



УНИВЕРСИТЕТ ИТМО



МЕЖДУНАРОДНЫЙ
НАУЧНО-ОБРАЗОВАТЕЛЬНЫЙ
ЦЕНТР ФИЗИКИ НАНОСТРУКТУР



Молодежная
школа-конференция

**«НАНОСТРУКТУРЫ.
СВОЙСТВА И ПРИМЕНЕНИЯ»**



15 - 17 ИЮНЯ 2021

**ПРОГРАММА И ТРУДЫ
ШКОЛЫ-КОНФЕРЕНЦИИ**

Общая информация

Молодежная школа-конференция «Наноструктуры. Свойства и применения» для студентов, аспирантов и молодых ученых, проводится Международным центром Физики наноструктур Университета ИТМО, организатором таких международных конференции, как «Photonic Colloidal Nanostructures: Synthesis, Properties, and Applications» и «Smart nanosystems for Life».

Формат проведения – онлайн (на платформе Zoom).

Регламент выступления: 10 минут на доклад и 5 минут на вопросы.

Видео-записи докладов на научных секциях доступны по ссылке: https://vk.com/videos-36958798?section=album_1

В работе мероприятия приняло участие более полусотни человек, в рамках 5 секций было представлено 40 устных докладов от участников со всей России, к обсуждению которых подключались коллеги из-за рубежа. Научная программа охватывали такие тематики, как:

- Технологии роста и самоорганизация наноструктур;
- Характеризация наноструктур (зондовая и электронная микроскопия);
- Оптические, электронные и магнитные свойства наноструктур;
- Гибридные наноструктурированные материалы и метаматериалы;
- Различные аспекты применения наноструктур и материалов на их основе.



Программный КОМИТЕТ



**Орлова Анна
Олеговна**

Доктор физико-математических наук,
главный научный
сотрудник



**Баранов
Александр
Васильевич**

Доктор физико-математических наук,
профессор



**Вартанян
Тигран
Арменакович**

Доктор физико-математических наук,
главный научный
сотрудник



**Вениаминов
Андрей
Викторович**

Доктор физико-математических наук,
ведущий научный
сотрудник



**Попов
Александр
Платонович**

Кандидат физико-математических наук,
старший научный
сотрудник,
зам.ген.директора
ООО «ЛЮМЭКС-АХК»



**Рождественский
Юрий
Владимирович**

Доктор физико-математических наук,
профессор



**Старовойтов
Антон
Андреевич**

Кандидат физико-математических наук,
доцент

Организационный КОМИТЕТ

Председатель: профессор., д.ф.-м.н. Орлова Анна Олеговна

Зам. председателя: доцент, к.ф.-м.н. Старовойтов Антон Андреевич

Секретарь: аспирант Набиуллина Резида Даниловна

Члены комитета:

- Вартамян Тигран Арменакович, д.ф.-м.н., профессор
- Вениаминов Андрей Викторович, д.ф.-м.н., в.н.с.
- Рождественский Юрий Владимирович, д.ф.-м.н., профессор
- Захаров Виктор Валерьевич, к.ф.-м.н., н.с.
- Колесова Екатерина Петровна, к.ф.-м.н., н.с.
- Резник Иван Алексеевич, к.ф.-м.н., н.с.
- Щербинин Дмитрий Павлович, к.ф.-м.н., с.н.с.
- Аннас Кирилл Игоревич, м.н.с.
- Романова Анна Викторовна, инженер
- Рыбин Вадим Витальевич, инженер

Расписание

15 МАРТА (ВТОРНИК)

11:00- https://vk.com/video-36958798_456239036

13:00 Секция 1

14:00- https://vk.com/video-36958798_456239034

15:00 Мастер-класс "Конфокальная микроскопия"

15:00- https://vk.com/video-36958798_456239035

17:00 Секция 2

16 МАРТА (СРЕДА)

11:00- https://vk.com/video-36958798_456239037

13:00 Секция 3

14:00- https://vk.com/video-36958798_456239038

15:00 Мастер-класс "Линейная электродинамическая ловушка"

15:00- https://vk.com/video-36958798_456239039

17:00 Секция 4

17 МАРТА (ЧЕТВЕРГ)

11:00- https://vk.com/video-36958798_456239040

13:00 Секция 5

14:00- https://vk.com/video-36958798_456239041

15:00 Мастер-класс "Кинетика затухания люминесценции"

15:00- https://vk.com/video-36958798_456239042

17:00 Круглый стол по вопросам поступления в магистратуру

**ВИДЕО-ЗАПИСИ В НАШЕМ АЛЬБОМЕ В VK:
[HTTPS://VK.COM/VIDEOS-36958798?SECTION=ALBUM_1](https://vk.com/videos-36958798?section=album_1)**

15 ИЮНЯ

11:00- https://vk.com/video-36958798_456239036

13:00 Секция 1

- *Приветственное слово председателя программного комитета Орловой Анны Олеговны, профессора, доктора физико-математических наук*
- Корженевский Ю.Г., Литвин А.П. (к.ф.-м.н.) Тройные гибридные фотовольтаические элементы на основе квантовых точек, полимеров и фуллеренов (Университет ИТМО)
- Киричек К., Дададжанов Д.Р. (к.ф.-м.н.), Гладских И.А. (к.ф.-м.н.), Вартанян Т.А. (д.ф.-м.н.) Лаборатория на чипе для определения уровня оксидативного стресса на основе эффекта плазмон-усиленной хемилюминесценции (Университет ИТМО)
- Тиходеева Е.О., Орлова А.О. (д.ф.-м.н.) Создание комплексов молекул AL-сульфофталоцианина с наночастицами диоксида кремния для фотодинамической терапии (Университет ИТМО)
- Соловьева Е.О. Аномальный диффузионный профиль адатомов на экстремально широких террасах поверхности Si(111) (Новосибирский Государственный Университет)
- Чернецова И.А., Колесова Е.П.(к.ф.-м.н.), Орлова А.О. (д.ф.-м.н.) Люминесцентная микроскопия для оценки изменения люминесцентных свойств квантовых точек (Университет ИТМО)
- Азизов Р.Р. Исследование оптических характеристик композитных материалов на основе перовскитных нанокристаллов CsPbBr₃ (Университет ИТМО)
- Комиссаров М.Д., Леонов Н.Б. (к.ф.-м.н.) Исследование оптических свойств тонких пленок оксида цинка с целью сенсорных применений (Университет ИТМО)
- Морозова А.А., Лутошина Д.С. Исследование износостойкости цветных покрытий из наночастиц на поверхности серебра, получаемых вследствие лазерного воздействия (Университет ИТМО)
- Sewid F.A., Energy transfer between quantum dots and porphyrin in nanocomposites passivated by biopolymer (Университет ИТМО)

15 ИЮНЯ

14:00 - https://vk.com/video-36958798_456239034

15:00 Мастер-класс "Конфокальная микроскопия"

Примите участие в мастер-классе на лазерном сканирующем конфокальном микроскопе LSM-710 (Zeiss), который позволяет получать оптические и люминесцентные изображения образцов за счет послойного анализа с максимально возможным для оптических микроскопов пространственным разрешением.

15:00 - https://vk.com/video-36958798_456239035

17:00 Секция 2

- Миропольцев М.А., Баранов А.В. (д.ф.-м.н.) Влияние водорастворимых лигандов на стабильность и фотофизические свойства четверных квантовых точек ZAIS (Университет ИТМО)
- Татаринов Д.А., Сокольникова С.Р., Мыслицкая Н.А. (к.ф.-м.н.) Исследование фотокаталитических свойств нанокompозитов хитозан-TiO₂ для разложения отдельных представителей ПАУ (Калининградский государственный технический университет)
- Куршанов Д.А., Арефина И.А., Степанова М.М., Киричек К., Дубовик А.Ю. (PhD) Исследование оптических свойств квантовых точек AgInS₂/ZnS в комплексах Fe₃O₄@CaCO₃ (Университет ИТМО)
- Мусихина Е.С. Перспективы записи фемтосекундным излучением трехмерных структур на фото-термо-рефрактивном стекле (Университет ИТМО)
- Рыбин В.В., Семенин М.С. Недеструктивное определение отношения заряда к массе микрочастиц в квадрупольной ловушке Пауля (Университет ИТМО)
- Дылыков Б.Ц., Исследование морфологии субмикронных пленок нитрида алюминия (Новосибирский Государственный Университет)
- Ридер М.А., Расчет параметров полупроводниковых структур с асимметричными квантовыми ямами для отвода тепловой энергии (Университет ИТМО)
- Константинова Е.И.1, Боркунов Р.Б.2, Царьков М.В.2, В.А. Слежкин В.А.1, В.В. Брюханов В.В.2 Исследование оптических свойств самоупорядоченных гибридных наноструктур анодно-образованной серебряной пленки (1 - Калининградский государственный технический университет, 2 - Балтийский федеральный университет имени И.Канта)

16 ИЮНЯ

11:00- https://vk.com/video-36958798_456239037

13:00 Секция 3

- Камшилов Г.Н., Парфенов П.С. (к.т.н.) Особенности исследования срезов солнечных элементов на основе нанокристаллов методом растровой электронной микроскопии (Университет ИТМО)
- Натальин Н.В. Моделирование дендритных структур и их фрактальный анализ (Университет ИТМО)
- Осколкова Т.О., Колесова Е.П. (к.ф.-м.н.), Орлова А.О. (д.ф.-м.н.) Влияние агрегации на люминесцентные свойства квантовых точек CDSE/ZNS (Университет ИТМО)
- Барковский В.В., Авакян Л.А. (д.ф.-м.н.) Машинное обучение для определения строения биметаллических наночастиц на основании данных анализа EXAFS спектров (Южный федеральный университет)
- Ведерникова А.А., Степаниденко Е.А., Ушакова Е.В. (к.ф.-м.н.) Исследование оптических переходов углеродных точек из о-фенилендиамина в зависимости от используемого растворителя (Университет ИТМО)
- Разживина М.Э., Кинетика трансформации формы эшелонов атомных ступеней на поверхности Si(001) в условиях электромиграции (Новосибирский Государственный Университет)
- Осипова В.А., Ткач А.П., Миропольцев М.А., Кузнецова В. А.(к.ф.-м.н.), Баранов А.В.(д.ф.-м.н.) Исследование фёрстеровского переноса энергии в комплексах тройных квантовых точек AGINS2/ZNS и молекулами красителей Cu3 и Cu5 (Университет ИТМО)
- Васильев И.А., Рождественский Ю.В. (д.ф.-м.н.) Аспекты моделирования поведения квантовой системы на основе молекулярных спинов полупроводниковых гетероструктур (Университет ИТМО)
- Добони К.А. Физико-химические, структурные и технологические основы синтеза функциональных наноструктурных порошков в среде низкотемпературной плазмы (Обнинский институт атомной энергетики НИЯУ МИФИ)
- Набиуллина Р.Д., Старовойтов А.А. (к.ф.-м.н.), Дададжанова А.И., Арефина И.А. Оптические свойства J-агрегатов псевдоизоцианинового красителя на поверхности нанопористого оксида алюминия (Университет ИТМО)

16 ИЮНЯ

14:00 - https://vk.com/video-36958798_456239038

15:00 Мастер-класс "Линейная электродинамическая ловушка"

Примите участие в мастер-классе на единственном в России аппаратном комплексе на основе электродинамической (ионной) ловушке, который позволяет исследовать массу, размер и заряд одиночных плененных объектов на основе формы расширенной орбиты этого объекта.

15:00 - https://vk.com/video-36958798_456239039

17:00 Секция 4

- Матюшкина А.А., Орлова А.О. (д.ф.-м.н.) Исследование агрегатов магнитных наночастиц методом магнитного кругового дихроизма (Университет ИТМО)
- Воронцова Ю.А., Ситников С.В. (к.ф.-м.н.) Дрейф двумерных вакансионных островков на поверхности Si(100) в условиях электромиграции (Новосибирский национальный исследовательский государственный университет)
- Мирущенко М.Д., Наутран В.Р., Ушакова Е.В. (к.ф.-м.н.) Исследование оптических свойств коллоидных нанокристаллов Cs₂AgInCl₆/TEOS с кристаллической структурой перовскита (Университет ИТМО)
- Хорошев И.А. Моделирование оптического охлаждения нанокристаллов YLF: Yb³⁺ с учетом вероятностного характера поглощения/флуоресценции (Университет ИТМО)
- Кабанов С.А., Рождественский Ю.В. (д.ф.-м.н.) Использование атомных интерферометров для прецизионных измерений вращений и силы тяжести (Университет ИТМО)
- Булгакова А.В., Колесова Е.П. (к.ф.-м.н.), Маслов В.Г. (д.ф.-м.н.), Дубовик А.Ю. (PhD), Гуныко Ю.К. (к.х.н.) Гибридные наноструктуры на основе наночастиц TiO₂ и квантовых точек CdSe (Университет ИТМО)
- Орлов А.В., Тепляков Н.В., Кунделев Е.В. (к.ф.-м.н.), Рухленко И.Д. (д.ф.-м.н.) Моделирование электронных и оптических свойств квантовых точек из хирального двухслойного графена (Университет ИТМО)
- Фаррахова Д.С., Маклыгина Ю.С. (к.ф.-м.н.), Грачев П.В. (к.ф.-м.н.), Романишкин И.Д., Яковлев Д.В., Рябова А.В., Лощенов В.Б. (д.ф.-м.н.) Сравнительный анализ распределения индоцианина зеленого в молекулярной и нано-форме с целью увеличения времени его циркуляции в опухоли и в ее макроокружении для флуоресцентного имаджинга (Институт общей физики имени А.М. Прохорова РАН)

17 ИЮНЯ

11:00- https://vk.com/video-36958798_456239040

13:00 Секция 5

- Баранов К.Н., Колесова Е.П. (к.ф.-м.н.), Орлова А.О. (д.ф.-м.н.) Исследование генерации активных форм кислорода нанокompозитами AIS/TIO₂ под действием излучения разных спектральных диапазонов и их антибактериальной активности (Университет ИТМО)
- Долматов Д.А., Гущин М.Г., Онищук Д.А. Исследование оптических свойств оксида цинка для применения в качестве газовых сенсоров (Университет ИТМО)
- Тучин В.С., Маслов В.Г. (д.ф.-м.н.), Орлова А.О. (д.ф.-м.н.), Колесова Е.П. (к.ф.-м.н.) Исследование оптических свойств гидрофобных молекул порфиринового ряда (Университет ИТМО)
- Романова А.В., Рудый С.С., Рождественский Ю.В. (д.ф.-м.н.) Формирование кулоновских кристаллов в линейных ионных ловушках с запирающими электродами (Университет ИТМО)
- Маргарян И.В. Получение функциональных пленок из наночастиц SnO₂ (Университет ИТМО)
- Степаниденко Е.А., Ушакова Е.В. (к.ф.-м.н.) Исследование влияния химического окружения, состава прекурсоров и температуры синтеза на формирование оптических переходов в люминесцентных углеродных точках (Университет ИТМО)
- Арефина И.А., Дададжанов Д.Р., Ведерникова А.А. Исследование эффекта плазмон-усиленной флуоресценции в углеродных точках (Университет ИТМО)
- Муркина А.Д., Дубовик А.Ю. (PhD), Орлова А.О. (д.ф.-м.н.), Колесова Е.П. (к.ф.-м.н.) Исследование эффективности переноса энергии в комплексах AIS квантовых точек с молекулами AL(OH)-сульфоталоцианина (Университет ИТМО)
- Яковлев Д.В.^{1,2}, Колесова Е.П. (к.ф.-м.н.)³, Аннас К.И.³, Фаррахова Д.С.², Сизова С.В.¹, Орлова А.О. (д.ф.-м.н.)³, Олейников В.А.¹ Исследование новых конъюгатов на основе полупроводниковых квантовых точек ais/zns и фотосенсибилизатора фталоцианина алюминия для повышения эффективности фототераностики (1 - Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН; 2 - Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН; 3 - Университет ИТМО)

17 ИЮНЯ

14:00 - https://vk.com/video-36958798_456239041

15:00 Мастер-класс "Кинетика затухания люминесценции"

Примите участие в мастер-классе на лазерном сканирующем флуоресцентном микроскопе MicroTime 100 (PicoQuant), который позволяет получать оптические изображения объектов, 2D-люминесцентные изображения и карты времен затухания люминесценции с дифракционным пространственным разрешением.

15:00 - https://vk.com/video-36958798_456239042

17:00 Круглый стол по вопросам поступления в магистратуру

Приглашаем выпускников бакалавриата принять участие в круглом столе по вопросам поступления на магистерскую программу "Физика и технология наноструктур", которая реализуется на базе Международного центра Физики наноструктур. В дискуссии примут участие Анна Олеговна Орлова, руководитель образовательной программы, и Антон Андреевич Старовойтов, член приемной комиссии Университета ИТМО.

