

УДК 535.015

## УСИЛЕНИЕ ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ НАНОЧАСТИЦ НА ОСНОВЕ ДИОКСИДА ТИТАНА ПУТЕМ ЛОКАЛИЗАЦИИ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ

Пономарева С.Р. (Университет ИТМО)

Научный руководитель – канд. физ.-мат. наук Гурвиц Е.А.  
(Университет ИТМО)

В работе рассмотрены дизайны наночастиц на основе диоксида титана различных форм. Благодаря высокой концентрации электромагнитных полей в слое  $TiO_2$  можно достичь увеличения поглощения света частицами, что приводит к усилению их фотокаталитической активности.

**Введение.** С каждым годом борьба с загрязнением окружающей среды и поиск экологически чистых возобновляемых источников энергии становятся все более и более актуальными проблемами. Одним из многочисленных способов, направленных на решение этих проблем, является фотокатализ, который может быть применен как для очистки воздуха и воды от различных загрязнителей и создания самоочищающихся поверхностей, так и для реакций выделения молекулярного водорода. Наиболее популярным материалом, используемым для фотокатализа, является диоксид титана. Он обладает рядом преимуществ, среди которых можно отметить широкую доступность и дешевизну, химическую стабильность и нетоксичность. Для улучшения эффективности структур из  $TiO_2$  были предложены многочисленные методы, такие как контроль кристаллической структуры, фотосенсибилизация, легирование металлами и неметаллами, создание гетеропереходов. Наименее исследованным являются методы использования локализации полей внутри частиц для усиления фотопоглощения. Например, в одной из недавних работ по этой теме исследуется влияние возбуждения анапольных состояний.

**Основная часть.** Были воспроизведены результаты, полученные ранее при возбуждении анапольных состояний в цилиндрических частицах из диоксида титана. Варьирование размерных параметров частиц и исследование их влияния на величину энергии, локализованной внутри 10 нм приповерхностного слоя  $TiO_2$ , показало, что возможно добиться лучших результатов в концентрировании электромагнитных полей. Далее были промоделированы другие дизайны частиц, например, цилиндрических и конических форм, в том числе и многослойные варианты с добавлением кремния и золота, которые также показали улучшение результатов. Моделирования проводились с помощью программного обеспечения Comsol Multiphysics

**Выводы.** В настоящей работе проведено сравнение различных дизайнов наночастиц по их эффективности для использования в фотокатализе. Полученные результаты могут быть применены для выбора оптимальных параметров частиц, обеспечивающих необходимое усиление фотокаталитических реакций.

Пономарева С.Р. (автор)

Подпись

Гурвиц Е.А. (научный руководитель)

Подпись