------------------------------|----------------|-------|------------------------|----------|-------|------------------------|-------------|-------|------------------------|
| Ядро AuNP: Au(1) - атомы | | Оболочка Au NP | | | | | | | | |
| | | Au(2)-Au(2) | | | Au(2)-Sn | | | Au(2)-Mg,Na | | |
| C | $\Delta\sigma^2, \text{Å}^2$ | R, Å | N_1 | $\sigma^2, \text{Å}^2$ | R, Å | N_2 | $\sigma^2, \text{Å}^2$ | R, Å | N_3 | $\sigma^2, \text{Å}^2$ |
| 0.69 | 0.0004 | 2.85 | 6.5 | 0.0051 | 3.12 | 1.1 | 0.0055 | 3.31 | 0.4 | 0.0112 |
| Образец Au-10нм/Т | | | | | | | | | | |
| Ядро AuNP: Au(1) - атомы | | Оболочка Au NP | | | | | | | | |
| | | Au(2)-Au(2) | | | Au(2)-Sn | | | Au(2)-Mg,Na | | |
| C | $\Delta\sigma^2, \text{Å}^2$ | R, Å | N_1 | $\sigma^2, \text{Å}^2$ | R, Å | N_2 | $\sigma^2, \text{Å}^2$ | R, Å | N_3 | $\sigma^2, \text{Å}^2$ |
| 0.62 | 0.0002 | 2.87 | 6.9 | 0.0065 | 2.91 | 0.7 | 0.0065 | 3.35 | 0.2 | 0.0095 |

Структурные параметры, представленные в таблицах 1 и 2, -это количественные оценки имеющихся связей Au(2)-Sn и Au(2)-Mg,Na в приповерхностной области золотых наночастиц в образцах Au-6нм и Au-10нм до и после термообработки. EXAFS обработка L_3 -края Au в образцах Au-70нм и Au-70нм/Т дает лучшую подгонку согласно выражению (1) без использования вкладов Au-Sn и Au-Mg,Na, и позволяет получать значения структурных параметров, которые согласуются с полученными в работе [6]. С увеличением размера наночастицы доля атомов ядра C возрастает [5]. Таким образом, согласно результатам EXAFS, представленным в таблицах 1,2, средний размер наночастиц уменьшается после термообработки.

Выявленные различия в количестве связей для атома Au(2) со своими ближайшими соседями- это различия в количестве слагаемых в выражении (2), которые вносят вклад в EXAFS спектр L_3 -края Au в образцах Au-6нм, Au-10нм по сравнению с Au-70нм. Это позволяет сделать вывод о составе и структуре полученных золотых наночастиц приповерхностной области, а также их размере, зависящем не только от термообработки, но и от толщины

исходной золотой пленки, нанесенной на поверхность стекла до лазерного излучения.

Наблюдаемые различия наночастиц золота после длительной термообработки в образцах Au-6нм/Т, Au-10нм/Т, и Au-70нм/Т обусловлены следующими причинами:

- Присутствие атомов Sn в оболочке золотых наночастиц в образцах Au-6нм, Au-10нм приводит к меньшей стабильности её поверхности в процессе термообработки, и, как следствие, к разрушению поверхности частицы (параметры $S_i N_{2,3}$ меньше в образцах после термообработки, Табл. 1,2). Следовательно, размер наночастиц золота становится меньше.

- в образце Au-70нм наличие на поверхности золотых частиц покрытия из оксидированного олова, магния и натрия предотвращает их разрушение в процессе термообработки, и поэтому размер этих частиц существенно не отличается от образца Au-70нм/Т.