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

СОДЕРЖАНИЕ

Корженевский Ю.Г. Тройные гибридные фотовольтаические элементы на основе квантовых точек, полимеров и фуллеренов.	15
Киричек К. Лаборатория на чипе для определения уровня оксидативного стресса на основе эффекта плазмон-усиленной хемиллюминесценции	16
Тиходеева Е.О. Создание комплексов молекул AL-сульфофталоцианина с наночастицами диоксида кремния для фотодинамической терапии	17
Соловьева Е.О. Аномальный диффузионный профиль адатомов на экстремально широких террасах поверхности Si(111)	19
Чернецова И.А. Люминесцентная микроскопия для оценки изменения люминесцентных свойств квантовых точек	20
Азизов Р.Р. Исследование оптических характеристик композитных материалов на основе перовскитных нанокристаллов CsPbBr ₃	22
Комиссаров М. Д. Исследование оптических свойств тонких пленок оксида цинка с целью сенсорных применений	23
Sewid F.A. Energy transfer between quantum dots and porphyrin in nanocomposites passivated by biopolymer	24
Миропольцев М.А. Влияние водорастворимых лигандов на стабильность и фотофизические свойства четверных квантовых точек ZAIS	25
Татаринов Д.А. Исследование фотокаталитических свойств нанокompозитов хитозан-TiO ₂ для разложения отдельных представителей ПАУ	26
Куршанов Д.А. Исследование оптических свойств квантовых точек AgInS ₂ /ZnS в комплексах Fe ₃ O ₄ @CaCO ₃	28
Рыбин В.В. Недеструктивное определение отношения заряда к массе микрочастиц в квадрупольной ловушке Пауля	30
Ридер М.А. Расчет параметров полупроводниковых структур с асимметричными квантовыми ямами для отвода тепловой энергии	31
Камшилов Г.Н. Особенности исследования срезов солнечных элементов на основе нанокристаллов методом растровой электронной микроскопии	32
Натальин Н.В. Моделирование дендритных структур и их фрактальный анализ	33
Осколкова Т.О. Влияние агрегации на люминесцентные свойства квантовых точек CDSE/ZNS	34
Ведерникова А.А. Исследование оптических переходов углеродных точек из О-фенилендиаминa в зависимости от используемого растворителя	35
Разживина М.Э. Кинетика трансформации формы эшелонов атомных ступеней на поверхности Si(001) в условиях электромиграции	36
Осипова В.А. Исследование фёрстеровского переноса энергии в комплексах тройных квантовых точек AgInS ₂ /ZnS и молекулами красителей Cu ₃ и Cu ₅	37
Васильев И.А. Аспекты моделирования поведения квантовой системы на основе молекулярных спинов полупроводниковых гетероструктур	39

Добони К.А. Физико-химические, структурные и технологические основы синтеза функциональных наноструктурных порошков в среде низкотемпературной плазмы	40
Набиуллина Р.Д. Оптические свойства J-агрегатов псевдоизоцианинового красителя на поверхности нанопористого оксида алюминия	41
Матюшкина А.А. Исследование агрегатов магнитных наночастиц методом магнитного кругового дихроизма	43
Воронцова Ю.А. Дрейф двумерных вакансионных островков на поверхности Si(100) в условиях электромиграции	44
Мирущенко М.Д. Исследование оптических свойств коллоидных нанокристаллов Cs ₂ AgInCl ₆ /TeOS с кристаллической структурой перовскита	45
Хорошев И.А. Моделирование оптического охлаждения нанокристаллов YLF: YB ³⁺ с учетом вероятностного характера поглощения/флуоресценции	46
Кабанов С.А. Использование атомных интерферометров для прецизионных измерений вращений и силы тяжести	47
Булгакова А.В. Гибридные наноструктуры на основе наночастиц TiO ₂ и квантовых точек CdSe	48
Орлов А.В. Моделирование электронных и оптических свойств квантовых точек из хирального двухслойного графена	49
Фаррахова Д.С. Сравнительный анализ распределения индоцианина зеленого в молекулярной и наноформе с целью увеличения времени его циркуляции в опухоли и в ее макроокружении для флуоресцентного имаджинга	50
Баранов К.Н. Исследование генерации активных форм кислорода нанокompозитами AIS/TiO ₂ под действием излучения разных спектральных диапазонов и их антибактериальной активности	51
Долматов Д.А. Исследование оптических свойств оксида цинка для применения его в качестве трансдьюсерного слоя в газовых сенсорах	52
Тучин В.С. Исследование оптических свойств гидрофобных молекул порфиринового ряда	54
Романова А.В. Формирование кулоновских кристаллов в линейных ионных ловушках с запирающими электродами	55
Маргарян И.В. Получение функциональных пленок из наночастиц SnO ₂	57
Степаниденко Е.А. Исследование влияния химического окружения, состава прекурсоров и температуры синтеза на формирование оптических переходов в люминесцентных углеродных точках	58
Арефина И.А. Исследование эффекта плазмон-усиленной флуоресценции в углеродных точках	59
Муркина А.Д. Исследование эффективности переноса энергии в комплексах AIS квантовых точек с молекулами AL(OH)-сульфоталоцианина	60
Яковлев Д.В. Исследование новых конъюгатов на основе полупроводниковых квантовых точек AIS/ZnS и фотосенсибилизатора фталоцианина алюминия для повышения эффективности фототерапии	61

ТРОЙНЫЕ ГИБРИДНЫЕ ФОТОВОЛЬТАИЧЕСКИЕ ЭЛЕМЕНТЫ НА ОСНОВЕ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК, ПОЛИМЕРОВ И ФУЛЛЕРЕНОВ

Корженевский Ю.Г., Литвин А.П.

Научный руководитель – к.ф.-м.н. Литвин А.П.

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

iuriikorzhenevskii@yandex.ru

Главным структурным элементом солнечной энергетики выступает солнечный элемент (СЭ). Одним из перспективных материалов для создания СЭ являются наноструктуры, так как по стоимости изготовления, удобству использования и многим другим параметрам СЭ на основе наноструктур превосходят традиционные солнечные батареи, изготавливаемые из объёмных полупроводников.

Стандартный органический гибридный солнечный элемент состоит из проводящего полимера р-типа, используемого в качестве проводящей среды для дырок, и производных фуллерена, которые служат в качестве среды для электронов. Данная схема высокоэффективна и подходит для производства солнечных элементов в больших масштабах. Однако акцепторы на основе фуллеренов имеют ряд недостатков: высокая цена, низкая поглощательная способность и склонность к агрегации. Было показано, что полупроводниковые наноструктуры могут служить в качестве акцепторов для электронов в гибридных фотовольтаических устройствах. Благодаря разработке различных протоколов по замене лигандов в жидкой фазе гибридная фотовольтаика на основе полупроводниковых наноструктур пережила возрождение. Данный способ замены лигандов позволяет заменять длинные электрически изолирующие молекулы вокруг квантовых точек (КТ) без повреждения активного слоя будущего солнечного элемента. Сульфид свинца (PbS) – это наиболее подходящий материал для фотовольтаических устройств с КТ, так как нанокристаллы PbS обладают большой поглощательной способностью в видимом и ближнем инфракрасном диапазонах спектра. Процедуры по замене лигандов в жидкой фазе открывают возможность точного контроля над физическими и химическими свойствами КТ PbS, что позволяет создавать высокоэффективные солнечные элементы на их основе.

Полимер P3HT и КТ PbS формируют эффективную донорно-акцепторную пару для использования в гибридных фотовольтаических устройствах. После поглощения света полимером и КТ происходит разделение экситонов на поверхности соприкосновения, полимер и КТ отвечают за перенос дырок и электронов, соответственно. Для приготовления активного слоя солнечных элементов были изготовлены чернила, состоящие из смеси PbS-I и P3HT в массовом соотношении 9/1, соответственно.

Напряжение холостого хода СЭ не превышает 0,3 В, это подтверждает факт того, что процесс разделения заряда неэффективен в двойной смеси P3HT/PbS-I. Введение производных фуллерена может привести к улучшению эффективности подобных гибридных устройств. Чтобы проверить данную гипотезу, были приготовлены тройные смеси P3HT/PbS-I/PCBM с различным содержанием фуллерена. Для формирования требуемого раствора в двойную смесь P3HT/PbS-I были добавлены 1%, 3% и 5% весовых процентов фуллерена. Ток короткого замыкания увеличивается с концентрацией PCBM вследствие улучшения переноса заряда. При добавлении большого количества фуллерена наблюдается снижение напряжения холостого хода (V_{oc}), что может быть обусловлено образованием агрегатов PCBM. Нахождение оптимальной концентрации PCBM позволяет достичь максимальной эффективности солнечных элементов. Введение 3% PCBM в устройство увеличивает ток короткого замыкания (I_{sc}) и V_{oc} вследствие улучшения разделения и переноса заряда. В результате достигается вдвое большая эффективность.

Было установлено, что введение производной фуллерена в смесь полимера и КТ позволяет достичь более эффективного разделения и транспорта носителей заряда. Были созданы опытные образцы трёхкомпонентных СЭ, определено оптимальное соотношение компонентов.

ЛАБОРАТОРИЯ НА ЧИПЕ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ УРОВНЯ ОКСИДАТИВНОГО СТРЕССА НА ОСНОВЕ ЭФФЕКТА ПЛАЗМОН-УСИЛЕННОЙ ХЕМИЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ

Киричек К., Дададжанов Д.Р., Гладских И.А., Варганиян Т.А.

Научный руководитель – д.ф.-м.н., гл.н.с. Варганиян Т.А.

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

ravt-777@mail.ru

В настоящее время одним из наиболее привлекательных методов качественного и количественного анализа различных веществ является хемилюминесцентный метод. Он обладает высокой чувствительностью, не требует специальной подготовки исследуемых веществ к анализу и самое главное не нуждается во внешнем источнике возбуждения, в отличие флуоресцентного метода. Благодаря этим преимуществам хемилюминесцентные методы стали одними из наиболее широко используемых для решения различных биомедицинских и химических задач [1]. Особое внимание было уделено созданию портативных датчиков для выявления различных заболеваний на ранних стадиях. В связи с возрастающими требованиями к миниатюризации, высокой чувствительности и снижению расхода дорогостоящих реагентов, создание компактных и недорогих хемилюминесцентных сенсорных платформ является актуальной задачей и по сей день [2].

Несмотря на все преимущества, сенсорные системы на основе хемилюминесценции имеют существенные недостатки, заключающиеся в слабом и плохо детектируемом сигнале [3]. Для решения этой проблемы и увеличения интенсивности хемилюминесцентного сигнала используются различные химические и физические активаторы. Однако, такие активаторы, подчас, являются достаточно дорогостоящими и трудно синтезируемыми. В настоящей работе для реализации усиления хемилюминесцентного сигнала молекул люминола использовалась саморганизованная метаповерхность из наночастиц серебра на стеклянной подложке, обладающих эффектом плазмонного резонанса и локального усиленного электромагнитного ближнего поля.

На основе полученных данных, свидетельствующих об усилении сигнала хемилюминесценции люминола вблизи серебряной метаповерхности, была разработана лаборатория на чипе, предназначенная для определения оксидативного стресса организма, вызванного избыточной концентрацией активных форм кислорода. Принцип работы созданного устройства базируется на использовании комплекса микрофлюидного чипа и диэлектрической подложки с осажденной серебряной метаповерхностью для реализации быстрого смешения реагентов с последующей регистрацией усиленного хемилюминесцентного сигнала.

- 1 Yan Y., Shi P., Song W., Bi S. Chemiluminescence and Bioluminescence Imaging for Biosensing and Therapy: In Vitro and In Vivo Perspectives // *Theranostics*. – 2019. – V. 9 (№ 14). – P. 4047–4065.
- 2 Xu S., Wang Y., Zhou D. et al. A novel chemiluminescence sensor for sensitive detection of cholesterol based on the peroxidase-like activity of copper nanoclusters // *Sci Rep*. – 2016. – V. 6 (№ 1). – P. 1–7.
- 3 Hananya N., Eldar Boock A., Bauer C. R., Satchi-Fainaro R. & Shabat D. Remarkable Enhancement of Chemiluminescent Signal by Dioxetane–Fluorophore Conjugates: Turn-ON Chemiluminescence Probes with Color Modulation for Sensing and Imaging // *Journal of the American Chemical Society*. – 2016. – V. 138 (№ 40). – P. 13438–13446.

СОЗДАНИЕ КОМПЛЕКСОВ МОЛЕКУЛ AL-СУЛЬФОФТАЛОЦИАНИНА С НАНОЧАСТИЦАМИ ДИОКСИДА КРЕМНИЯ ДЛЯ ФОТОДИНАМИЧЕСКОЙ ТЕРАПИИ

Тиходеева Е.О., Орлова А.О.

Научный руководитель – д.ф.-м.н., доцент Орлова А.О.

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

tikhodeyeva.katya@yandex.ru

Смесь молекул Al-сульфофталочианина (AlPc) с различной степенью сульфирования является основным компонентом препарата Фотосенс®, успешно применяемого для фотодинамической терапии [1]. Этот метод лечения предполагает использование специального вещества (фотосенсибилизатора) и внешнего источника света. Сами по себе эти компоненты не активны, однако их совместное применение, т. е. локальное возбуждение препарата светом, приводит к ряду химических реакций, вызывающих гибель клеток. К сожалению, существует риск, что фотосенсибилизатор будет активирован солнечным или комнатным светом, что приведет к повреждению здоровых тканей [1]. Этот побочный эффект можно сократить за счет повышения селективности накопления фотосенсибилизатора в раковых областях. Существует много методик и подходов позволяющих добиться таргетной доставки препарата, например присоединение антител или производных сахаров [2], однако прямое прикрепление таких векторных молекул к фотосенсибилизатору навсегда эффективно [3]. Все больше работ сообщают о привлекательности использования третьего объекта - носителя, наиболее популярными из которых являются наночастицы (НЧ) [4]. Создание комплексов фотосенсибилизатора с НЧ дает возможность сконцентрировать на поверхности носителя как молекулы препарата, так и векторные молекулы, и, тем самым повысить эффективность доставки активного вещества к дефектным клеткам. Самым простым методом комплексообразования является электростатическое связывание (см. Рис. 1).

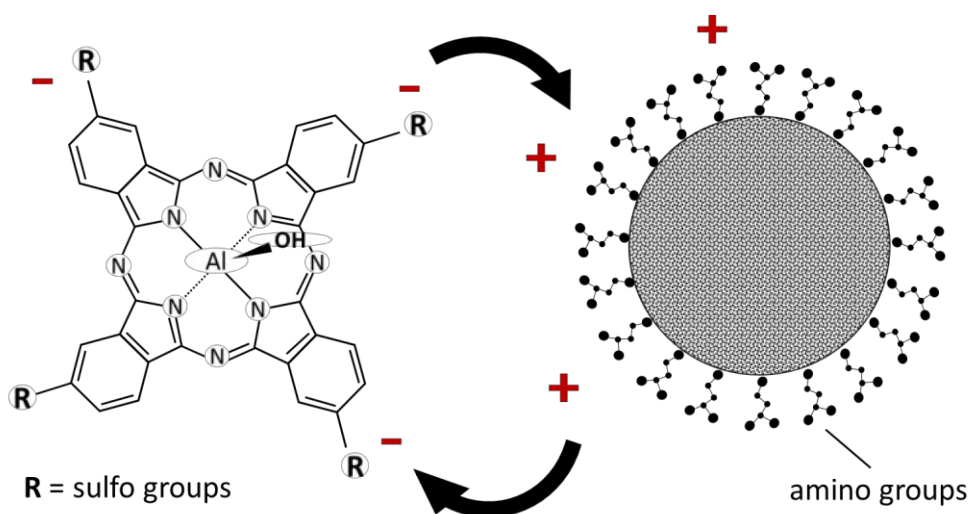


Рисунок 1 – Схематическая иллюстрация образования комплекса между AlPc, содержащим 4 сульфогруппы (sulfo groups), и НЧ с положительно заряженными аминокислотными группами на поверхности (amino groups)

В ходе данной работы за счет электростатического взаимодействия были созданы комплексы молекул AlPc с двумя типами наночастиц (см. Рис. 1): наночастицами пористого диоксида кремния (Si-НЧ) и наночастицами диоксида кремния, допированными квантовыми точками AgInS₂ с оболочкой ZnS (AIS-Si-НЧ). Использование последних позволяло подробнее изучить свойства комплексов за счет анализа резонансного переноса энергии (FRET) от НЧ к молекулам.

Было выявлено, что эффективность комплексообразования компонентов в воде достаточно высока и достигает 95% даже для комплексов, в которых на одну наночастицу приходилось более 2000 молекул. Кроме того, стабильность комплексов AlPc/AIS-Si-НЧ была подтверждена наличием эффективного переноса энергии от AIS квантовых точек к молекулам AlPc. Анализ спектральных

характеристик водных растворов комплексов с обоими типами наночастиц показал, что на их поверхности происходит агрегация АІРс. Было установлено, что агрегаты АІРс, сформированные на поверхности наночастиц, являются нелюминесцирующими Н-агрегатами. Выявлена зависимость степени агрегации АІРс от относительной концентрации компонентов в растворе и способа создания комплексов.

Частым этапом в разработке фотосенсибилизаторов являются исследование их воздействия на клеточные линии. Поэтому в данной работе было также рассмотрено поведение комплексов в питательной клеточной среде. Было показано, что перенос комплексов в питательную среду приводит к постепенной мономеризации молекул АІРс и диссоциации комплексов АІРс/НЧ. Основываясь на результатах исследования, был сделан вывод, что создания комплексов за счет электростатического взаимодействия является спорным выбором, поскольку данный метод связывания компонентов не обеспечивает требуемой стабильности формируемой системы.

- 1 Trushina O.I., Novikova E.G., Sokolov V.V., et al. Photodynamic therapy of virus-associated precancer and early stages cancer of cervix uteri // *Photodiagnosis and Photodynamic Therapy*. – 2008. – V. 5 (№ 4). – P. 256–259.
- 2 Sibani S.A., McCarron P.A., Woolfson A.D., Donnelly R.F. Photosensitiser delivery for photodynamic therapy. Part 2: systemic carrier platforms // *Expert Opinion on Drug Delivery*. – 2008. – V. 5 (№ 11). – P. 1241–1254.
- 3 Kruger C., Abrahamse H. Utilisation of Targeted Nanoparticle Photosensitiser Drug Delivery Systems for the Enhancement of Photodynamic Therapy // *Molecules*. – 2018. – V. 23 (№ 10). – P. 2628–2649.
- 4 Chilakamarthi U., Giribabu L. Photodynamic Therapy: Past, Present and Future. *The Chemical Record*. – 2017. – V. 17. – P. 1–29.

