**название вкр: «ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ СТРУКТУРЫ И СОСТАВА ГРАФИТОПОДОБНЫХ CN МАТЕРИАЛОВ НА ИХ СВОЙСТВА.»**

**(докладчик Штельман Л.в.)**

**Слайд 1**

Здравствуйте, уважаемые коллеги.

Тема доклада: Исследование влияния структуры и состава графитоподобных C-N материалов на их оптические свойства

**Слайд 2**

НАУЧНАЯ НОВИЗНА

Новизна работы заключается в определении влияния структуры новых синтезируемых графитоподобных CN материалов на их оптические свойства, важные для применения таких материалов в прикладных задачах фотоники. Это связано с возможностью использования материала в оптических источниках, для чего требуется понимать свойства материала и возможности управления этими свойствами. Поскольку материал синтезируемый, требуется понять как влияет изменение в условиях синтеза на его структуру и свойства

**Слайд 3**

Научная работа посвящена изучению оптическими методами структуры и состава g-C3N4 и одного из его выдающихся свойств- флуоресценции. Для этого были определены задачи, выполнение которых позволит нам приблизиться к пониманию что именно в структуре материала дает образцам такой высокий показатель флуоресценции. Для этого требуется:

* Выявить зависимости структуры и свойств синтезируемых материалов от методов синтеза и разницы в их условиях (изменения температуры, времени синтеза, среды в которой происходит синтез) проанализировав оптические спектры.
* Изучить структуру, полученную в результате синтеза с помощью методов колебательной спектроскопии.

Для изучения структуры материала методами колебательной спектроскопии используются ИК-Фурье спектроскопия и спектроскопия комбинационного рассеяния, у той и другой есть взаимодополняющие друг друга возможности для описания структуры. Для получения спектров комбинационного рассеяния флуоресцентных образцов требуется использовать возбуждающий источник, излучающий в диапазоне УФ и ближнего ИК. Для проведения измерения спектров ИК пропускания порошков требуется провести пробоподготовку этого порошка.

* Измерение спектров флуоресценции синтезированных образцов

Для того чтобы иметь представление о флуоресценции образца, требуется измерить эту флуоресценцию при облучениями источниками с разными длинами волн возбуждающего излучения.

**Слайд 4**

Нитриду углерода соответствуют структуры триазиновых или гептазиновых (3-триазиновых) колец. На слайде представлены идеальные структуры графитоподобного нитрида углерода, в виде единичных колец и блоков этих колец. Эти структуры идеальны, потому что на практике либо присутствуют концевые группы, либо вместо части азота, выполняющего соединительную функцию между кольцами присутствуют элементы из групп –NH, -CO, –OH др.

**Слайд 5**

* Уникальная электронная структура, которую возможно контролировать;

Изменение условий синтеза вызывает изменение электронной структуры, например, изменение ширины запрещенной зоны можно регулировать добавлением сильной кислотой

* Температурная и химическая стойкость;

g-C3N4 сублимирует при температурах выше 600°С,материал не плавится. Практически подтверждено, что материал не растворим в воде, этаноле, толуоле, диэтиловом эфире и ТГФ\*

* Высокая биосовместимость и низкая токсичность;

Определяются из того условия что материал все-таки углеродный, как и все органические ткани.

* Высокий уровень флуоресценции и оптическая стабильность.
* Синтезированные образцы демонстрируют высокий уровень флуоресценции с квантовым выходом от 3 до 90%, стабильность интересна в первую очередь для растворов с квантовыми точками g-C3N4 легированными и нет. Для легированного кислородом и серой материала описано взаимодействие раствора с тканями HeLa при этом флуоресценция на гаснет в течение длительного времени их взаимодействия.\*\*

\*E.G. Gillan, Chem. Mater. 12 (2000) 3906–3912.

\*\*X. Zhang, X. Xie, H. Wang, J. Zhang, B. Pan and Y. Xie, J. Am. Chem. Soc., 2012, 135, 18–21.