Процессы разрушения наночастиц в образцах Au-6нм и Au-10нм в процессе термообработки отличаются и имеют свои особенности. Это важно, поскольку растворенные атомы золота вносят свой вклад в функцию $\chi_{Au(2)}(k)$. Как показано в таблице 1, атомы Sn в наночастицах образца Au-6нм частично покидают растворенную оболочку (N_2 уменьшается), а частично остаются на поверхности (присутствует вклад Au-Sn), защищая наночастицу от окисления и дальнейшего растворения. Поскольку параметр N_1 увеличивается в процессе термообработки, мы можем сделать вывод, что атомы олова покидают поверхность наночастицы, а оставшиеся в оболочке атомы золота дают значительный вклад в $\chi_{Au(2)}(k)$ после термообработки относительно вклада растворенных атомов золота (N_1 достаточно большой). В случае наночастиц в образце Au-10нм параметр N_1 практически не изменяется (таблица 2), несмотря на то что в процессе выхода атомов олова с поверхности наночастицы параметр N_1 должен

увеличиваться. Логично предположить, что растворенные атомы золота в процессе термообработки образца Au-10нм дают значительный вклад в функцию $\chi_{Au(2)}(k)$. Эти атомы вновь объединяются в более малые кластеры. Именно эти различия в поведении наночастиц в образцах объясняют различия в соотношениях А:В в серии образцов 6нм и 10нм до и после термообработки. В добавок к вышеописанному механизму для формирования наночастиц, есть причина более высокой стойкости к термообработке более мелких наночастиц. За счет сил поверхностного натяжения устойчивость формы частиц увеличивается с уменьшением размера. Кроме того, наночастицы, как и твердые тела, при нагреве испускают электромагнитное излучение, нагревая окружающую среду. Поскольку для наночастиц характерна большая удельная поверхность и, как следствие, эффект самопоглощения электромагнитного излучения слабо выражен, то поток энергии, получаемой наночастицей из среды, сопоставим с потоком энергии, отдаваемой наночастицей в среду за счёт излучения. Это значит, что наночастицы всегда холоднее чем окружающая среда, и для малых наночастиц этот эффект, возможно, более явно выражен [10]. В работе [10] авторы показали, что присутствие наночастиц золота увеличивает интенсивность температурного излучения в области $\lambda \sim 1$ мкм, и для наночастиц размером 50 нм усиливающий коэффициент оказывается больше, чем для наночастиц размером 100 нм. Однако это предположение и кинетика образования частиц выходит за рамки данного исследования и требует детального изучения.

DFT моделирование

На основе EXAFS анализа были получены усредненные по образцу парные расстояния Sn-Au, что не позволяет однозначно определить расположение атомов олова в золотой наночастице.

Для верификации результатов, полученных из EXAFS-анализа, были посчитаны структурные модели золотой оболочки, содержащей примеси олова. Расчет проводился на основе теории функционала плотности (DFT), с использованием программного комплекса QuantumEspresso с использованием приближения ультрамягких псевдопотенциалов (USPP) [11]. Ввиду достаточно больших размеров наночастицы (>20 нм), в рамках данного приближения можно рассматривать ее поверхность как бесконечный плоский слой. Геометрическая оптимизация проводилась алгоритмом Бройдена-Флетчера-Голдфарба-Шанно (BFGS) для минимизации сил с точностью до 10^{-3} [eV/Å] с релаксируемой ячейкой в плоскости X-Y. Ввиду необходимости учета влияния кислорода на оболочку золотой наночастицы были рассмотрены следующие модели (Рис.3,4):

- атом олова находится в приповерхностном слое золота в отсутствие кислорода;
- атом олова находится в приповерхностном слое в присутствии одного или двух атомов кислорода;
- атом олова находится на поверхности в присутствии одного атома кислорода.

Модель, соответствующая атому олова в приповерхностном слое золота в отсутствие кислорода, в дальнейшем, будет рассматриваться в качестве эталона, относительно которого можно рассматривать изменения локального атомного окружения, вызванные влиянием кислорода (Рис.3).

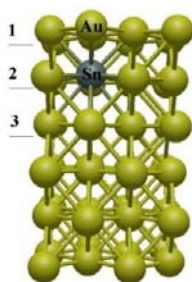


Рис.3. – Эталонная расчетная модель DFT локального атомного окружения атома олова в приповерхностном слое золота.

Для различных слоев атомов золота эталонной модели, межатомные расстояния Sn-Au соответственно равны: $\text{Sn-Au}^1=2.86 \text{ \AA}$, $\text{Sn-Au}^2=2.77 \text{ \AA}$, $\text{Sn-Au}^3=3.09 \text{ \AA}$ (Табл.3). Уменьшение расстояний для Au-Au и Sn-Au в рамках одного слоя, могут быть обусловлены влиянием сил поверхностного натяжения, так же как и уменьшение расстояний Sn-Au между слоями при приближении к поверхности наночастицы.