АНОМАЛЬНЫЙ ДИФфуЗИОННЫЙ ПРОФИЛЬ АДАТОМОВ НА ЭКСТРЕМАЛЬНО ШИРОКИХ ТЕРРАСАХ ПОВЕРХНОСТИ Si(111)

Соловьева Е.О.

Научный руководитель – к.ф.-м.н. Роголо Д.И.

Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

eugeniasoloveva11@gmail.com

Неравномерность распределения концентрации адатомов на узких террасах мала (для террас шириной ~ 1 мкм составляет порядка 10^{-5} МС [1], $1 \text{ МС} = 7.8 \times 10^{14} \text{ см}^{-2}$) и экспериментально не регистрируются современными методами. Экспериментальное изучение распределения концентрации адатомов требует использовать только широкие террасы, сопоставимые по размерам с длиной диффузии. Целью данной работы является определение фундаментальных параметров процесса диффузии адатомов на поверхности Si(111).

Экстремально широкие террасы создавались при отжиге образцов при температуре 1070°C и 1090°C в процессе *in situ* экспериментов, проводимых методом сверхвысоковакуумной отражательной электронной микроскопии. Детальный анализ морфологии поверхности образцов с террасами диаметром 70 и 52 мкм проводился методом *ex situ* атомно-силовой микроскопии. На основе полученных сканов в высоком разрешении сформировано панорамное изображение, в результате обработки которого получено пространственное распределение участков террасы по высоте, демонстрирующее симметричность относительно центра террасы. На его основе построено радиальное распределение концентрации адатомов на террасе $n(r)$. В случае образца с диаметром террасы 70 мкм на основе полученного распределения вычислили длину диффузии и коэффициент диффузии. Для образца полученного при 1090°C с диаметром террасы 52 мкм концентрация адатомов в центре составила 0.18 МС, а на краях — 0.42 МС. Данное распределение не описывается теоретической аппроксимацией, предполагающей постоянными коэффициент диффузии D и длину диффузии, как в работе [1].

Для анализа экспериментального распределения $n(r)$ использовано решение стационарного уравнения диффузии в предположении, что D не является постоянной величиной. На основе численного решения этого уравнения для распределения концентрации адатомов на террасе диаметром 52 мкм получена зависимость D от экспериментально измеренного $n(r)$ на террасе. Показано, что коэффициент поверхностной диффузии уменьшается от $140 \text{ мкм}^2/\text{с}$ в центре террасы до $5 \text{ мкм}^2/\text{с}$ возле края.

- 1 Pang A.B., Man K.L., Altman M.S., Stasevich T.J., Szalma F., Einstein T.L. Step line tension and step morphological evolution on the Si(111) (1x1) surface // Physical Review B. – 2008. – V. 77 (№ 11). – P. 115424.

ЛЮМИНЕСЦЕНТНАЯ МИКРОСКОПИЯ ДЛЯ ОЦЕНКИ ИЗМЕНЕНИЯ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ СВОЙСТВ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК

Чернецова И.А., Колесова Е.П., Орлова А.О.

Научный руководитель – к.ф.-м.н. Колесова Е.П.

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

irinadubrovskaya@mail.ru

Полупроводниковые нанокристаллы, в частности, квантовые точки CdSe, являются традиционными неорганическими люминофорами с хорошо изученными оптическими свойствами и обладающие высокой фотостабильностью. Как эффективные люминофоры они используются для создания люминесцентных меток и сверхчувствительных сенсоров, элементов солнечных батарей, а также применяются в биомедицинской диагностике. Зачастую функциональность структур на основе КТ оценивается по изменению люминесцентных свойств КТ, и анализ этих изменений важен при разработке практических приложений на их основе. Для нестандартных образцов, к которым относятся сухие слои и образцы с низкой концентрацией, оценка изменения люминесцентных свойств с использованием спектрофлуориметров часто невозможна. Цель настоящей работы состоит в разработке методики оценки изменения люминесцентных свойств КТ методами люминесцентной микроскопии и выявлении корреляции кинетики затухания люминесценции при контролируемом изменении их люминесцентных свойств.

В качестве образцов использовались коллоидный раствор и сухие слои CdSe/ZnS КТ диаметром ~5 нм. Люминесцентные свойства образцов исследовались тремя независимыми методиками: с помощью спектрофлуориметра Cary Eclipse, конфокального микроскопа LSM-710 и по кинетике затухания люминесценции на микроскопе MicroTime 100. Для возбуждения люминесценции во всех трех случаях использовалось излучение с длиной волны ~405 нм, но при разных характеристиках источника излучения. Известно, что КТ характеризуются мультиэкспоненциальным затуханием люминесценции, поэтому в качестве референтного образца использовался раствор флуоресцеина в диметилсульфоксиде. Концентрация образцов была достаточно низкой (концентрация CdSe/ZnS КТ $2,6 \cdot 10^{-7}$ моль; концентрация красителя $\sim 10^{-6}$ моль), чтобы исключить явления перепоглощения. Использовалось два подхода по изменению люминесцентных свойств КТ: изменение концентрации люминофора и воздействие внешним излучением, лежащим в области поглощения КТ.

Анализ данных показал, что при изменении концентрации люминофора наблюдается хорошая корреляция экспериментальных результатов всех трех измерений как для флуоресцеина, так и для CdSe/ZnS КТ. В случае изменения люминесцентных свойств образцов под действием фотоиндуцированных процессов наблюдаются принципиальные отличия. Результаты, полученные по анализу кинетики затухания люминесценции КТ, значительно отличаются от других. Это связано с тем, что в данном случае происходит изменение люминесцентных свойств каждого люминофора в ансамбле, в то время как при изменении концентрации раствора свойства отдельных КТ не меняются. Следует отметить, что при переходе к сухим слоям КТ различия становятся более существенными. При этом и характерные времена затухания люминесценции в сухих слоях значительно отличаются от раствора КТ. Наиболее вероятной причиной наблюдаемых различий является взаимодействие между КТ в сухих слоях. В частности, перенос энергии между КТ: эффективность данного процесса значительно увеличивается за счет уменьшения дистанции между донором и акцептором при формировании плотноупакованного слоя. Очевидно, что в данном случае нельзя использовать кинетику затухания люминесценции для оценки изменения люминесцентных свойств КТ и необходимо разработать методику, учитывающую отличительные особенности КТ.

Продемонстрировано, что анализ изменения люминесцентных свойств КТ по кинетике затухания люминесценции не всегда корректен. При оценке изменения люминесцентных свойств коллоидного раствора КТ с изменением концентрации люминофора экспериментальные данные, полученные со спектрофлуориметра, сопоставимы с данными и конфокального микроскопа, и по кинетике затухания люминесценции. Однако, изменяя люминесцентные свойства под действием фотоиндуцированных процессов для нестандартных образцов наблюдается несоответствие данных всех измерений, при этом

степень различия оцененных данных по кинетике затухания люминесценции значительно увеличивается при переходе от раствора к сухим слоям.

В продолжении работы будет разработана методика, позволяющая корректно оценивать изменение люминесцентных свойств КТ по кинетике затухания люминесценции.

ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК КОМПОЗИТНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПЕРОВСКИТНЫХ НАНОКРИСТАЛЛОВ CsPbBr₃

Азизов Р.Р.

Научный руководитель – к.ф.-м.н., доцент, Ушакова Е.В.

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

azizov.ruslan.2008@mail.ru

По сравнению с традиционными полупроводниковыми квантовыми точками, лазерная генерация в материалах на основе нанокристаллов перовскита (НК) наблюдается при более низких пороговых значениях, и возможна оптическая накачка через многофотонное поглощение. Эти особенности могут быть использованы в разработке когерентных источников света, а также для визуализации в сильно рассеивающих средах, таких как биологические ткани. Для повышения стабильности оптических свойств перовскитных нанокристаллов, была разработана методика синтеза люминесцентных композитных материалов на основе НК CsPbBr₃, внедренных в пористые микросферы (МС) диоксида кремния. В работе исследовалась устойчивость композитных микросфер к хранению в условиях окружающей среды и интенсивного воздействия ультрафиолетового излучения при применении различных растворителей. Также был проведён синтез гибридных наноматериалов на основе НК и кремнеземных МС с различным поверхностным интерфейсом. Образцы были получены путём химической обработки НК и МС тетраэтилортосиликатом (ТЕОС) или HCl.

НК были синтезированы по методике, опубликованной ранее. Были получены две партии НК с размером 10 ± 3 и 18 ± 4 нм, соответственно. Был проведён синтез монодисперсных пористых сферических микрочастиц диоксида кремния (SiO₂) диаметром 0,5 и 1,1 мкм. Средний диаметр пор составил 19 нм для малых и 20-100 нм для больших сфер. Для получения композита НК+МС, исходный раствор НК добавляли к промытым МС. Для исследования влияния границы раздела между МС и НК на оптические свойства композита, были приготовлены МС, обработанные ТЕОС и HCl и обозначенные далее как НК+МС/ТЕОС и НК+МС/HCl, соответственно. Форма полос в спектрах поглощения и ФЛ образцов НК+МС практически не изменилась в сравнении со спектрами НК в растворе. Для образцов, осажденных из растворителей с более высокой полярностью, наблюдается небольшое синее смещение полос поглощения и ФЛ. Среднее значение времен затухания ФЛ полученных от отдельных МС составило $4,8\pm 1,5$ нс. Следует отметить, что время затухания ФЛ исходного коллоидного раствора НК составило $6,7\pm 1,0$ нс. Следовательно, встраивание НК в МС диоксида кремния не приводит к значительному увеличению безызлучательных каналов релаксации для фотовозбужденных носителей заряда. Исследование влияния интерфейса НК/МС на процесс внедрения НК в матрицу показало, что процент внедренных НК увеличивается в ряду НК+МС/HCl, НК+МС и НК+МС/ТЕОС. В то же время для образцов, сформированных с обработанными МС, в отличие от образца НК+МС, наблюдается агломерация МС, что указывает на наличие сил связывания обработанных МС. В то же время граница раздела между НК и МС играет большую роль в образовании связей между НК и матрицей, а также влияет на их излучательные переходы. HCl-обработка МС приводит к более слабому проникновению НК внутрь МС вместе с увеличением безызлучательных каналов рекомбинации носителей заряда в НК. Напротив, в образце НК+МС/ТЕОС наблюдается образование большего числа связей на границе раздела НК-МС и увеличение времени затухания ФЛ при почти неизменном стационарном спектре излучения.

В данной работе были разработаны методы создания композитных люминесцентных материалов на основе перовскитных НК CsPbBr₃, внедренных в пористые МС диоксида кремния. Было исследовано влияние растворителя на люминесцентные отклики композитного материала. Оптические свойства НК перовскита хорошо сохранялись благодаря защитной матрице. Обработка МС молекулами ТЕОС с последующим внедрением НК привело к улучшению скорости проникновения НК, а также к улучшению оптических параметров, таких как время затухания ФЛ.

ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ТОНКИХ ПЛЕНОК ОКСИДА ЦИНКА С ЦЕЛЬЮ СЕНСОРНЫХ ПРИМЕНЕНИЙ

Комиссаров М. Д., Леонов Н.Б.

Научный руководитель – к.ф.-м.н Леонов Н.Б.

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

komissarov@i-sensor.ru

На текущий момент оксид цинка (ZnO) занимает одно из лидирующих мест по широте использования среди прочих полупроводников вследствие химической и температурной стабильности, относительной простоты получения и низкой стоимости. ZnO применяется во многих областях техники: электронных приборах, газовых сенсорах, солнечных элементах и ряде других. Несмотря на то, что исследования оптических свойств ZnO ведутся уже длительное время и насчитывают огромное количество экспериментов, предложенная нами структура (слой островковой пленки металлического цинка на кварцевой подложке, “одетый” в оболочку из оксида цинка) может оказаться инновационной и обладать новыми, еще неизученными свойствами. Такая структура может быть применима в высокочувствительных люминесцентных газовых сенсорах небольших размеров, что и является конечной целью нашей работы.

Получение исходных пленок металлического цинка проходило посредством лазерной абляции в вакуумной камере, что является простым, надежным и не требующим больших финансовых затрат методом, относительно других способов получения тонких пленок, например эпитаксиальным методом. Также, благодаря расположению в вакуумной камере кварцевой подложки под углом к мишени позволило получать пленки с переменной толщиной на одном образце (рис. 1) и проводить исследование оптических свойств в зависимости от толщины пленки.

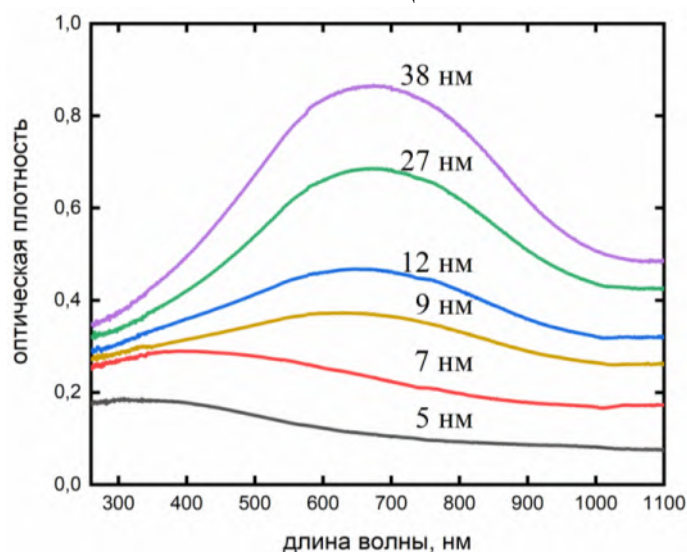


Рисунок 1 – Спектры оптической плотности плёнки цинка с переменной толщиной, полученной на первом образце. Толщины плёнки указаны у кривых

Люминесцентные свойства ZnO исследовались двумя способами: при возбуждении с помощью ксеноновой лампы в спектрофлуориметре Shimadzu RF-5301PC и с возбуждением с помощью третьей гармоники (355 нм) Nd:YAG-лазера в вакуумной камере, что позволило наблюдать изменение люминесценции в различных газовых средах.

Полученные нами результаты позволят более глубоко понять природу люминесценции оксида цинка и как следствие, перейти к прикладным применениям люминесцентных свойств в качестве сенсоров, чувствительных к различным газам.

ENERGY TRANSFER BETWEEN QUANTUM DOTS AND PORPHYRIN IN NANOCOMPOSITES PASSIVATED BY BIOPOLYMER

Sewid F.A.

Научный руководитель – проф., д.ф.м.н. Орлова А.О.

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

fayzaomar8891@gmail.com

Nanocomposites based on CdSe/ZnS QDs and porphyrin molecules passivated by chitosan were formed. The nanocomposite showed a high singlet oxygen generation compared to free porphyrin at the same concentration. Simultaneously, it was demonstrated that the FRET efficiency from QDs to porphyrin in nanocomposites is close to 50%.

Porphyrins and their derivatives are mostly used as photosensitizers (PSs) in photodynamic therapy (PDT) of oncology diseases due to their unique properties, e.g., the high quantum yield of singlet oxygen (SO) generation and efficient accumulation in tumor cells. Nevertheless, they have some drawbacks, e.g., low solubility in water, the release of phototoxic products, and slow excretion from the body.

In the last decades, hybrid nanostructures based on PSs and various nanoparticles have been actively studied because a combination of PSs with nanoparticles allows a significant improvement of PSs' functional properties. PSs' challenges can be efficiently overcome using a combination of PS with colloidal semiconductors quantum dots (QDs) as a platform for developing new and effective drug systems for PDT. QDs have unique optical and chemical properties. The application of a QDs-porphyrin hybrid structure is easily aggregated in aqueous media and is usually greatly hampered by the toxicity of the structure.

A combination of porphyrin with QDs, and then encapsulated in the cationic biopolymers such as chitosan and yield the water-soluble and biocompatible nanocomposite to improve its delivery and distribution in the cells.

Chitosan is a natural polysaccharide derived from natural sources and it has interesting properties such as biodegradability, biocompatibility, bioactivity, and nontoxicity. Chitosan is used as a stabilizing agent and a carrier for photocatalysts, and photosensitizers and encapsulated quantum dots has been developed in recent years. QDs-porphyrin nanocomposites will show promising results in PDT in terms of transferring the hybrid structures to aqueous media with retaining their photophysical properties.

In this work, we demonstrate a new approach to form nanocomposites based on CdSe/ZnS QDs-porphyrin in chitosan solution. The encapsulation of QDs-porphyrin nanocomposites with chitosan has significant characteristics, such as making these structures biocompatible, improving photophysical properties, decreasing the distance between QDs and porphyrin, and enhancement the efficiency of SO generation.

ВЛИЯНИЕ ВОДОРАСТВОРИМЫХ ЛИГАНДОВ НА СТАБИЛЬНОСТЬ И ФОТОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЧЕТВЕРНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК ZAIS

Миропольцев М.А., Баранов А.В.

Научный руководитель – д.ф.-м.н., проф. Баранов А.В.

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

miropoltsev_m@niuitmo.ru

Четверные квантовые точки ZnAgInS (КТ ZAIS) являются ярким примером низкотоксичных коллоидных флуоресцентных полупроводниковых нанокристаллов со структурой халькопирита. Они излучают в ближней ИК области спектра с высоким квантовым выходом, имеют широкие полосы излучения, большие стоксовы сдвиги, а также микросекундные времена жизни, зависящие от длины волны. За счет своих уникальных фотофизических свойств КТ ZAIS могут использоваться в оптоэлектронике, биосенсинге и имиджинге [1].

