

УДК 535.015

## ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ УГЛЕРОДНЫХ ТОЧЕК С ЛЮМИНЕСЦИРУЮЩИМИ МОЛЕКУЛЯРНЫМИ ЦЕНТРАМИ

Стриеви́ч Е.Д. (Университет ИТМО)

Научный руководитель - кандидат физико-математических наук, научный сотрудник центра "Информационные оптические технологии" Кунделев Е.В.  
(Университет ИТМО)

Данная работа посвящена как экспериментальному, так и теоретическому исследованию оптических свойств углеродных точек (УТ) на основе лимонной кислоты и этилендиамина. УТ были получены гидротермальным методом путем варьирования времени синтеза. Моделирование оптических свойств УТ проводилось в рамках теории функционала плотности в программном пакете ADF.

**Введение.** Углеродные точки – сравнительно новый класс наноструктур, который был открыт в 2004 году. С тех самых пор им было посвящено большое количество работ, изучающих методы их получения, структуру и оптические свойства.

Основными оптическими свойствами УТ являются регулируемая фотолюминесценция (ФЛ), благодаря которой они могут светиться в спектральном диапазоне от УФ до ИК, и высокий квантовый выход (80-90%). Однако и по сей день среди ученых по всему миру нет единой точки зрения относительно структуры УТ и механизмов, ответственных за их излучение.

Проведенные ранее экспериментальные исследования показали, что за ФЛ УТ, синтезированных на основе лимонной кислоты, ответственны молекулярные люминесцирующие центры (IPCA, цитразиновая кислота и их производные). Также было установлено, что такие люминесцирующие центры образуются на начальном этапе синтеза, и со временем они преобразуются в углеродную матрицу. Данный процесс образования углеродной матрицы также сопровождается тушением ФЛ ввиду агрегации и изменения структуры люминесцирующих молекулярных центров. Таким образом, была выдвинута гипотеза, что свечение УТ преимущественно обусловлено молекулярными люминесцирующими центрами.

Цель работы состояла в исследовании оптических свойств УТ, полученных из лимонной кислоты методом гидротермального синтеза, в зависимости от времени и температуры синтеза.

**Основная часть.** Для проведения экспериментальных исследований были синтезированы УТ на основе лимонной кислоты и этилендиамина методом гидротермального синтеза. Для этого 1,0507 г лимонной кислоты и 335 мкл этилендиамина были растворены в 10 мл дистиллированной воды в тefлоновых автоклавах. Далее автоклавы с полученными растворами были помещены в микроволновую печь и выдерживались при температуре 150 и 190°C в течение 1, 2, 3, 4, 5 и 6 ч. В итоге было получено шесть образцов УТ, которые были подвержены диализу. Затем с помощью спектрофотометров Shimadzu UV Probe 3600 и CaryEclipse были измерены спектры поглощения и ФЛ полученных образцов УТ, светящихся в синей области спектра (450 нм).

Молекулы IPCA, цитразиновой кислоты, а также их производные, в виде слабо и сильно связанных димеров были рассмотрены в качестве люминесцирующих оптических центров для моделирования физических процессов в УТ. Оптимизация геометрии люминесцирующих оптических центров проводилась в рамках стационарной теории функционала плотности (DFT), с обменно-корреляционным функционалом B3LYP с учетом дисперсионной поправки Grimme D4. В качестве волновых функций использовался базисный набор DZP. Энергии и силы осцилляторов поглощательных и излучательных электронных переходов были рассчитаны в рамках нестационарной теории функционала плотности (TD-DFT) с такими же функционалом и базисным набором волновых функций, как и при оптимизации геометрии.

Все расчеты проводились с учетом влияния водной среды в рамках модели COSMO. Для расчетов использовался программный пакет ADF.

**Выводы.** В результате анализа экспериментальных данных было обнаружено, что интенсивность ФЛ УТ, синтезированных на основе лимонной кислоты и этилендиамина, на начальных этапах синтеза растет (в течение первых двух часов), а затем уменьшается. Установлено, что за тушение ФЛ ответственно взаимодействие между молекулярными центрами. Анализ проведенных расчетов показал, что взаимодействие между центрами может приводить к тушению ФЛ УТ на два порядка при переходе от невзаимодействующих к сильно-связанным молекулярным люминесцирующим центрам, что хорошо согласуется с экспериментальными данными.

Стриевич Е.Д. (автор)

Подпись

Кунделев Е.В. (научный руководитель)

Подпись