**Слайд 6**

Материал, обладающий множеством полезных свойств имеет не меньшее множество применений. Наиболее известные из них

* Фотокатализ. Применение материала для получения чистого водорода и кислорода под воздействием излучения в видимой и ближней УФ областях\*
* Аккумуляторы. Модифицирование лития нитридом углерода для повышения ёмкости литий-ионных аккумуляторов. На данный момент уже получены прототипы с ёмкостью более 100 мА·ч. \*2
* Яркая флуоресценция этих материалов позволяет использовать их в качестве маркеров:
* Маркеры ионов трехвалентного железа и двухвалентной меди в воде. Обнаружение происходит благодаря эффекту гашения флуоресценции. \*3
* Маркеры в агрессивных средах. Благодаря химической инертности материалов на основе нитридов углерода, их можно использовать в качестве маркеров при исследовании потоков агрессивных сред. Одна из основных проблем в этой области - малое число химически инертных материалов. \*4
* Биомаркеры опухолей. Благодаря биосовместимости нитридов углерода \*5 их возможно использовать в качестве биомаркеров для диагностирования опухолей в режиме реального времени. Так как на данный момент во время операций необходимо полностью удалить опухоль, включая метастазы и свести к минимуму повреждения здоровых тканей и сократить время операции \*6. Если пораженные опухолью ткани будут флюоресцировать, то это решит поставленные задачи. Такое применение возможно при использовании наночастиц с размером, не превышающим 400 нм, чтобы опухоль могла их абсорбировать.

\* Kudo A., Miseki Y.//Chem. Soc. Rev. 2009. 38(1), P. 253.

\*2 Wu M., Wang Q., Sun Q., Jena P.//J. Phys. Chem. C. 2013. 117(12), P. 6055.

\*3 Zhang S., Li J., Zeng M. et al.//Nanoscale. 2014. 6, P. 4157.

\*4 Барткус Г., Кузнецов В.// Интерэкспо Гео-Сибирь. 2016. 5(1), С. 27.

\*5 Cui F., Li D.//Surf. Coat. Technol. 2000. 131, P. 481.

\*6 Рочева В., Шолина Н., Деревяшкин С. и др.// Альманах клинической медицины. 2016. 44(2), С. 227.

**Слайд 7**

Для исследования структуры и состава материалов, полученных термолизом при разных температурах были измерены спектры ИК пропускания. Для сравнения характеристических полос поглощения был измерен также спектр предшественника – меламина. Анализ спектров и сопоставление полученных пиков поглощения с литературными данными привели к следующему:

Из спектров ИК пропускания мы видим, что пики поглощения синтезированных образцов по большей части совпадают с пиками меламина, это связано с тем что в предложенном диапазоне присутствуют по большей части режимы колебаний функциональной группы CN.

В спектре ИК пропускания меламина присутствуют пики поглощения с частотами: на 830,730, 590 и 515 см-1. Пики в районе 500-600 см-1 очень слабые. Эти пики связаны с деформационными колебаниями триазинового кольца и грани триазинового кольца соответственно. Пик поглощения на 1470 см-1 соответствуют колебанию «дыхания» триазинового кольца. Так же в меламине присутствуют пики поглощения, связанные с колебаниями функциональной группы NH2. Пик на 625 см-1 соответствует веерному колебанию NH2, а пики на 1615 и 1720 см-1 деформационному колебанию NH2.

В спектре ИК пропускания порошка g-C3N4, синтезированного из меламина при 500°С, присутствуют пики поглощения на частотах 730, 830 и 1470 см-1, которыесоответствуют пикам, зарегистрированным для меламина и связаны с деформационными колебаниями триазинового кольца и колебанием «дыхания» триазинового кольца. Слабые пики поглощения на 1280 и 1355 см-1 согласуются с валентным колебанием C-N для случая азота - связующего (где N-связывающая между кольцами) и C-N с грани кольца. А пики на 1520,1597 см-1 соответствуют валентному колебанию C=N.