Обычно КТ ZAIS с лучшими оптическими свойствами синтезируются в органических растворителях. Чтобы использовать их в биологических решениях, наночастицы необходимо сделать водорастворимыми. Самый простой метод — это замена исходных гидрофобных лигандов на гидрофильные. Этот подход позволяет сохранить небольшой общий размер КТ и снижает риск цитотоксических эффектов. В то же время известно, что процесс замены лигандов может влиять на фотофизические свойства и приводить к тушению люминесценции. Этот эффект может зависеть, в частности, от типа якорной группы и силы связи лигандов с поверхностью наночастицы [2].

В настоящей работе мы исследовали влияние процедуры замены лигандов на фотофизические свойства КТ ZAIS с использованием моно-, би- и тридентатных тиольных лигандов. При помощи спектроскопии поглощения и фотолюминесценции (стационарной и время-разрешенной), а также измерения динамического рассеяния света и дзета-потенциала, мы достигли лучшего понимания влияния плотности, силы связи и типа используемых водорастворимых лигандов на фотофизические и коллоидные свойства КТ ZAIS. Для каждого типа лигандов мы определили оптимальные параметры, которые позволили нам провести серию успешных процедур замены. Переведенные в воду квантовые точки были стабильны в водных растворах без агрегации не менее двух месяцев. Мы также исследовали коллоидную стабильность КТ ZAIS после замены лигандов с использованием техники динамического рассеяния света и метода последовательного разбавления. Выводы, сделанные в этой работе, полезны для оптимизации процедуры замены лигандов, которая позволит получать стабильные водорастворимые КТ с высоким квантовым выходом фотолюминесценции после межфазового перевода из органического растворителя.

- 1 Moodelly D., Kowalik P., Bujak P., Pron A., Reiss P. Synthesis, photophysical properties and surface chemistry of chalcopyrite-type semiconductor nanocrystals // *Journal of Materials Chemistry C*. – 2019. – V. 7 (№ 38). – P. 11665–11709.
- 2 Heuer-Jungemann A., Feliu N., Bakaimi I., Hamaly M., Alkilany A., Chakraborty I., Masood A., Casula M. F., Kostopoulou A., Oh E., Susumu K., Stewart M. H., Medintz I. L., Stratakis E., Parak W. J., Kanaras A. G. The Role of Ligands in the Chemical Synthesis and Applications of Inorganic Nanoparticles // *Chemical Reviews*. – 2019. – V. 119 (№ 8). – P. 4819–4880.

ИССЛЕДОВАНИЕ ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ НАНОКОМПОЗИТОВ ХИТОЗАН- TiO₂ ДЛЯ РАЗЛОЖЕНИЯ ОТДЕЛЬНЫХ ПРЕДСТАВИТЕЛЕЙ ПАУ

Татаринов Д.А., Сокольникова С.Р., Мыслицкая Н.А.

Научный руководитель – к.ф.-м.н., доцент Мыслицкая Н.А.

ФГБОУ ВО «Калининградский государственный технический университет», Калининград, Россия
dan.tatarinov@mail.ru

Полициклические ароматические углеводороды (ПАУ) - соединения, присутствующие в окружающей среде повсеместно и являющиеся опасными загрязнителями. Данные вещества представляют опасность даже в небольших количествах из-за свойств биоаккумуляции. Таким образом, актуальным представляется исследование методов разложения (деградации) ПАУ, в частности, с использованием фотокаталитических реакций.

В данной работе в качестве фотокатализатора были использованы наночастицы TiO₂ (НЧ TiO₂), которые обладают высокой фотокаталитической активностью и демонстрирует потенциальные преимущества при окислении экотоксикантов, в том числе из группы ПАУ.

Целью настоящей работы является разработка биополимерных нано-композитов (НК) на основе хитозана (ХТЗ) с использованием TiO₂ и исследование их свойств для фотокаталитического разложения ПАУ в водных средах. НЧ TiO₂ были изготовлены методом лазерной абляции ($d_{cp} \approx 21$ нм). Они вводились в состав матриц из ХТЗ с массовой долей $\omega_{TiO_2} = 0.15, 0.5, 1\%$ мас. от ХТЗ. В качестве репрезентативного соединения ПАУ был выбран пирен. Для солюбилизации ПАУ использовался водный раствор натрия диоктилсульфосукцината (ДСН) в концентрации 10^{-2} М, $C_{пирена} = 10^{-6}$ М. Для проведения исследований из изготовленных НК получали образцы размером 3x3 см, которые погружались в раствор ПАУ и в течение 60 минут находились под воздействием УФ излучения (УФ-лампа, $P=26$ Вт, $\lambda=365-395$ нм). Оценка кинетики деградации ПАУ на НК ХТЗ-TiO₂ проводилась с помощью люминесцентного анализа на модульной системе HORIBA Fluorolog-3.

Графики кинетики фотодеградации псевдо-первого порядка для растворов пирена представлены на рис. 1. В данном случае C_t - концентрация пирена в растворах после УФ-облучения НК за время t , C_0 – соответственно, начальная концентрация пирена до обработки УФ излучением ($t_0 = 0$ мин). Из графиков видно, что образцы НК ХТЗ-TiO₂ проявляют значительно более сильную фотокаталитическую активность по сравнению с контрольными образцами ($\omega_{TiO_2} = 0\%$ мас.). Наибольшую эффективность демонстрируют образцы с добавлением $\omega_{TiO_2} = 1\%$ мас., в данном случае концентрация пирена в растворе ДСН снизилась на 68% через $t=60$ мин. под воздействием УФ излучения.

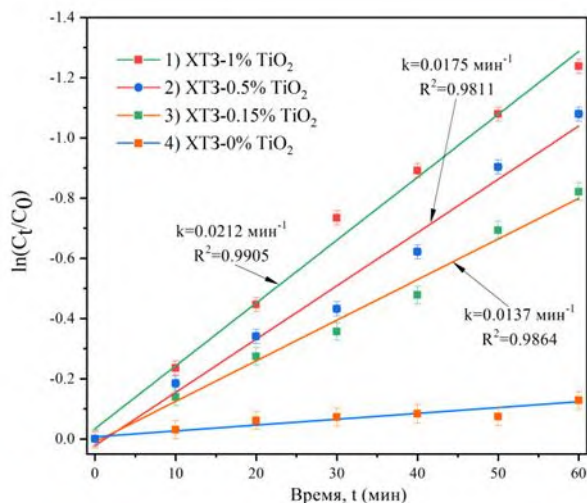


Рисунок 1 – Кинетика деградации пирена на нанокompозитах ХТЗ-TiO₂

Серия проведенных экспериментов свидетельствует об эффективности разложения пирена в водных средах благодаря фотокаталитическим свойствам НЧ TiO₂ в составе разработанных НК. За 60 минут под УФ излучением с помощью НК ХТЗ-TiO₂ удалось добиться снижения концентрации пирена

на 68% по сравнению с контрольными образцами, при этом константа скорости деградации находилась на уровне $k=0,0212 \text{ мин}^{-1}$.

Разработанные НК ХТЗ- TiO_2 являются перспективными фотокаталитическими материалами для разложения пирена в водных средах. Они могут быть использованы для фотодegradации других опасных для человека ПАУ. Методика изготовления разработанных НК не требует дорогостоящего оборудования, а также они удобны в применении для проведения фотокаталитических реакций.

ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК $\text{AgInS}_2/\text{ZnS}$ В КОМПЛЕКСАХ $\text{Fe}_3\text{O}_4@ \text{CaCO}_3$

Куршанов Д.А., Арефина И.А., Степанова М.С., Киричек К., Дубовик А.

Научный руководитель – к.х.н., доцент Дубовик А.

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

kurshanov.danil@gmail.com

Основными направлениями в современной нанотехнологии являются исследования многофункциональных гибридных систем, которые могут одновременно выполнять несколько задач [1,2]. Одним из примеров подобных композитов выступают гибридные системы, объединяющие магнитных и фотолюминесцентных свойства различных наноматериалов. Основная область использования подобных систем – биологические приложения. Синтез биосовместимых суперпарамагнитных материалов уже давно играет важную роль в биомедицинских приложениях, включая магнитно-резонансную томографию для клинической диагностики, магнитную доставку лекарств, терапию рака и иммобилизацию ферментов [3–7]. Добавление в системе компонентов с оптическими свойствами позволит контролировать и визуализировать процессы в биологических и медицинских исследованиях.

В качестве визуализирующих материалов в работе используются полупроводниковые трехкомпонентные нанокристаллы $\text{AgInS}_2/\text{ZnS}$ типа ядро/оболочка. Магнитные свойства формируются за счет использования суперпарамагнитных наночастиц оксида железа (Fe_3O_4). Объединение свойств магнитных наночастиц Fe_3O_4 с фотолюминесцентными свойствами квантовых точек $\text{AgInS}_2/\text{ZnS}$, для создания гибридной магнитно-люминесцентной системы, осуществляется на основе пористых микросфер карбоната кальция (CaCO_3).

В работе представлены исследования оптических свойств трехкомпонентных полупроводниковых квантовых точек $\text{AgInS}_2/\text{ZnS}$ на поверхности микросфер CaCO_3 допированные магнитными наночастицами Fe_3O_4 с различной концентрацией.

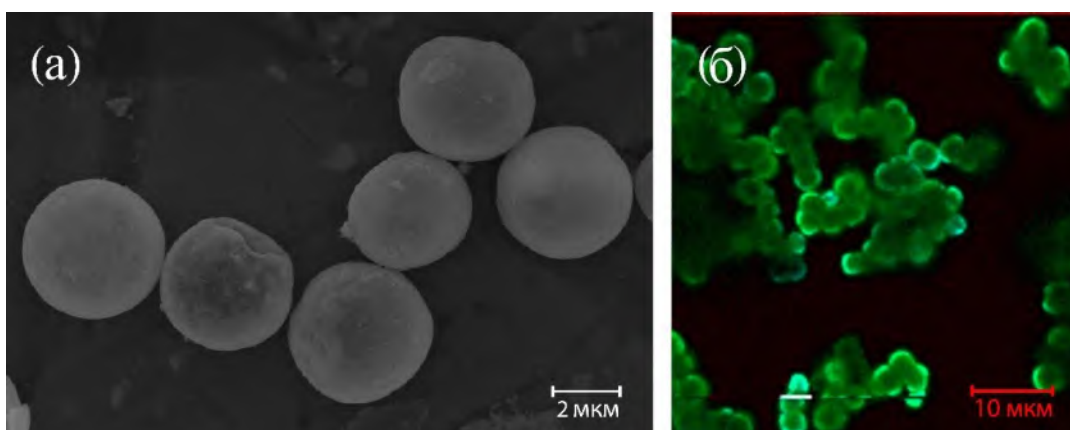


Рисунок 1 – (а) SEM изображение гибридного магнитно-люминесцентного комплекса $\text{CaCO}_3\text{-Fe}_3\text{O}_4\text{-AgInS}_2/\text{ZnS}$; (б) Изображение карты времён затухания фотолюминесценции комплексов $\text{CaCO}_3\text{-Fe}_3\text{O}_4\text{-AgInS}_2/\text{ZnS}$.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-33-90250.

- 1 Broy M. Multifunctional software systems: Structured modeling and specification of functional requirements // *Science of Computer Programming*. – 2010. – V. 75 (№ 12). – P. 1193–1214.
- 2 Kim D. et al. Synthesis and biomedical applications of multifunctional nanoparticles // *Advanced Materials*. – 2018. – V. 30 (№ 49). – P. 1802309.
- 3 Figuerola A. et al. From iron oxide nanoparticles towards advanced iron-based inorganic materials designed for biomedical applications // *Pharmacological Research*. – 2010. – V. 62 (№ 2). – P. 126–143.

- 4 Sperling R. A., Parak W. J. Surface modification, functionalization and bioconjugation of colloidal inorganic nanoparticles // Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. – 2010. – V. 368 (№ 1915). – P. 1333–1383.
- 5 Martynenko I.V. et al. Magneto-fluorescent microbeads for bacteria detection constructed from superparamagnetic Fe₃O₄ nanoparticles and AIS/ZnS quantum dots // Analytical chemistry. – 2019. – V. 91 (№ 20). – P. 12661–12669.
- 6 Arsalani S. et al. Magnetic Fe₃O₄ nanoparticles coated by natural rubber latex as MRI contrast agent // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2019. – V. 475. – P. 458–464.
- 7 Rajkumar S., Prabakaran M. Multi-functional core-shell Fe₃O₄@ Au nanoparticles for cancer diagnosis and therapy // Colloids and Surfaces B: Biointerfaces. – 2019. – V. 174. – P. 252–259.

НЕДЕСТРУКТИВНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОТНОШЕНИЯ ЗАРЯДА К МАССЕ МИКРОЧАСТИЦ В КВАДРУПОЛЬНОЙ ЛОВУШКЕ ПАУЛЯ

Рыбин В.В., Семьинин М.С.

Научный руководитель – д. ф.-м. н., профессор Рождественский Ю.В.

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

vryb1n@yandex.ru

Исчерпывающая характеристика одиночных мезоскопических объектов по сей день остаётся непростой задачей [1, 2]. В настоящем тезисе будет рассмотрена апробация неdestructивного метода анализа микрочастиц [3]. В этой работе впервые описана принципиальная возможность неdestructивного анализа одиночных микрообъектов с определением массы, размера и заряда. Метод анализа заключается в изучении эффектов нелинейной динамики (расширенных орбит) одиночных объектов, пленённых в поле квадрупольной ловушки Пауля. Возможность характеристики объектов с помощью настоящего принципа является слабо изученной, и требует дальнейшего исследования и тестирования.

Цель работы – провести верификацию неdestructивного метода анализа микрообъектов путём определения отношения заряда к массе одиночной заряженной микрочастицы одновременно двумя независимыми методами. Тестируемый метод – неdestructивный метода анализа, основанный на интерпретации формы расширенной орбиты пленённой частицы [3]. Отношение заряда к массе объекта исследования можно представить в виде:

$$\frac{Q}{m} = \frac{qr_0^2\omega^2}{2V}, \quad (1)$$

где Q – заряд объекта исследования, m – масса объекта исследования, q – безразмерный коэффициент формы расширенной орбиты, r_0 – внутренний радиус квадрупольной ловушки Пауля, ω – частота переменного электрического удерживающего поля, V – переменное электрическое напряжение на стержневых электродах.

Контрольный метод – основан на компенсации силы тяжести заряженной частицы силами электростатического взаимодействия вдоль оси квадрупольной ловушки Пауля. Баланс между силой тяжести и силами кулоновского взаимодействия напрямую связан с отношением заряда к массе объекта исследования:

$$\frac{Q}{m} = \frac{g(R^2 + z^2)^{3/2}}{UR^2}, \quad (2)$$

где g – ускорение свободного падения, R – радиус торцевого электрода квадрупольной ловушки Пауля, z – высота расположения частицы над торцевым электродом, U – постоянное электрическое напряжение на торцевом электроде.

Последовательно, для одиночных пленённых заряженных микросфер боросиликатного стекла отношение заряда к массе Q/m было определено одновременно тестируемым и контрольным методами. Оба подхода к анализу дали результат, отличающийся не более чем на 10%. Результаты верификации являются удовлетворительными и побуждают к более глубокому изучению неdestructивного метода анализа. В дальнейшем планируется набор экспериментальной статистики, калибровка метода и определение погрешностей измерений.

- 1 Slavov N. Single-cell protein analysis by mass spectrometry // Current Opinion in Chemical Biology. – 2021. – V. 60. – P. 1–9.
- 2 Xiong C. et al. Mass, size, and density measurements of microparticles in a quadrupole ion trap // Analytical chemistry. – 2019. – V. 91 (№ 21). – P. 13508–13513.
- 3 Rybin V., Rudyi S., Kokorina O. Nondestructive microparticle analysis method // Vibroengineering procedia. – 2020. – V. 32. – P. 156–159.

РАСЧЕТ ПАРАМЕТРОВ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУР С АСИММЕТРИЧНЫМИ КВАНТОВЫМИ ЯМАМИ ДЛЯ ОТВОДА ТЕПЛОВОЙ ЭНЕРГИИ

Ридер М.А.

Научный руководитель – к. ф.-м. н., доцент Иванов А.В.

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

riderm24@mail.ru

В настоящее время существует тенденция уменьшения размеров оптоэлектронных устройств, они становятся мощнее, а плотность размещенных элементов увеличивается. Чтобы элементы могли корректно работать и не разрушаться необходимо отводить выделяемую ими тепловую энергию. Существуют несколько методов охлаждения: воздушное охлаждение, жидкостное охлаждение, термоэлектрическое охлаждение, антистоксовое охлаждение и опто-термоэлектрическое охлаждение. Наиболее эффективным способом охлаждения для полупроводниковых материалов является термоэлектрическое, реализуемое с помощью элементов Пельтье. Вместе с тем, во время работы элемента Пельтье в малоразмерных оптоэлектронных схемах существует необходимость отвода тепла от самих элементов Пельтье. В настоящей работе для этих целей рассматривается полупроводниковая структура с асимметричными квантовыми ямами реализующая механизм опто-термоэлектрического охлаждения. Основным процессом этого механизма является туннелирование носителей заряда с участием оптического фонона.

