

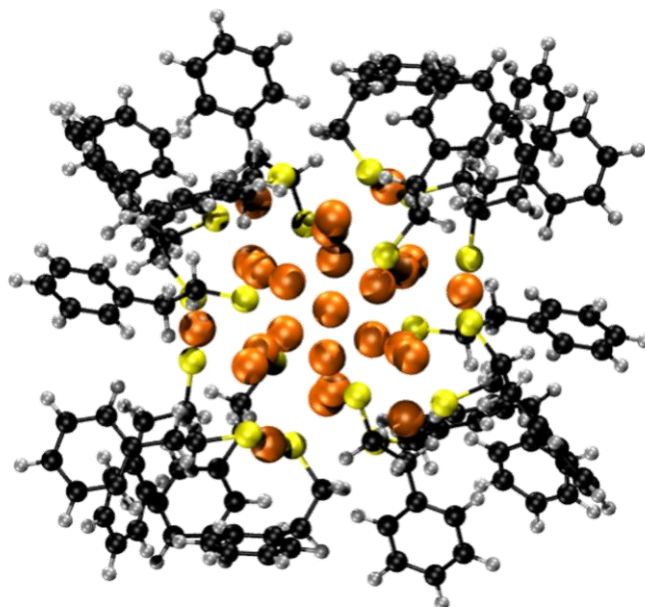
## Badanie właściwości atomowo-precyzyjnych nanoklustrów złota metodami wymuszonej spektroskopii Ramana i dynamiki molekularnej

Inż. Karolina Skąła

Kierownik I: **dr Kamil Polok**

Kierownik II: **dr Marcin Pastorczak, Instytut Chemii Fizycznej PAN**

Atomowo precyzyjne nanoklastry złota, ze względu na swoje właściwości będące na pograniczu cząsteczek i nanocząstek [1], mają wiele potencjalnych zastosowań: od katalizy i fotowoltaiki, po obrazowanie medyczne i optoelektronikę [2]. Zanim jednak możliwe będzie projektowanie nanoklustrów do konkretnych zastosowań, należy dobrze zrozumieć ich właściwości oraz to, w jaki sposób zależą one od struktury oraz składu nanoklustrów. Celem projektu jest zbadanie właściwości oscylacyjnych nanoklastra  $\text{Au}_{25}(\text{PET})_{18}$  (rys.1) przy wykorzystaniu wymuszonej spektroskopii Ramana, a także przeprowadzenie symulacji dynamiki molekularnej nanoklastra w próżni oraz w otoczeniu rozpuszczalnika. Symulacje mają na celu zrozumienie takich kwestii, jak możliwości tworzenia niskoenergetycznych izomerów, sposób ustawiania się ligandów wokół rdzenia, solwatację ligandów przez rozpuszczalnik, a także porównanie widm Ramana uzyskanych z symulacji z tymi z eksperymentu.



**Rysunek 1** Struktura nanoklastra złota  $\text{Au}_{25}(\text{PET})_{18}$

(PET = fenyloetanotiol)

Literatura:

[1] Zhou, Meng, Chenjie Zeng, Yuxiang Chen, Shuo Zhao, Matthew Y. Sfeir, Manzhou Zhu, i Rongchao Jin. *Nature Communications* 7, nr 1 (24 październik 2016): 13240

[2] Zhou, Meng, i Rongchao Jin. *Annual Review of Physical Chemistry* 72, nr 1 (20 kwiecień 2021): 121–42.