В спектре ИК пропускания порошка g-C3N4 синтезированного при 550°С так же присутствуют пики поглощения, которые были зарегистрированы в меламине. Частота этих пиков 830, 580 и 518 см-1 деформационными колебания триазинового кольца и грани триазинового кольца соответственно; 1280 и 1345 см-1 описанные для образца, полученного при 500°С - валентные колебанием C-N для случая азота - связующего (где N-связывающая между кольцами) и C-N с грани кольца соответственно;1490 – смещенное колебание «дыхания» триазинового кольца. и 1602 см -1 валентное колебание C=N.

В спектре пропускания порошка g-C3N4, синтезированного при 600°С пики из меламина на 730 и 837 см-1 связаные с деформационными колебаниями триазинового кольца; 1288 и 1349 см-1 связанные с валентными колебаниями C-N; 1480 см-1 связанный с колебанием «дыхания» кольца. А также присутствует пик на 1609 см -1, который соответствует валентному колебанию C=N.

Сильный пик в районе 1720-1730 см-1 соответствующий деформационным колебаниям NH2,как и было написано выше присутствует в спектрах всех образцов и является индикатором наличия не испарившейся в процессе синтеза аминогруппы.

**Слайды 8**

По аналогии проанализируем спектры ИК пропускания для образцов, синтезированных термолизом при одинаковых температурах. Но с разным результатом, за счет добавления в материал частиц кварца, на которые производилось осаждение при остывании.

В спектре ИК пропускания сферических частиц g-C3N4 осажденных на SiO2 присутствуют пики. Аналогичные пикам для образца порошка g-C3N4. Это пики на частотах 522,586 см-1, аналоги пикам на 518 и 580 см-1. Пики на 598 и 837 см-1 связан с деформационными колебаниями триазинового кольца. Пики на 1292 и 1351 см-1 являются смещенными пиками, описанными ранее - 1280 и 1355 см-1, которые согласуются с валентным колебанием C-N для случая азота - связующего (где N-связывающая между кольцами) и C-N с грани кольца. Пик на 470 см-1 соответствует колебанию «дыхания» кольца, а пик на 1585 см-1 соответствует валентному колебанию C=N. Также в спектре образца присутствует пик-индикатор остатка функциональной группы NH2, на 1722 см-1 связанный с деформационными колебаниями NH2.

**Слайд 9**

На слайде присутствует оптическая схема многофункциональной установки. Собранной в нашем институте, которая в данной работе используется для измерения флуоресценции.

**Слайд 10**

Были произведены измерения спектров флуоресценции порошков сферических g-C3N4 полых и осажденных на частицу кварца синтезированных методом высокотемпературной поликонденсации.

При облучении порошков лазером с длиной волны 532 нм, наблюдалась флуоресценция с пиками на длинах волн 580.7 и 585.7 для образцов полых сферических g-C3N4 и осажденных на кварц сферических g-C3N4. Длины полуширины флуоресценции этих образцов 40 и 125 нм соответственно.

**Слайд 11**

По аналогии измерялись спектры флуоресценции объемных порошков g-C3N4 и осажденных на частицу кварца сферических частиц g-C3N4 синтезированных методом термоконденсации.

При облучении порошков лазером с длиной волны 532 нм, наблюдалась флуоресценция с пиками на длинах волн 583.7 для нагретого до 500°С; 583,4 для нагретого до 550°С; 583,6 для нагретого до 600°С и 588,4 для нагретого до 500°С образца сферических частиц, осажденных на кварц.

**Слайд 12**

Произведено:

1. Измерение спектров ИК пропускания для описания cтруктуры образцов, синтезированных при различных условиях
2. Измерение спектра флуоресценции порошков под лазерным излучением с длиной волны в видимой области

**Слайд 13 и 14**

Публикации и выступления

**Слайд 15**

Спасибо за внимание.