В настоящей работе была рассмотрена структура на основе двух полупроводников InSb и GaAs с уменьшающейся толщиной потенциальных ям, из-за чего энергия нижнего уровня увеличивается от ямы к яме и создаётся лестничная структура. Энергия между уровнями соседних квантовых ям равна энергии оптического фонона, и электроны могут туннелировать из одной ямы в другую с поглощением фонона. Конец структуры с широкими квантовыми ямами прикладывается к нагретому телу, и в первой яме происходят либо многофононные межзонные переходы для узкозонных полупроводников, либо оптический переход для широкозонных полупроводников. Спустя время, из-за избытка электронов в конце структуры, создаётся электрическое поле, под действием которого электроны в зоне проводимости и дырки в валентной области двигаются навстречу друг другу и в результате рекомбинируют в определённом слое структуры. Таким образом, тепловая энергия выводится из структуры в виде света. В данной работе выполнены численные расчеты скоростей туннелирования электронов между двумя квантовыми ямами при различных параметрах ям для двух разных полупроводниковых материалов и построены различные зависимости скоростей туннелирования электронов от параметров структуры.

Полученные результаты могут быть использованы для расчета полупроводниковых структур, имеющих потенциал применения для охлаждения различных полупроводников устройств, включая элементы Пельтье. Скорость туннелирования электронов в гетероструктуре на основе InSb при широких ямах на два порядка выше, чем в гетероструктуре на основе GaAs при одинаковых ширинах барьеров и ширинах первых квантовых ям. При узких ямах (на правой границе многоямной структуры) скорости туннелирования электронов с поглощением фонона становятся сравнимыми по величине.

ОСОБЕННОСТИ ИССЛЕДОВАНИЯ СРЕЗОВ СОЛНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ НА ОСНОВЕ НАНОКРИСТАЛЛОВ МЕТОДОМ РАСТРОВОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ МИКРОСКОПИИ

Камшилов Г.Н., Парфенов П.С.

Научный руководитель – к.т.н., доцент Парфенов П.С.

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

kamshilov.georgii@gmail.com

Работа посвящена изучению методов приготовления срезов солнечных элементов (СЭ) и специфики их исследования на растровом электронном микроскопе (РЭМ, SEM). В качестве метода получения кросс-секций СЭ выбрано охлаждение образца в жидком азоте с последующим расколом. Проведен анализ приготовленных срезов образцов солнечных элементов на основе нанокристаллов PbS с различной структурой активного слоя.

Создание новых гибридных материалов и их применение для изготовления более совершенных солнечных элементов является популярной темой. Однако существует проблема получения информации о механизмах образования и морфологии слоев, получающихся при синтезе необходимой структуры СЭ. По этой причине, не прекращаются поиски методов тестирования, которые сочетали бы в себе визуализацию и подходили для полуколичественного анализа, но были бы дешевле и достаточно простыми в исполнении.

Получение изображений поперечных сечений солнечных элементов - один из эффективных способов детального изучения структуры устройства и наблюдения за влиянием механизмов старения на структуру устройства. Для такого анализа доступно несколько методов визуализации, таких как оптическая микроскопия, растровая электронная микроскопия (SEM) и просвечивающая электронная микроскопия (TEM). SEM позволяет исследовать при сканировании поперечного скола микроструктуру различных слоев СЭ.

На данный момент, наиболее совершенным, является метод получения высококачественных кросс-секций ионным травлением с помощью установки с фиксированным ионным пучком (FIB), встраиваемой в растровый электронный микроскоп. Тем не менее, несмотря на возможность контроля качества срезов, получаемых в режиме реального времени, существует необходимость разработки более простых и дешевых методов получения кросс-секций. В качестве альтернативного метода получения срезов СЭ в данной работе применяется охлаждение образцов в жидком азоте с последующим расколом.

Изучены условия для исследования СЭ на растровом электронном микроскопе (РЭМ). Во-первых, исследуемые объекты должны иметь подходящий размер, ограниченный размерами шлюза рабочей камеры и быть устойчивыми к облучению пучком электронов с дозой около 10^3 мкКл/см². Во-вторых, поскольку исследования проводятся в вакуумной камере, образцы должны быть стабильны и не возгоняться/испаряться при давлении 10^{-4} Па. Наконец, исследуемые образцы не должны способствовать избыточному накоплению заряда, и их удельное сопротивление не должно превышать величину 10^4 Ом/см.

С другой стороны, наличие в структуре проводящих электродов делает необязательным дополнительное покрытие проводящими пленками (при правильном заземлении), что необходимо для предотвращения заряда поверхности. Рекомендующим режимом является работа в режиме низкого ускоряющего напряжения или низкого вакуума.

Проведен анализ кросс-секций солнечных элементов на основе нанокристаллов PbS с добавлением органических материалов (P3HT, P7BM). Рассматривается видимая однородность слоев и отклонение толщины от расчетной.

Проанализирован метод получения срезов солнечных элементов посредством замораживания образцов в жидком азоте. Получены изображения кросс-секций поверхностей солнечных элементов на основе нанокристаллов. Изучены структуры СЭ.

В результате работы освоен простой метод исследования структуры солнечных элементов на основе нанокристаллов.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕНДРИТНЫХ СТРУКТУР И ИХ ФРАКТАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ

Натальин Н.В.

Научный руководитель – д.ф.-м.н., проф. Рождественский Ю.В.

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

natalin99@mail.ru

На сегодняшний день процессы самоупорядочения имеют большую актуальность в сфере оптических наноматериалов в силу своей простоты, универсальности и низкой стоимости. Одним из объектов, формирующихся в процессах самоупорядочения, являются дендритные структуры. Дендритные структуры являются интересными объектами в силу своих эффектов: неоднородность распределения квантовых точек по размерам, перенос энергии от периферии структуры к ее центру.

Моделирование дендритных структур позволяет предсказать возможную форму образующегося кластера, используя лишь алгоритмы и язык программирования. Кроме того, важной количественной характеристикой является фрактальная размерность, которая вычисляется методом «box-counting».

В рамках настоящей работы были смоделированы дендритные структуры с помощью языка программирования «Python» при разных условиях формирования. В конечной части работы были рассчитаны фрактальные размерности полученных структур.

В первой части работы приведены дендритные структуры, полученные при обычных критериях метода «ограниченной диффузией агрегации». Полученные три дендрита оказались не похожи друг на друга, несмотря на то, что они формировались при одинаковых условиях.

Во второй части работы было проведено моделирование дендритов при больших крестообразных затравках. Также, было рассмотрено моделирование при равномерно уменьшающихся границах.

В третьей части работы были рассчитаны фрактальные размерности дендритов методом «box-counting», суть которого заключается в покрытии контура дендрита ячейками размерами $\delta \times \delta$. Каждому δ соответствовало определенное количество ячеек $N(\delta)$, покрывающих контур дендрита. Также, были рассчитаны фрактальные размерности с отбором данных, при котором δ учитывались не все при подсчете $N(\delta)$.

В результате проделанной работы были смоделированы структуры при разных условиях формирования. Полученные дендриты оказались схожими с экспериментально синтезируемыми дендритными структурами. В ходе вычисления фрактальной размерности был произведен отбор данных, благодаря которому наблюдалось увеличение значения фрактальной размерности.

ВЛИЯНИЕ АГРЕГАЦИИ НА ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА КВАНТОВЫХ ТОЧЕК CDSE/ZNS

Осколкова Т.О., Колесова Е.П., Орлова А.О.
Научный руководитель – к.ф.-м.н. Колесова Е.П.
Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия
t.t.oskolkova@gmail.com

В последние годы большое внимание уделяется изучению полупроводниковых квантовых точек (КТ). Интерес к этим нанокристаллам обусловлен их уникальными оптическими и физическими свойствами, благодаря которым КТ находят широкое применение в биомедицине [1], оптоэлектронике и солнечной энергетике [2]. Как и многие коллоидные наночастицы, КТ склонны к агрегации при изменении условий ближайшего окружения. КТ в агрегатах находятся на малом расстоянии друг от друга, это позволяет говорить об эффективном ферстеровском резонансном переносе энергии (FRET) между КТ разных размеров. В агрегатах КТ меньшего размера выступают в качестве доноров энергии, а КТ большего размера являются акцепторами [3]. Эффективный перенос энергии в агрегатах становится причиной изменения люминесцентных свойств КТ и гибридных структур на их основе. Главной целью данной работы стало выявление закономерностей изменения люминесцентных свойств КТ CdSe/ZnS при их агрегации.

Для работы использовались гидрофобные КТ CdSe/ZnS двух типов: классические КТ I типа и КТ градиентного химического состава (аллоидные). Агрегаты КТ обоих типов были получены методом выведения системы из состояния энергетического равновесия при добавлении метанола к раствору КТ. Степень агрегации КТ оценивалась с помощью измерения гидродинамического радиуса частиц методом динамического рассеяния света. Изменение люминесцентных свойств при агрегации КТ исследовалось с помощью спектрофотометра UV-Probe 3600 (Shimadzu), спектрофлуориметра Cary Eclipse (Varian) и лазерного сканирующего люминесцентного микроскопа MicroTime 100 (PicoQuant). При агрегации классических КТ наблюдались тушение люминесценции на 80% и сдвиг спектра люминесценции в длинноволновую область. В случае аллоидных КТ агрегация сопровождалась появлением дополнительного пика в коротковолновой части спектра; при этом существенных изменений в интенсивности люминесценции не наблюдалось. Регистрация кривых затухания люминесценции проводилась с использованием интерференционных фильтров с шагом 10 нм. В исходных растворах КТ не наблюдалось зависимости времени затухания люминесценции от длины волны регистрации. А в случае агрегатов КТ обоих типов была зафиксирована линейная зависимость характерного времени затухания люминесценции от длины волны. Наблюдаемая зависимость связана с переносом энергии в агрегатах КТ, что сопровождается увеличением времени затухания люминесценции в длинноволновой области спектра.

В работе было проведено исследование влияния агрегации на люминесцентные свойства КТ. Выявлено, что агрегация КТ влияет на положение и форму спектра люминесценции. При этом тип КТ влияет на характер изменения люминесцентных свойств при агрегации. Продемонстрировано, что характерным признаком агрегации КТ является линейная зависимость характерного времени затухания люминесценции от длины волны. Причиной наблюдаемой зависимости является перенос энергии между КТ, эффективность которого значительно увеличивается при агрегации КТ.

- 1 Volkov Y. Quantum dots in nanomedicine: recent trends, advances and unresolved issues // Biochemical and biophysical research communications. – 2015. – V. 468 (№ 3). – P. 419–427.
- 2 Litvin A.P., Martynenko I.V., Purcell-Milton F., Baranov A.V et al. Colloidal quantum dots for optoelectronics // Journal of Materials Chemistry A. – 2017. – V. 5 (№ 26). – P. 13252–13275.
- 3 Chou K. F., Dennis A. M. Förster resonance energy transfer between quantum dot donors and quantum dot acceptors // Sensors. – 2015. – V. 15 (№ 6). – P. 13288–13325.

ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ ПЕРЕХОДОВ УГЛЕРОДНЫХ ТОЧЕК ИЗ О-ФЕНИЛЕНДИАМИНА В ЗАВИСИМОСТИ ОТ ИСПОЛЬЗУЕМОГО РАСТВОРИТЕЛЯ

Ведерникова А.А., Степаниденко Е.А., Ушакова Е.В.

Научный руководитель - к.ф.-м.н, доцент, Ушакова Е.В.

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

vvedernikova.anna@gmail.com

В данной работе были синтезированы люминесцентные углеродные точки из о-фенилендиамида с помощью микроволнового метода в различных растворителях. Было показано, что углеродные точки обладают различной структурой оптических переходов в зависимости от типа растворителя, используемого при их синтезе.

В последнее время углеродные наноматериалы привлекают все больше внимания благодаря возможности их применения в различных областях, например, таких как биомедицина или оптоэлектроника. Особое место занимают люминесцентные углеродные точки (УТ), которые обладают следующими полезными свойствами: высокий квантовый выход и фотостабильность фотолюминесценции, положение полосы которой может быть изменено в широком спектральном диапазоне, низкая токсичность и высокая биосовместимость, что делает их пригодными для использования в различных направлениях биомедицины. Однако создание образцов УТ с заданным положением оптических переходов требует дополнительных исследований, в частности, установления влияния химического состава прекурсоров и свойств растворителей на формирование люминесцентных центров внутри УТ.

В данной работе были исследованы оптические свойства двух типов УТ, синтезированных с помощью микроволнового метода, где в качестве прекурсора был выбран о-фенилендиамид. УТ были получены микроволновым методом синтеза в печи MicroSYNTH MA143 (Milestone) из о-фенилендиамида в воде (УТ-1) и формамиде (УТ-2). Готовые коллоидные растворы были очищены от крупных частиц и агломератов через фильтр с мембраной 0,22 мкм. Для исследования стационарных оптических свойств образцов были использованы спектрофотометр UV-3600 (Shimadzu) и спектрофлуориметр FP-8200 (Jasco). В качестве растворителя была использована вода. В спектре поглощения УТ-1 наблюдается широкая полоса с максимумом на 420 нм. Данный оптический переход обычно связывают с поверхностными состояниями УТ, связанными с наличием на поверхности карбоксильных, карбонильных, гидроксильных и амино-групп. Из карт спектров возбуждения-излучения видно, что УТ-1 обладают одним излучательным переходом с максимумом на 550 нм, который наиболее эффективно возбуждается в области 400-420 нм, что соответствует их полосе поглощения. Следовательно, в ходе синтеза УТ из о-фенилендиамида в воде формируется один тип излучательных центров, предположительно расположенных в приповерхностном слое УТ. В спектре поглощения УТ-2 наблюдается широкая полоса с максимумом на 340 нм, которая согласно литературе, связана с $n-\pi^*$ переходами ядер УТ. Полоса фотолюминесценции образца УТ-2 имеет более сложный характер: при возбуждении в области 250-300 нм в спектре фотолюминесценции наблюдается три пика с максимумами на 300, 350 и 580 нм, при дальнейшем увеличении длины волны возбуждения полоса становится шире и положение пика сдвигается в длинноволновую область спектра. Наблюдаемые оптические свойства образца характерны для УТ, которые обладают несколькими люминесцентными центрами различных типов.

Было показано, что тип растворителя, используемый в синтезе УТ, влияет на формирование люминесцентных центров и, следовательно, на оптические свойства получаемых образцов. Таким образом, открывается возможность «настраивать» оптические переходы УТ в широком диапазоне спектра: от глубокого ультрафиолета до ближней инфракрасной области, путем варьирования химического состава и свойств прекурсоров и растворителей.

КИНЕТИКА ТРАНСФОРМАЦИИ ФОРМЫ ЭШЕЛОНОВ АТОМНЫХ СТУПЕНЕЙ НА ПОВЕРХНОСТИ Si(001) В УСЛОВИЯХ ЭЛЕКТРОМИГРАЦИИ

Разживина М.Э.

Научный руководитель – к.ф.-м.н. Родякина Е.Е.

Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

razz.mar.ed@gmail.com

На vicинальной поверхности кристалла при нагреве постоянным электрическим током возникает эффект электромиграции, который заключается в направленном дрейфе адатомов. Данный процесс приводит к перераспределению атомных ступеней и формированию эшелонов ступеней. На поверхности Si(001) этот процесс неотъемлемо связан со сверхструктурной реконструкцией (2×1), которая обуславливает выраженную анизотропию диффузии адатомов вдоль и поперёк димерных рядов реконструкции и наличие двух типов атомных ступеней. Известно, что с увеличением температуры величина анизотропии уменьшается, что может влиять на силу взаимодействия атомных ступеней в эшелоне и, как следствие, на их плотность в эшелоне [1]. Поэтому целью данной работы является изучение температурной зависимости расстояния между ступенями в эшелонах, характеризующей изменения потенциала взаимодействия ступеней, на поверхности Si(001) в условиях электромиграции.

В работе проведены экспериментальные исследования кинетики трансформации эшелонов атомных ступеней на поверхности Si(100) в условиях электромиграции при нагреве постоянным током в направлении вниз по ступеням в интервале температур 1000-1150°C. Была разработана методика осуществления анализа морфологии поверхности с применением атомно-силового микроскопа, с помощью которой были получены экспериментальные данные о зависимости среднего расстояния между ступенями от количества ступеней в эшелоне. Установлено, что данная зависимость подчиняется степенному закону $l \sim N^\alpha$, где α изменялся от -0,68 до -0,36 с ростом температуры. В соответствие с теоретическими моделями [2], увеличение показателя свидетельствует об увеличении влияния потенциала с квадратичной зависимостью и уменьшению потенциала с логарифмической зависимостью при температурах близких к температуре разрушения поверхностной реконструкцией (2×1), присущей поверхности Si(001).

Впервые экспериментально изучалась температурная зависимость степенного показателя α на поверхности Si(100). Это подтверждает изменение потенциала взаимодействия с увеличением температуры, также как и на поверхности Si(111), где это было показано ранее в работе Номма [3].

- 1 Bartelt N.C., Tromp R.M., Williams E.D. Step capillary waves and equilibrium island shapes on Si(001) // Physical Review Letters. – 1994. – V. 73 (№ 12). – P. 1656–1659.
- 2 Sato M., Uwaha M. Growth of step bunches on a Si(001) vicinal face with drift of adatoms // Surface Science. – 2001. – V. 493 (№ 3). – P 480–486.
- 3 Homma Y., Aizawa N. Electric-current-induced step bunching on Si(111) // Physical Review B. – 2000. – V. 62 (№ 12). – P. 8323-8329.

ИССЛЕДОВАНИЕ ФЁРСТЕРОВСКОГО ПЕРЕНОСА ЭНЕРГИИ В КОМПЛЕКСАХ ТРОЙНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК $\text{AgInS}_2/\text{ZnS}$ И МОЛЕКУЛАМИ КРАСИТЕЛЕЙ Cu_3S И Cu_5S

Осипова В.А., Ткач А.П., Миропольцев М.А., Кузнецова В.А., Баранов А.В.

Научный руководитель – проф., д.ф.-м.н. Баранов А.В.