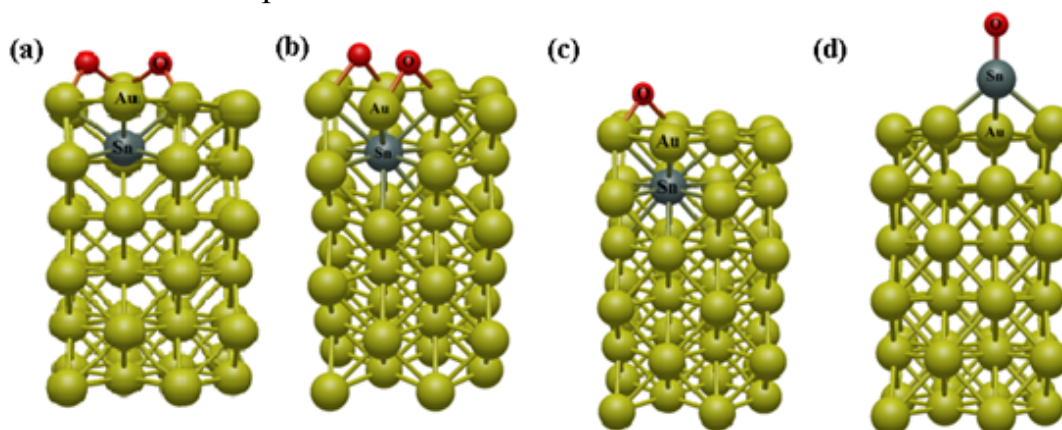


Рис.4. – Расчетные модели DFT структуры локального окружения атома олова: (a),(b) в приповерхностном слое золота, учитывая возможные расположения двух атомов кислорода на поверхности, (c) в приповерхностном слое золота при наличии атома кислорода на поверхности, (d) на поверхности золота при наличии одного атома кислорода.

Таблица №3.

Межатомные расстояния для различных структурных моделей расположения атома олова в приповерхностной области золотой наночастицы.

| Модель | Sn-Au \AA | Au-Au \AA | Au-O \AA |
|--------|--------------------|--------------------|-------------------|
| a | 3.02 ± 0.28 | 2.87 ± 0.07 | 2.17 ± 0.03 |
| b | 2.94 ± 0.14 | 2.87 ± 0.04 | 2.18 ± 0.04 |
| c | 2.91 ± 0.11 | 2.87 ± 0.03 | 2.16 ± 0.00 |
| d | 2.67 ± 0.01 | 2.86 ± 0.03 | - |
| Эталон | 2.89 ± 0.14 | 2.87 ± 0.02 | - |

Из таблицы 3 видно, что расстояния Sn-Au для моделей **a,b,c**, увеличивается в виду наличия кислорода на поверхности наночастицы, что

подтверждает результаты, полученные из EXAFS анализа. Модель χ показывает значительное уменьшение расстояния Sn-Au до значений 2.67 Å, что не согласуется с EXAFS данными.

Таким образом, полученные данные позволяют сделать вывод, что в образцах Au-6нм/Г и Au-10нм/Г атомы олова находятся в приповерхностном слое наночастицы, а также позволяют выдвинуть предположение о том, что образцы Au-6нм и Au-10нм содержат атомы олова в толще поверхности наночастицы.

Заключение

Изучено влияние термообработки на атомную структуру золотых наночастиц в силикатных стеклах, полученных методом лазерного излучения. Представлено предварительное объяснение механизма формирования структуры и состава приповерхностной области средней золотой наночастицы в каждом образце, а также их изменения в зависимости от термообработки и толщины исходной золотой пленки. Было выявлено, что использование золотой пленки толщиной 10нм приводит к формированию золотой наночастицы с металлическим ядром, атомная структура которого подобна золотой фольге, и оболочкой, состоящей из атомов золота и олова. На поверхности наночастицы также находятся оксиды олова магния и натрия.

Благодарности

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект №18-32-00818 мол_а.