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

viksalex.o@gmail.com

Квантовые точки (КТ) — это полупроводниковые наночастицы, в которых движение электронов ограничено во всех трех пространственных измерениях. КТ хорошо известны настраиваемыми полосами фотолюминесценции (ФЛ), широкими спектрами поглощения, высокой фотостабильностью по сравнению с органическими красителями и высокими квантовыми выходами ФЛ [1]. Эти уникальные характеристики делают их особенно интересными как для фундаментальных исследований, так и для коммерческих приложений. КТ уже применяются в областях фотоники и биомедицины, включая системы преобразования энергии, светоизлучающие устройства, инструменты биовизуализации, сенсорные платформы и, с недавнего времени, в мультиплексном анализе [2]. Оптоэлектронные и спектроскопические свойства квантовых точек сильно зависят от их химического состава, размера, формы и химии поверхности, которые можно контролировать, применяя различные стратегии синтеза и методы модификации [3].

КТ обычно синтезируются из бинарных полупроводниковых соединений, таких как элементы II – IV и IV – VI. Наиболее известные примеры включают КТ на основе Cd и Pb. Эти квантовые точки широко исследовались в последние несколько десятилетий и остаются перспективными материалами благодаря хорошо изученным химическим и оптическим свойствам и простым технологиям производства. Однако токсичность кадмия и свинца препятствует дальнейшему применению этих квантовых точек в биомедицине и биомедицине с учетом последних экологических норм. Нетоксичные КТ тройного состава, такие как AgInS_2 (AIS) или CuInS_2 (CIS), являются отличной альтернативой традиционным квантовым точкам из-за отсутствия токсичных тяжелых металлов в их структуре [4].

Квантовые точки тройных соединений, AIS или CIS, отличаются от двойных квантовых точек оптическими и электронными свойствами. Полосы поглощения тройных КТ гораздо шире и не имеют ярко выраженных экситонных пиков. Полная ширина полосы люминесценции на полувывоте и стоксов сдвиг во многих случаях превышают сотни нанометров. Такие квантовые точки также известны временем жизни фотолюминесценции в сотни наносекунд, которое зависит от размера и состава частиц. Время жизни фотолюминесценции тройных квантовых точек, измеренное внутри полосы фотолюминесценции (ФЛ), зависит от длины волны излучения: чем длиннее длина волны, тем больше времена затухания.

Низкая токсичность и длительное время затухания фотолюминесценции, зависящее от длины волны, делают тройные квантовые точки многообещающими кандидатами для систем биологической визуализации и зондирования с временным и спектральным разрешением. Было показано, что большая продолжительность жизни флуорофора приводит к значительному подавлению фона автофлуоресценции и, как следствие, к общему повышению чувствительности. Широкая полоса пропускания и длительное время жизни тройных квантовых точек также полезны для приложений с резонансным переносом энергии Фёрстера (FRET), где квантовые точки могут использоваться в качестве эффективных доноров энергии.

В связи с этим, целью нашего исследования было исследование резонансного переноса энергии в системе взаимодействующих водорастворимых тройных квантовых точек $\text{AgInS}_2 / \text{ZnS}$ на поверхности полимерных микросфер и органических красителей с помощью спектрально-люминесцентных методов.

В данной работе водорастворимые квантовые точки тройного состава $\text{AgInS}_2/\text{ZnS}$ загружали на поверхность полимерных микросфер, использование которых может значительно повысить универсальность и возможности сенсорной платформы на основе механизма переноса энергии. Микросферы обычно имеют размер несколько микрон и могут быть кодированы органическими красителями или квантовыми точками и функционализированы различными биологически активными молекулами. ПМС в качестве носителей повышают стабильность системы за счет изоляции тройных КТ

от окружающей среды и наоборот, и приводят к сильному увеличению интенсивности сигнала без потери пространственного разрешения за счет концентрации большого количества используемых КТ в объеме ПМС.

Далее полученный образец ПМС – AgInS₂/ZnS делили на пять одинаковых по объему образцов и на каждый из них методом послойного осаждения наносили от одной до пяти пар слоев положительного(РААН) и отрицательного(PSS) полимера соответственно. После характеристики полученной системы, предварительно разделив каждый раствор напополам, на поверхность с отрицательным полимером добавляли краситель Cu₃ (3,3'-диэтилтиакарбоцианина йодид) и Cu₅ (3,3' - диэтилтиадикарбоцианин йодид) и проводили повторные измерения.

Спектры поглощения UV-VIS регистрировали с использованием спектрофотометра UV-Probe 3600 (Shimadzu, Kyoto, Japan). Спектры ФЛ получали на спектрофлуориметре Cary Eclipse (Agilent, Санта-Клара, Калифорния, США). Измерения флуоресцентной спектроскопии с временным разрешением выполнялись с использованием флуоресцентного микроскопа с коррелированным временем счета одиночных фотонов (TCSPC) MicroTime 100 (PicoQuant, Inc., Берлин, Германия), оснащенного импульсным лазером 405 нм. Сигнал собирался однофотонным фотоэлектронным умножителем-детектором; различные длины волн детектирования выбирались с помощью голографического полосового фильтра с полосой пропускания 10 нм, настраиваемой в спектральном диапазоне 430–780 нм. Флуоресцентные изображения получали с помощью конфокального лазерного сканирующего микроскопа LSM 710 (Carl Zeiss, Оберкохен, Германия). Для возбуждения люминесценции использовался диодный лазер с длиной волны 405 нм.

В результате работы была сформирована система, состоящая из полимерных микросфер с загруженными на их поверхность КТ AIS / ZnS, и исследовано взаимодействие данной системы с красителями Cu₃ и Cu₅, излучающими в разных спектральных областях. Исследования показали, что тушение ФЛ КТ неуклонно возрастает с уменьшением количества слоев полиэлектролита между КТ и красителями. Измерения ФЛ с временным разрешением систем ПМС-AIS и ПМС-AIS-краситель показали, что из-за FRET время жизни фотолюминесценции уменьшается для квантовых точек и увеличивается для красителей. Исследование ясно демонстрирует потенциал предложенной модели для регистрации спектрально разделенных полос FRET-индуцированной люминесценции для красителей с разным временем затухания.

- 1 Vasudevan D. et al. Core-shell quantum dots: Properties and applications // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2015. – V. 636 (№ 5). – P. 395–404.
- 2 Linkov P. et al. High quantum yield CdSe / ZnS / CdS / ZnS multishell quantum dots for biosensing and optoelectronic applications. // *Materials Today: Proceedings*. – 2016. – V. 3 (№ 2). – P. 104–108.
- 3 Takagahara T., Takeda K. Theory of the quantum confinement effect on excitons in quantum dots of indirect-gap materials // *Physical Review B*. – 1992. – V. 46 (№ 23). – P. 15578–15581.
- 4 Girma W.M. et al. Synthetic strategies and biomedical applications of I–III–VI ternary quantum dots // *Journal of Materials Chemistry B*. – 2017. – V. 5 (№ 31). – P. 6193–6216.

АСПЕКТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПОВЕДЕНИЯ КВАНТОВОЙ СИСТЕМЫ НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СПИНОВ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР

Васильев И.А., Рождественский Ю.В.

Научный руководитель – д.ф.-м.н., проф. Рождественский Ю.В.

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

vas.iwan2010@gmail.com

В настоящей работе рассматриваются аспекты поведения составной квантовой системы. При рассмотрении моделирования квантовых систем были рассмотрены квантовые нейронные сети. В ходе проделанной работы архитектура нейронной сети была усовершенствована, что незначительно сказалось на качественных характеристиках, но существенно отразилось на времени обучения, которое удалось снизить на 30%.

На сегодняшний день тема моделирования поведения различных квантовых систем вызывает огромный интерес ввиду того, что понятие квантовой запутанности лежит в основе как квантовых вычислений, так и квантовой информатики. Квантовая запутанность влияет на возникновение экспериментально-наблюдаемых явлений, которые неочевидны в аспекте классической теории. В свою очередь моделирование квантовой запутанности осложняется тем фактом, что в процессе моделирования любых систем зачастую прибегают к некоторым допущениям или предположениям, которые в ситуации с квантовыми системами могут нести существенное искажение получаемой модели. Именно поэтому в данной работе будут вводиться исключительно те упрощения, которые на сегодняшний день можно реализовать экспериментально.

В данной работе в качестве квантовой системы будут рассматриваться кубиты на основе молекулярных спинов полупроводниковых гетероструктур. В настоящий момент данные структуры не часто используются в сфере физической реализации квантовых вычислений. Учитывая все особенности подобных структур, реализуется моделирование поведения электрона в данных системах. Также были рассмотрены квантовые нейронные сети, в которых учитывались основные проблемы полупроводниковых гетероструктур, в которых присутствуют незначительные шумы от магнитных спинов в подложке. С учетом этого шума была реализована архитектура квантовой нейронной сети, описанная в начале 2020 года, с некоторыми изменениями вскрытых слоев для минимизации влияния шумов на квантовые состояния. Так же за счет изменения скрытых слоев значительно уменьшилось время обучения. Уменьшение составило порядка 30%.

В ходе проделанной работы были рассмотрены основные аспекты реализации моделирования поведения квантовой системы на основе молекулярных спинов полупроводниковых гетероструктур, с присутствующим шумом магнитных спинов в подложке. Также была усовершенствована архитектура квантовой нейронной сети. Все эти факты могут позволить моделировать различные квантовые системы без необходимости их физической реализации.

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ, СТРУКТУРНЫЕ И ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ СИНТЕЗА ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ НАНОСТРУКТУРНЫХ ПОРОШКОВ В СРЕДЕ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ПЛАЗМЫ

Добони К.А.

Обнинский институт атомной энергетики — филиал федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Обнинск, Россия
kseniya.doboni@icloud.com

Водород как универсальный энергоноситель издревле привлекает своей экологической чистотой, гибкостью и эффективностью процессов преобразования энергии с его участием. Стадия хранения водорода представляет собой промежуточное звено в его жизненном цикле от стадии производства до потребления. Одной из особо значимых технологических проблем водородной энергетики является разработка наиболее эффективных и наиболее экономичных способов хранения водорода. Привлекательность водорода как универсального энергоносителя определяется экологической чистотой, гибкостью и эффективностью процессов преобразования энергии с его участием.

Технологии производства водорода достаточно хорошо освоены и имеют свое практическое применение. Однако низкая температура ожижения, плотность газообразного водорода и его взрывоопасность в сочетании с негативным воздействием на конструкционные материалы выносят на первый план проблемы разработки экономически эффективных способов хранения водорода. В частности, именно эти проблемы сдерживают развитие водородной энергетики в России.

Предлагаемая НИР посвящена основным способам хранения водорода, в частности с помощью нанопорошков, сделанных плазмохимическим методом. Рассмотрены и проанализированы существующие технологии для хранения водорода.

Проблема хранения водорода на данном этапе является одной из главных проблем в развитии водородной энергетики. Важно заметить, что системы водородного аккумулирования, в отличие от других электрохимических систем обеспечивают хранение запасенной энергии, потому что для них не характерен саморазряд при хранении. Важнейшей характеристикой, определяющей эффективность хранения, является плотность и определяется технологической безопасностью и экономикой систем хранения водорода.

Заметим, что водород не схож по своим физическим признакам с другими газами, например метаном, азотом, как следствие, имеет разные технологии хранения и аккумулирования. Задача состоит в нахождении самого подходящего способа хранения водорода, как с экономической точки зрения, так и с точки зрения безопасности. Также необходимо внедрить способы проверки систем хранения.

В результате истощения мировых запасов органического топлива, являющегося энергоносителем для невозобновляемой энергетики, перед человечеством встает задача своевременно найти и научиться эффективно использовать новые источники энергии и энергоносители. Главным претендентом на роль такого энергоносителя является водород. Ожидается, что через 10–15 лет водород в технически развитых странах начнет активно вытеснять и постепенно вытеснит органические энергоносители с рынка энергии. В переходный период для производства водорода будут активно использоваться методы химического преобразования органических энергоносителей и постепенный переход на прямые методы его получения путем электролиза. Решающую роль здесь может сыграть атомно-водородный комплекс.

На данный момент синтез наноструктур плазмохимическим методом водорода является одним из инновационных и самых современных способов для хранения водорода. Развитие водородной энергетики во много упирается в финансирование. В целом ученые всего мира работают на благо «мирного атома», в скором времени водородная энергетика выйдет на новый уровень и займет весомую долю в производстве энергетики во всем мире.

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА J-АГРЕГАТОВ ПСЕВДОИЗОЦИАНИНОВОГО КРАСИТЕЛЯ НА ПОВЕРХНОСТИ НАНОПОРИСТОГО ОКСИДА АЛЮМИНИЯ

Набиуллина Р.Д., Старовойтов А.А., Дададжанова А.И., Арефина И.А.

Научный руководитель – к.ф.-м.н., доцент Старовойтов А.А.

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

rezida2105@mail.ru

В последнее время создание гибридных наноматериалов с заданными свойствами, которые представляют собой комбинацию неорганических и органических элементов, привлекло большое внимание научного сообщества. Такие гибридные наноматериалы могут найти применение при разработке новых гибридных наносистем, таких как биологические и химические сенсоры, лазеры с обратной связью по рассеянию, а также устройства солнечной энергии [1].

Органические цианиновые красители являются подходящими системами для производства гибридных материалов, поскольку они имеют тенденцию образовывать молекулярные нанокластеры, - J-агрегаты - характеризующиеся узкой полосой поглощения и флуоресценции, небольшим стоксовым сдвигом и высокой оптической нелинейностью [2]. Взаимодействие J-агрегатов с наноструктурированными поверхностями открывает новые возможности для создания усовершенствованных сенсорных датчиков и лазерных устройств. Среди наноструктурированных поверхностей выделяется нанопористый анодный оксид алюминия. Он имеет однородные неразветвленные нанопоры, которые обычно образуют гексагональную решетку, длина которой может достигать нескольких миллиметров. В композитных структурах, представляющих собой нанопористый оксид алюминия, легированный молекулами красителя, наблюдалось увеличение излучения и уменьшение коэффициента усиления [3].

В работе были исследованы оптические свойства J-агрегатов псевдоизоцианинового красителя, внедренного в нанопористый оксид алюминия, методами абсорбционной и флуоресцентной спектроскопии.

Структура пористого оксида алюминия представляет собой плотноупакованный массив столбчатых пор, диаметр и интервал которых можно контролировать в зависимости от условия анодирования алюминия в кислоте. В работе были исследованы три образца нанопористого оксида алюминия, полученного при разных условиях анодирования (рис.1).

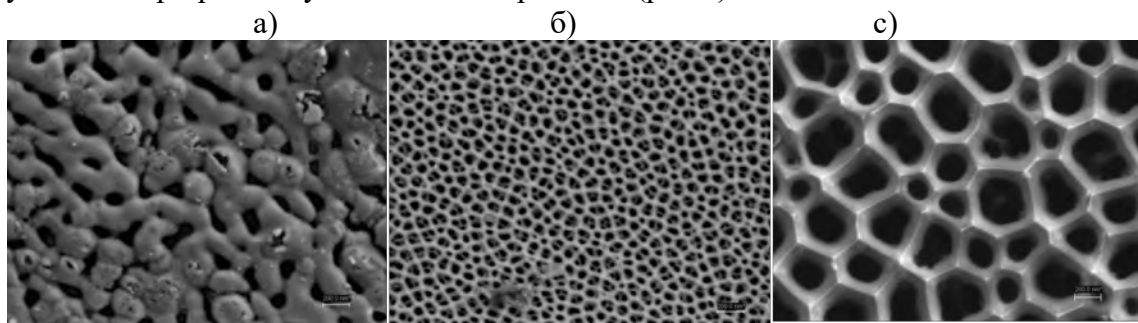


Рисунок 1 – СЭМ-изображения образцов нанопористого оксида алюминия: образец 1 (а), образец 2 (б) и образец 3 (в)

Для формирования J-агрегатов методом самоорганизации был использован псевдоизоцианиновый краситель 1,1'-диэтил-2,2'-цианин йодид (PIC). Для получения большого количества J-агрегатов была использована оригинальная методика термостимулированной самосборки псевдоизоцианинового красителя в этаноле без использования солей [4]. Пластины оксида алюминия погружались в раствор красителя, а затем просушивались для активации их пор молекулами красителя.

При возбуждении анодного оксида алюминия на длине волны 405 нм, наблюдалась люминесценция с максимумом в диапазоне 470-520 нм (рис. 2, синяя кривая), которая может быть связана с образованием F-центров кислородных вакансий в процессе анодирования [3].

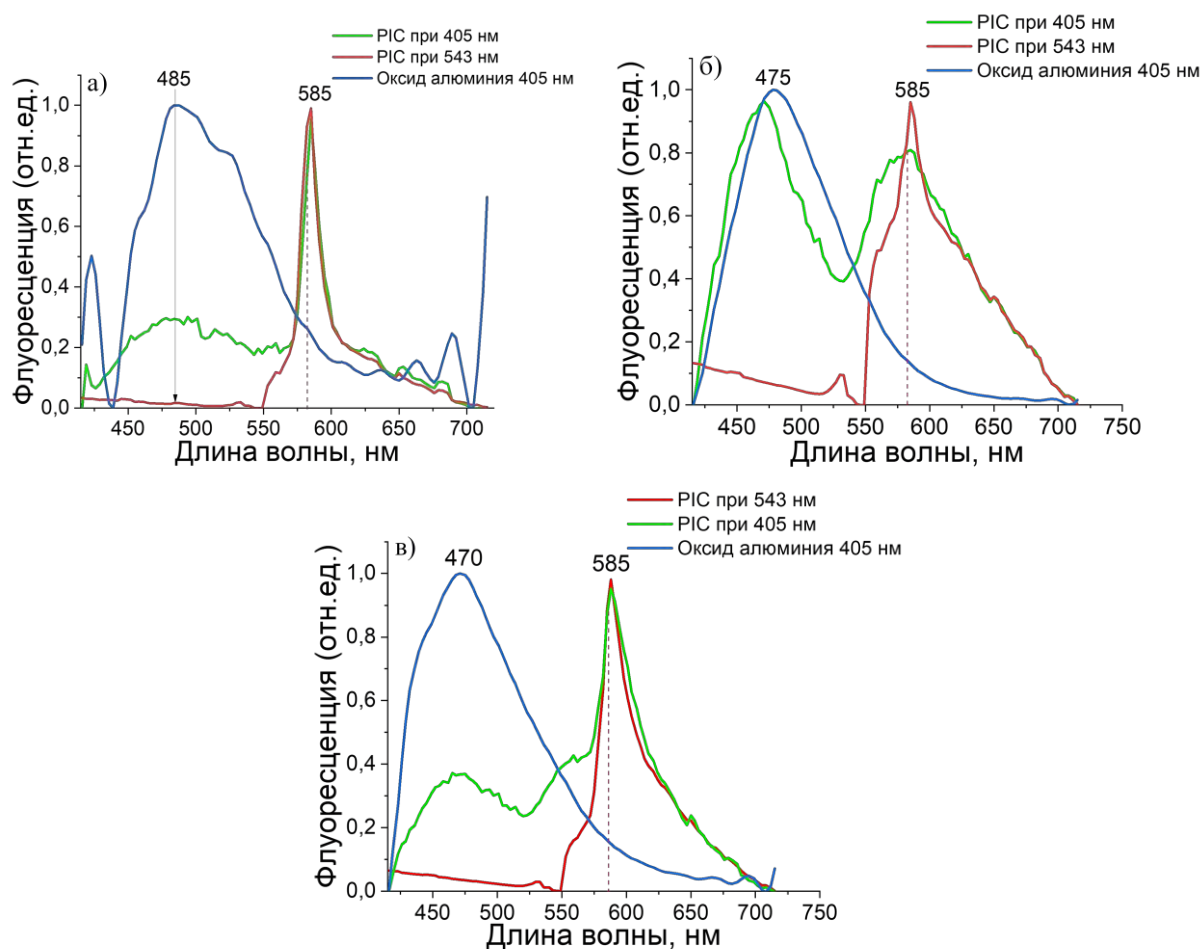


Рисунок 2 – Спектры флуоресценции композитной структуры при длинах волны возбуждения 405 и 543 нм и нанопористого оксида алюминия при возбуждении на 405 нм для трех образцов: №1 (а), №2 (б) и №3 (в)

При возбуждении композитной структуры на длине волны 543 нм, наблюдается только свечение J-агрегатов красителя. Однако, при нерезонансном возбуждении образцов с красителем (405 нм), наблюдается флуоресценция как самого анодного оксида алюминия, так и J-агрегатов псевдоизоцианинового красителя (рис. 6, зеленая кривая). Данное явление может говорить о переносе энергии оптического возбуждения от кислородных вакансий к молекулам красителя, что подтверждается и спектрами кинетики затухания флуоресценции. Такое оптическое явление в данной структуре позволит в дальнейшем реализовать новые лазерные среды.

- 1 Yang W., Wang B., Sun A., Liu J., Xu G.J. Lasing from dye-loaded periodic anodic alumina nanostructure // *Materials Letters*. – 2016. – V. 178. – P. 197–200.
- 2 Bricks J.L., Slominskii Y.L., Panas I.D., Demchenko A.P. Fluorescent J-Aggregates of Cyanine Dyes: Basic Research and Applications Review // *Methods and Applications in Fluorescence*. – 2018. – V. 6. – P. 012001.
- 3 Zeinidenov A.K., Ibrayev N.Kh., Aimukhanov A.K. The laser active element based on dye on porous alumina // *Eurasian Chemico-Technological Journal*. – 2014. – V. 16 (№ 1). – P. 73–78.
- 4 Nabiullina R.D., Starovoytov A.A., Toropov N.A. Optical properties of molecular layer of cyanine dye coated on Ag or Au island film // *Optical and Quantum Electronics*. – 2020. – V. 52. – P. 43.

ИССЛЕДОВАНИЕ АГРЕГАТОВ МАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ МЕТОДОМ МАГНИТНОГО КРУГОВОГО ДИХРОИЗМА

Матюшкина А.А., Орлова А.О.

Научный руководитель – д. ф.-м.н., профессор Орлова А.О.

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

anyuta.matyushkina@mail.ru

Большой потенциал применения магнитных наночастиц (МНЧ) в биомедицине определяется их уникальными свойствами. Они могут выступать в качестве платформы для осуществления адресной доставки лекарств, быть агентами магнитной резонансной томографии и локальной гипертермии [1, 2].

Однако, важным параметром для использования МНЧ в биомедицинских приложениях является их стабильность в растворе, поскольку агрегация магнитных наночастиц препятствует их выведению из организма и, более того, может стать причиной закупорки мелких сосудов [3]. Также агрегация МНЧ влияет на их магнитные свойства, которые, согласно традиционному методу, характеризуют посредством измерения кривой намагничивания их высушенного порошка. Но данный метод не отражает информацию о коллоидной стабильности МНЧ. Поэтому в данной работе было произведено исследование магнитного кругового дихроизма (МКД), интенсивность которого также несет информацию о намагниченности образца [4], раствора монодисперсных суперпарамагнитных наночастиц оксида железа (SPIONs), а также их специально сформированных агрегатов для выявления зависимости свойств образца от размера агрегатов. Выбор данного типа магнитных наночастиц обусловлен тем, что их свойства, а именно биосовместимость и переработка клетками в процессе нормального метаболизма железа, делают их наиболее подходящими для биомедицинских применений [5, 6].

Полученные данные показали, что агрегация SPIONs ведет к изменению магнито-оптического отклика образца, а именно: увеличению намагниченности образца, а также изменению соотношения интенсивностей полос МКД. Более того, было показано, что метод магнитного кругового дихроизма является более чувствительным к наличию агрегатов SPIONs в образце, чем метод динамического рассеяния света, который традиционно используется для определения размера частиц в растворе.

- 1 Tietze R. et al. Efficient drug-delivery using magnetic nanoparticles—biodistribution and therapeutic effects in tumour bearing rabbits // *Nanomedicine: Nanotechnology, Biology and Medicine*. – 2013. – V. 9 (№ 7). – P. 961-971.
- 2 Yoo D. et al. Double-effector nanoparticles: a synergistic approach to apoptotic hyperthermia // *Angewandte Chemie International Edition*. – 2012. – V. 51 (№ 50). – P. 12482–12485.
- 3 Mody V. V. et al. Magnetic nanoparticle drug delivery systems for targeting tumor // *Applied Nanoscience*. – 2014. – V. 4 (№ 4). – P. 385–392.
- 4 Gromova Y. A. et al. Magnetic and optical properties of isolated and aggregated CoFe₂O₄ superparamagnetic nanoparticles studied by MCD spectroscopy // *The Journal of Physical Chemistry C*. – 2018. – V. 122 (№ 21). – P. 11491–11497.
- 5 Mahmoudi M. et al. Superparamagnetic iron oxide nanoparticles (SPIONs): development, surface modification and applications in chemotherapy // *Advanced drug delivery reviews*. – 2011. – V. 63 (№ 1-2). – P. 24–46.
- 6 Васюков Г. Ю. и др. Поверхностно модифицированные магнитные наночастицы для медико-биологического применения // *Бюллетень сибирской медицины*. – 2014. – Т. 13 (№ 6). – С. 33-40.

ДРЕЙФ ДВУМЕРНЫХ ВАКАНСИОННЫХ ОСТРОВКОВ НА ПОВЕРХНОСТИ Si(100) В УСЛОВИЯХ ЭЛЕКТРОМИГРАЦИИ

Воронцова Ю.А., Ситников С.В.

Научный руководитель – к.ф.-м.н. Ситников С.В.

Новосибирский национальный исследовательский государственный университет? Новосибирск, Россия
y.vorontsova@g.nsu.ru

Процесс электромиграции на поверхности кристаллов изучается несколько десятилетий, однако до сих пор ни температурная зависимость эффективного заряда, ни его абсолютная величина не известны с хорошей точностью даже для поверхности Si(100). В работе Curiotto и др. [1] 2019 года заряд был определен в пределах от 7 до 25 элементарных зарядов. Такой большой разброс значений в оценке заряда может быть связан с его зависимостью от температуры, однако точность методики эксперимента не позволяет этого установить. Поэтому целью данной работы является определение температурной зависимости эффективного электрического заряда адсорбированного атома на поверхности Si(100).

В данной работе с применением *in situ* метода сверхвысоковакуумной отражательной электронной микроскопии [2] проведены исследования дрейфа вакансионного двумерного островка на широкой террасе поверхности Si(100) в условиях электромиграции. На поверхности образцов были созданы квазиравновесные условия путём компенсации сублимирующего потока с поверхности из внешнего источника кремния. В результате была получена зависимость скорости островков для различных температур и различного направления электрического тока к рядам доменов сверхструктуры (2×1) внутри островка. Показано, что скорость дрейфа вакансионных островков не зависит от их размеров.

Разработана упрощённая одномерная теоретическая модель дрейфа вакансионных островков в условиях электромиграции при компенсации сублимации. Из сопоставления модели с экспериментальными данными получена температурная зависимость эффективного заряда в интервале 1010-1120°C, которая линейно уменьшается с температурой. Знак эффективного заряда отрицательный, а средняя величина равна $Z = -0,5 \pm 0,3$. Полученные значения гораздо меньше величины, полученной Curiotto: $7 < Z < 25$. Большую разницу в значениях можно объяснить тем, что в данной работе исследовано движение группы островков при относительно высоких температурах, вследствие чего появляются вклады от взаимодействия между островками, в том числе процесса освальдовского созревания, а также от процесса сублимации.

- 1 Curiotto S., Muller P., El-Barraj A., Cheynis F., Pierre-Louis O., Leroy F. 2D nanostructure motion on anisotropic surfaces controlled by electromigration // Applied Surface Science. – 2019. – V. 469. – P. 463–470.
- 2 Latyshev A.V., Krasilnikov A.B., Aseev A.L. In situ REM study of monatomic step behaviour on Si (111) surface during sublimation // Ultramicroscopy. – 1993. – V. 48. – P. 377–380.

ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КОЛЛОИДНЫХ НАНОКРИСТАЛЛОВ Cs₂AgInCl₆/TEOS С КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРОЙ ПЕРОВСКИТА

Мирущенко М.Д., Наутран В.Р., Ушакова Е.В.

Научный руководитель – к.ф.-м.н., доцент Ушакова Е.В.

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

miruschenko98mail@yandex.ru

Нанокристаллы с кристаллической структурой перовскита АВХ₃ (ПНК), где А – органический или неорганический одновалентный катион, В – двухвалентный металлический катион, в основном, свинца, и Х – галоген, обладающие превосходными оптическими свойствами и свойствами электронной структуры, могут быть использованы в различных устройствах фотоники. В последнее время фокус исследований, сместился в сторону создания бессвинцовых ПНК с кристаллической структурой «двойного перовскита», где катион В заменяется на два катиона различных металлов.

Но у этих материалов имеются хорошо известные недостатки, а именно малая стабильность при хранении в атмосфере, которая способна привести к ухудшению их оптических свойств. Для преодоления этой проблемы в работе был использован метод пост-синтетической обработки исследуемых ПНК молекулами тетраэтоксисилана (ТЕОС). Целью работы являлось исследование оптических характеристик синтезированных таким образом бессвинцовых ПНК.

Для изготовления ПНК состава Cs₂AgInCl₆, легированных висмутом, использовались AgNO₃, InCl₃, BiCl₃, 1-октадецен, олеиновая кислота, олеиламин и HCl. Все прекурсоры смешивались и нагревались до 120 °С в течение одного часа, затем в Ag⁺ атмосфере проходил нагрев до 200 °С (ПНК-200) и 280 °С (ПНК-280) и добавление раствора олеата цезия. Далее смесь охлаждалась, и при 80 °С вводился ТЕОС. После этого коллоидный раствор ПНК был очищен от продуктов реакции методом центрифугирования и промывки в ацетоне. Полученные в результате такого синтеза ПНК-280 имели кубическую форму с размером 13±2 нм, ПНК-200 имели эллипсоидную форму с размером 12±3 нм.

ИК-спектры образцов содержат пики: {1166, 1103, 1079} и {965, 790} см⁻¹ относящиеся к колебаниям молекул ТЕОС; {3080, 2920, 2850} см⁻¹ – к колебаниям -СН групп; 1712 см⁻¹, 1642 см⁻¹ и 1466 см⁻¹ – к колебаниям лигандной оболочки, карбоксильной группы, аминных и алкеновых групп. Это подтверждает успешный рост пассивирующей оболочки на поверхности ПНК. Такая обработка поверхности ПНК позволила сохранить их морфологию и оптические свойства при хранении в условиях атмосферы при 5 °С в течение более чем 6 месяцев.

Для проведения оптических измерений готовые ПНК диспергировались в толуоле. Оптическая плотность в спектре поглощения ПНК-280 монотонно возрастает с уменьшением длины волны и имеет плечо приблизительно на 360 нм. Пик полосы фотолюминесценции (ФЛ) находится на 435 нм с шириной на полувысоте равной 95 нм. Образец ПНК-200 имеет более выраженные переходы в спектре поглощения, наблюдаемые на 318 и 365 нм с менее интенсивной полосой ФЛ, максимум которой находится на 420 нм с шириной на полувысоте равной 105 нм. Средние времена затухания ФЛ – 5,2 нс для ПНК-280 и 3,5 нс для ПНК-200. Относительный квантовый выход образцов составил 5,6 и 1,4 % для ПНК-280 и ПНК-200, соответственно.

В работе были получены два образца ПНК при разных температурах, что приводит к формированию различной кристаллической структуры образцов. Был разработан метод пост-синтетической обработки поверхности, благодаря которому оказалось возможным сохранить морфологию и оптические характеристики ПНК при хранении в атмосфере в течение более 6 месяцев. Сравнение оптических свойств образцов ПНК показало, что кристаллическая структура сильно влияет на формирование структуры энергетических уровней и оптических переходов образцов. Так, ПНК, синтезированные при более высокой температуре, обладают выраженной кубической симметрией и увеличенным квантовым выходом ФЛ. Результаты работы могут быть использованы для дальнейшей разработки методик синтеза бессвинцовых ПНК, не уступающих по своим оптическим и эксплуатационным характеристикам их аналогам, содержащим атомы свинца.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОПТИЧЕСКОГО ОХЛАЖДЕНИЯ НАНОКРИСТАЛЛОВ YLF: Yb³⁺ С УЧЕТОМ ВЕРОЯТНОСТНОГО ХАРАКТЕРА ПОГЛОЩЕНИЯ/ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ

Хорошев И.А.

Научный руководитель – к.ф.-м.н., доцент Иванов А.В.

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

igorwot8@gmail.com

Настоящая работа посвящена исследованию метода полного (трансляционного и внутреннего) оптического охлаждения нанокристалла, легированного ионами иттербия. Метод основан на одновременной реализации как внутреннего охлаждения за счет антистоксовой флуоресценции, так и трансляционного охлаждения за счет коллективного эффекта отдачи. С помощью программного пакета Wolfram Mathematica выполнено компьютерное моделирование процесса оптического охлаждения. Используемая для численных расчетов модель учитывает вероятностный характер не только процессов поглощения фотонов ионами иттербия, но и оптических переходов на ионах прочих примесей. Выполнены оценки глубины и скорости оптического охлаждения наночастиц.

Идея использования лазерного излучения для глубокого охлаждения ионов и атомных ансамблей была предложена в 1975 году. Данная идея была основана на возможности с помощью частотной отстройки селективно замедлять движущиеся навстречу лазерному излучению отдельные ионы и атомы. Дело в том, при поглощении и испускании фотона происходит изменение импульса атома, а также происходит обмен энергией между атомом и световым полем. На данный момент практический интерес представляет возможность замедлять с помощью оптического поля более массивные объекты, например, наночастицы, уменьшая как их кинетическую энергию, так и внутреннюю температуру.

В работе рассматривается оптомеханическая система, представляющая собой легированный ионами иттербия нанокристалл, левитирующий в ионной ловушке Пауля. На нанокристалл действует оптическое поле, направленное в противоположную движению нанокристалла сторону. В результате резонансного взаимодействия поля с ионами иттербия происходят два процесса: уменьшение скорости кристалла за счет действия силы светового давления, и уменьшение внутренней температуры атомов в кристалле за счет антистоксовой флуоресценции. Следует отметить, что важную роль в обоих процессах оптического охлаждения играет спонтанная релаксация со штарковски расщепленных подуровней возбужденного электронного уровня иона Yb³⁺. В результате спонтанной релаксации по простейшему характерному времени, определяемому временем жизни возбужденного уровня иона иттербия, испускаются фотоны, энергия которых больше энергии поглощенных фотонов, что приводит к уменьшению внутренней температуры нанокристалла. Кинетическая энергия нанокристалла уменьшается в результате действия коллективного эффекта отдачи, который обусловлен участием всех находящихся в нанокристалле ионов Yb³⁺. Задача учета силы светового давления при взаимодействии оптического поля со всеми ионами иттербия нанокристалла требует моделирования процесса охлаждения с учетом вероятностного характера индивидуальных актов вынужденного поглощения и спонтанного испускания (флуоресценции) фотонов поля ансамблем ионов.