Литература

1. Heinz Maximilian, Srabionyan Vasilii V. etal. Formation of bimetallic gold-silver nanoparticles in glass by UV laser irradiation // J. Alloys Compd. 2018. Vol. 767. pp. 1253-1263.



2. Срабионян В.В., Авакян Л.А., Прядченко В.В., Дмитриев Ю.Ю., Бугаев Л.А. Анализ EXAFS спектров в условиях сильной корреляции между структурными параметрами // Инженерный вестник Дона, 2014, №4. URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4y2014/2627.
3. Soldatov, M.A., Ascone, I., Congiu-Castellano, A. et al. Potential antitumor gold drugs: DFT and XANES studies of local atomic and electronic structure // J. Of Phys.: Conf.Series, 2009. Vol. 190, 012210.
4. Srabionyan V.V., Bugaev A.L. et al. EXAFS study of changes in atomic structure of silver nanoparticles in soda-lime glass caused by annealing // J. Non. Cryst. Solids. 2013. Vol. 382, № 15. pp. 24-31.
5. Srabionyan V.V., Bugaev A.L. et al. EXAFS study of size dependence of atomic structure in palladium nanoparticles // J. Phys. Chem. Solids. 2014. Vol. 75, № 4. pp. 470–476.
6. Heinz M., Srabionyan V. V. et al. Formation and implantation of gold nanoparticles by ArF-excimer laser irradiation of gold-coated float glass // J. Alloys Compd. 2018. Vol. 736, № 5. pp. 152–162.
7. Berthold L., Patzig C., Böbenroth A. TEM – Analysen an lasermodifizierten Au-Beschichtungen auf Ag/Na-ionenausgetauschten Glassubstrate // Fraunhofer-Institut Für Mikrostrukt. Von Werkstoffen Und Syst. 2018. IMWS, Reprint, Fraunhofer CAM. 449_01/201.
8. Newville M. Ph.D. thesis, University of Washington, 1995.
9. Greenwood N.N., Earnshaw A., Chemistry of the Elements, 2nd ed. // Elsevier, School of Chemistry University of Leeds, U. K, 1997
10. Vasile G., Arikian M., Ingvarsson S. Thermal radiation from Au nanoparticles deposited on patterned Pt microstructures // J. Phys. D. Appl. Phys. 2012. Vol. 45, № 44. P. 445106.

11. Giannozzi P., Baroni S., Bonini N., Calandra M., Car R. QUANTUMESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials // J.Phys.: Condens. Matter. 2009. Vol. 21, №39:395502.

References

1. Heinz Maximilian, Srabionyan Vasiliy V. et al. J. Alloys Compd. 2018. Vol. 767. pp. 1253-1263.
2. Srabionjan V.V., Avakjan L.A., Prjadchenko V.V., Dmitriev Ju.Ju., Bugaev L.A. Inženernyj vestnik Dona (Rus), 2014, №4 URL: ivdon.ru/ru/magazine/archive/n4y2014/2627.
3. Soldatov, M.A., Ascone, I., Congiu-Castellano, A. et al. J. of Phys.: Conf. Series, 2009. Vol. 190, 012210.
4. Srabionyan V.V., Bugaev A.L. et al. J. Non. Cryst. Solids. 2013. Vol. 382, № 15. pp. 24--31.
5. Srabionyan V.V., Bugaev A.L. et al. J. Phys. Chem. Solids. 2014. Vol. 75, № 4. pp. 470–476.
6. Heinz M., Srabionyan V. V. et al. J. Alloys Compd. 2018). Vol. 736, № 5. pp. 152–162.
7. Berthold L., Patzig C., Böbenroth A. Fraunhofer-Institut Für Mikrostrukt. Von Werkstoffen Und Syst. 2018. IMWS, Reprint, Fraunhofer CAM. 449_01/201.
8. M. Newville Ph.D. thesis, University of Washington, 1995.
9. Greenwood N.N., Earnshaw A., Elsevier, School of Chemistry University of Leeds, U. K, 1997
10. Vasile G., Arikan M., Ingvarsson S. J. Phys. D. Appl. Phys. 2012. Vol. 45, № 44. 445106.
11. Giannozzi P., Baroni S., Bonini N., Calandra M., Car R. J.Phys.: Condens. Matter. 2009. Vol. 21, №39. P. 395502.