Разработанная в рамках настоящей работы модель резонансного взаимодействия легированного нанокристалла позволяет описать процесс оптического охлаждения с учетом случайности актов вынужденного поглощения и спонтанного испускания ионами фотонов. Особенность данной модели состоит в реализации вероятностного характера как поглощения излучения ионами иттербия, так и поглощения примесных атомов (Fe и т.п.).

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ АТОМНЫХ ИНТЕРФЕРОМЕТРОВ ДЛЯ ПРЕЦИЗИОННЫХ ИЗМЕРЕНИЙ ВРАЩЕНИЙ И СИЛЫ ТЯЖЕСТИ

Кабанов С.А., Рождественский Ю.В.

Научный руководитель – проф., д.ф.-м.н. Рождественский Ю.В.

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

tank-assassin@yandex.ru

Одним из главных их достоинств является точность. Помимо оптических интерферометров, которые обычно подразумеваются, когда речь заходит о названной области, имеются интерферометры атомные. Существует перспектива использования атомных интерферометров в физике наноструктур для изучения тонких плёнок и нанесений периодических структур на подложки, но для понимания вопроса удобнее всего начать с рассмотрения теории и распространённых экспериментов по гравиметрии и гироскопии.

В работе показаны некоторые из потенциальных приложений атомной интерферометрии.

При действии осциллирующего поля (например, оптического) на атомную систему возникают осцилляции населённости внутри этой системы между основным и возбуждённым состоянием. Вероятности инверсии системы описываются так называемыми полосами Рамсея; смысл этих последних заключается в том, что чем больше частота возбуждающего излучения отстроена от резонансной частоты перехода между основным и возбуждённым состоянием, тем меньше вероятность полной инверсии, при нулевой же отстройке эта вероятность теоретически равна единице. Это наблюдение позволяет осуществлять скоростную селекцию атомов при освещении их пучка, например, лазерным лучом. Данные расчёты могут быть применены для конструирования новых и совершенствования уже используемых экспериментальных установок, примеры которых приведены ниже.

Интерферометр, сконструированный на основе вышеописанной теории, оказывается чрезвычайно чувствительным прибором и позволяет осуществлять прецизионные измерения различных величин. В частности, одним из приложений является гравиметр – прибор, позволяющий измерять точное значение силы тяжести. Возможность этого устройства обусловлена тем, что атомы являются массивными объектами, а значит действующая на них сила тяжести видоизменяет интерференционную картину. Отличия полученного результата от рассчитанного в отсутствие силы тяжести позволяют устанавливать величину этой самой силы. Гравиметры полезны как в фундаментальной науке, где, например, при помощи системы гравиметров доступно устройство абсолютного гравиметра для измерения константы силы тяжести, так и в прикладных областях, как, например, геодезия, где с помощью гравиметрии осуществляется разведка полезных ископаемых.

Была кратко рассмотрена теория атомной интерферометрии, показаны возможные способы перенесения её на эксперимент. Продемонстрированы возможности применения названных приборов для прецизионных измерений вращений и силы тяжести, успехи в этой области позволят использовать названные приборы в измерениях на тонких плёнках и для нанесения и исследования периодических структур на подложках.

ГИБРИДНЫЕ НАНОСТРУКТУРЫ НА ОСНОВЕ НАНОЧАСТИЦ TiO_2 И КВАНТОВЫХ ТОЧЕК CdSe

Булгакова А.В., Колесова Е.П., Маслов В.Г., Дубовик А.Ю., Гунько Ю.К.

Научный руководитель – д.ф.-м.н., доцент Орлова А.О.

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

anastasiya.makovectkaya@mail.ru

Наночастицы диоксида титана (НЧ TiO_2) находятся в центре внимания многих исследований благодаря их высокой фотокаталитической активности [1]. Эта особенность НЧ TiO_2 обусловлена их способностью генерировать активные формы кислорода (АФК). Наличие большой концентрации АФК в бактериальных клетках приводит к их разрушению, и таким образом осуществляется антибактериальная активность диоксида титана. Однако использование НЧ TiO_2 в качестве антибактериальных систем ограничено из-за его широкой запрещенной зоны (3,2 эВ). Это означает, что НЧ TiO_2 могут быть активированы только ультрафиолетовым излучением, которое губительно для живых систем. На данный момент были продемонстрированы некоторые подходы к повышению активности НЧ TiO_2 под действием видимого света. Было показано, что комбинация НЧ TiO_2 с полупроводниковыми квантовыми точками (КТ) является одной из наиболее перспективных благодаря уникальным оптическим и электрическим свойствам КТ [2]. Гибридные структуры с КТ могут эффективно действовать при видимом облучении благодаря фотоиндуцированному переносу электрона от КТ к НЧ TiO_2 . Для достижения эффективного переноса электрона в структурах требуется подходящее относительное положение зон проводимости донора (КТ) и акцептора (НЧ TiO_2) с минимальным расстоянием между донором и акцептором [2, 3]. Таким образом, поиск путей разработки структур $\text{TiO}_2/\text{КТ}$ с отличной эффективностью переноса электронов позволит применять эти структуры в антибактериальной терапии.

В данной работе многослойные гибридные структуры $\text{TiO}_2/\text{КТ}$ были сформированы методом Ленгмюра-Блоджетт, который обеспечивает минимальное расстояние между наночастицами. Были использованы КТ CdSe с ядром 2,6 нм, поскольку положение границы зоны проводимости таких КТ является наилучшим для фотоиндуцированного переноса электрона на НЧ TiO_2 [4]. Было обнаружено, что электроны с люминесцентных фракций КТ способны очень быстро переходить в зону проводимости НЧ TiO_2 ($k_{\text{ET}} = 4 \cdot 10^{10} \text{ c}^{-1}$). В связи с тем, что перенос электрона – это конкурирующий с люминесценцией безызлучательный канал дезактивации КТ, эффективность переноса электрона была оценена по тушению люминесценции КТ в присутствии НЧ TiO_2 , которая составила $70 \pm 5\%$. В то же время анализ генерации АФК структур в видимом свете показал, что средняя эффективность переноса электрона составляет $55 \pm 5\%$. Отличие полученных оценок кроется в наличии темной фракции в ансамбле КТ, эффективность переноса электрона от которой меньше, чем от других люминесцирующих фракций КТ. Таким образом, уменьшение темной фракции КТ может повысить эффективность переноса электрона в структурах $\text{TiO}_2/\text{КТ}$ и привести к появлению нового чрезвычайно эффективного антибактериального агента.

- 1 Fagan R. et al. A review of solar and visible light active TiO_2 photocatalysis for treating bacteria, cyanotoxins and contaminants of emerging concern // *Materials Science in Semiconductor Processing*. – 2016. – V. 42. – P. 2-14.
- 2 Sang L., Zhao Y., Burda C. TiO_2 nanoparticles as functional building blocks // *Chemical reviews*. – 2014. – V. 114 (№ 19). – P. 9283–9318.
- 3 Talgorn E. et al. Supercrystals of CdSe quantum dots with high charge mobility and efficient electron transfer to TiO_2 // *Acs Nano*. – 2010. – V. 4 (№ 3). – P. 1723–1731.
- 4 Tvrdy K., Frantsuzov P. A., Kamat P. V. Photoinduced electron transfer from semiconductor quantum dots to metal oxide nanoparticles // *Proceedings of the National Academy of Sciences*. – 2011. – V. 108 (№ 1). – P. 29–34.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ И ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК ИЗ ХИРАЛЬНОГО ДВУХСЛОЙНОГО ГРАФЕНА

Орлов А.В., Тепляков Н.В., Кунделев Е.В., Рухленко И.Д.

Научный руководитель – д.ф.-м.н. Рухленко И.Д.

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

artem.v.orlov@gmail.com

В течение последних трёх десятилетий исследования углеродных наноструктур привлекали серьёзное внимание в связи с их привлекательными для применений физическими и химическими свойствами. Среди широкого разнообразия углеродных наноструктур одними из наиболее обсуждаемых в последние годы являются наноструктуры из повёрнутого двухслойного графена. Повёрнутый двухслойный графен (twisted bilayer graphene, TBG) создается путём наложения двух листов графена и поворотом их друг относительно друга на некоторый угол [1]. Из-за взаимного поворота слоёв в TBG он по своей природе является хиральным, причём круговой дихроизм TBG является особенно сильным по сравнению с его атомной толщиной [2]. Такая выраженная оптическая активность TBG может иметь множество приложений в физике, химии и биомедицине. Из-за внутренней хиральности данного материала можно ожидать, что квантовые точки из TBG будут так же иметь хиральные свойства. Целью данной работы являлось всестороннее теоретическое исследование хиральных оптических свойств коллоидных квантовых точек из TBG.

В данной работе был произведён всесторонний анализ хирального оптического отклика квантовых точек гексагональной, треугольной и ромбовидной формы из TBG, сосредоточенных вокруг областей упаковки AA, AB и SP в муаровой решётке графена. С использованием приближения сильной связи, была рассчитана зависимость энергии электронов в этих квантовых точках от их размера и проанализирована симметрия электронных состояний путем сопоставления состояния неприводимым представлениям диэдральных точечных групп симметрии D_n . Затем симметрии состояния использовались для вывода правил отбора оптических переходов в квантовых точках. Было обнаружено, что наиболее сильная диссимметрия оптических свойств TBGQDs достигается в основном на возбуждениях с внеплоскостной поляризацией, энергии которых не перекрываются с энергиями возбуждений, поляризованных в плоскости. Максимальные значения g-факторов в квантовых точках из хирального графена могут достигать 10^{-2} , что является выдающимся результатом по сравнению с хиральными полупроводниковыми наночастицами, скрученными квантовыми точками из однослойного графена и небольшими органическими молекулами [3]. Сильный хиральный оптический отклик TBGQDs является результатом уникального сочетания внутренней хиральности решетки, пространственного ограничения носителей заряда и планарной структуры TBGQDs.

Таким образом, квантовые точки из повёрнутого двухслойного графена являются очень перспективным материалом для приложений в хиральной нанофотонике. Результаты данной работы были опубликованы в высокорейтинговом рецензируемом зарубежном издании The Journal of Physical Chemistry C [4].

- 1 Ma C. et al. Moiré Band Topology in Twisted Bilayer Graphene // Nano Letters. – 2020. – V. 20 (№ 8). – P. 6076–6083.
- 2 Kim C.-J. et al. Chiral atomically thin films // Nature Nanotechnology. – 2016. – V. 11 (№ 6). – P. 520–524.
- 3 Suzuki N. et al. Chiral graphene quantum dots // ACS Nano. ACS Publications. – 2016. – V. 10 (№ 2). – P. 1744–1755.
- 4 Tepliakov N. V. et al. Twisted Bilayer Graphene Quantum Dots for Chiral Nanophotonics // Journal of Physical Chemistry C. – V. 124 (№ 41). – P. 22704–22710.

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ИНДОЦИАНИНА ЗЕЛЕНОГО В МОЛЕКУЛЯРНОЙ И НАНО-ФОРМЕ С ЦЕЛЬЮ УВЕЛИЧЕНИЯ ВРЕМЕНИ ЕГО ЦИРКУЛЯЦИИ В ОПУХОЛИ И В ЕЕ МАКРООКРУЖЕНИИ ДЛЯ ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО ИМАДЖИНГА

Фаррахова Д.С., Маклыгина Ю.С., Грачев П.В., Романишкин И.Д., Яковлев Д.В., Рябова А.В., Лощенов В.Б.

Научный руководитель – д.ф.-м.н., профессор Лощенов В.Б.

Институт Общей Физики им.А.М.Прохорова Российской Академии Наук, Москва, Россия
farrakhova.dina@mail.ru

Флуоресцентная диагностика является наиболее перспективным способом диагностики высокоинвазивных опухолевых процессов. Переход к нано форме фотосенсибилизаторов и флуоресцентных красителей является актуальным и приоритетным ввиду возможности значительного повышения чувствительности и тропности препарата по сравнению с его молекулярной формой. Максимально быстрым, с точки зрения внедрения в клиническую практику, является путь использования нано-формы препаратов уже разрешенных к применению в молекулярной форме. Одним из таких препаратов, используемых в клинике в качестве флуоресцентного контрастирующего агента, является индоцианин зеленый (ICG). ICG имеет пики поглощения в ближнем инфракрасном (БИК) диапазоне, соответствующем первому окну спектральной прозрачности биологической ткани, благодаря чему является перспективным препаратом для визуализации кровотока. Итак, целью данного исследования было выявить физические и спектральные особенности фотосенсибилизатора в нано-форме в различном биологическом окружении. В этой связи в работе был использован водный коллоидный раствор стабильных наночастиц ICG, в которых молекулы ICG имеют не ковалентную упаковку, а находятся в состоянии J-агрегатов. Анализ фармакодинамики такого коллоидного раствора наночастиц ICG в сравнении с обычным водным раствором ICG был проведен на модели мелких лабораторных животных *in vivo* с применением спектроскопического и видеофлуоресцентного методов. С этой целью было проведено исследование распределения флуоресценции, соответствующей раствору ICG и J-агрегатам ICG по органам животных с течением времени после внутривенного введения препаратов

Предложенное детальное рассмотрение позволяет заключить, что ввиду сложности процессов, происходящих в опухоли и ее многокомпонентности, трансформация ICG из нано формы в молекулярную происходит именно там под действием агрессивной среды опухолевых клеток. Результаты, полученные на модели гипофаренгальной опухоли человека у экспериментальных животных, позволили установить фармакокинетику (период максимального накопления и выведения) для каждого из исследуемых флуоресцентных красителей. Были установлены максимумы накопления для исследуемых флуоресцентных красителей в молекулярной и нано-форме в опухолевой ткани, в норме и в выводящих органах. Полученные результаты показали разное время накопления исследуемых флуоресцентных красителей в патологической ткани: молекулярная форма ICG – 5 мин, ICG NP – 24 часа. Формирование J-агрегатов является альтернативным подходом к повышению общей стабильности ICG. В исследовании флуоресценция, в основном, происходила H-агрегатов ICG NP при возбуждении длиной волны 633 нм и J-агрегатов ICG NP при возбуждении 785 нм и 800 нм, при этом J-агрегаты представляют интерес для дальнейших исследований. Также, было отмечено, что основная часть наночастиц, проявляющаяся спектроскопические свойства, относящиеся к J-агрегатам, находятся в размерном диапазоне от 220 нм до 400 нм. ICG является более подходящим для ФД кровотока и лимфотока вблизи злокачественного новообразования за счет быстро выведения из организма.

Коллоидный раствор J-агрегатов ICG более предпочтителен с точки зрения увеличения времени его циркуляции в организме и, соответственно, времени его накопления и локализации в зоне опухоли и в ее окрестностях, что делает возможным проведение флуоресцентного интраоперационного имаджинга.

ИССЛЕДОВАНИЕ ГЕНЕРАЦИИ АКТИВНЫХ ФОРМ КИСЛОРОДА НАНОКОМПОЗИТАМИ AIS/TiO₂ ПОД ДЕЙСТВИЕМ ИЗЛУЧЕНИЯ РАЗНЫХ СПЕКТРАЛЬНЫХ ДИАПАЗОНОВ И ИХ АНТИБАКТЕРИАЛЬНОЙ АКТИВНОСТИ

Баранов К.Н., Колесова Е.П., Орлова А.О.
Научный руководитель – к.ф.-м.н., Колесова Е.П.
Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия
baranov.const@mail.ru

Устойчивость бактерий к антибиотикам остро ставит вопрос о необходимости поиска новых альтернативных методов терапии бактериальных инфекций. Оксидативный стресс бактерий при взаимодействии с активными формами кислорода (АФК) может привести к дальнейшей гибели бактерий. Данный механизм лежит в основе фотодинамической терапии бактериальных инфекций. Эффективным источником генерации АФК являются наноструктурированные материалы, в частности наночастицы диоксида титана (TiO₂). Формирование гибридных структур на основе полупроводниковых квантовых точек и наночастиц TiO₂ позволит расширить диапазон активности структур в видимую область спектра, за счет сочетания оптических свойств КТ и фотокаталитических свойств TiO₂. Функциональность структур под действием видимого излучения связана с переносом электрона от КТ к TiO₂. Формирование гибридных структур на стадии синтеза позволит минимизировать расстояние между донором и акцептором и контролировать оптические свойства системы изменением условий их синтеза. Примером такой системы являются наноконкомпозитные частицы, состоящие из люминесцирующей КТ AgInS₂, покрытой оболочкой TiO₂. Высокая константа скорости переноса электрона и низкая токсичность ввиду отсутствия ионов Cd делает тройные квантовые точки AgInS₂ делает их перспективной основой для такого рода структур. Целью данной работы стало выявление закономерностей генерации АФК наноконкомпозитами AIS/TiO₂ под действием излучения разных спектральных диапазонов и оценка антибактериальной активности наноконкомпозитов.

При синтезе наноконкомпозитов на КТ AgInS₂ производилось наращивание оболочки TiO₂. Размер наноконкомпозитов составляет 70-100 нм, и в результате синтеза происходит формирование устойчивых агрегатов наноконкомпозитов. Оценка эффективности генерации АФК была проведена с помощью химических сенсоров р-нитрозодиметиланилин (RNO) и кумарин-3-карбоновая кислота (3-CCA), которые широко используются для исследования структур на основе TiO₂. Анализ полученных данных показал, что наноконкомпозиты AIS/TiO₂ эффективно генерируют гидроксильный радикал и супероксид под действием излучения УФ диапазона и супероксид под действием видимого диапазона. Следует отметить, что химические сенсоры являются сложно комплексной системой и определение оптимальных условий для проведения эксперимента, при котором не будет ложноотрицательных и ложноположительных откликов сенсора, является нетривиальной задачей. Антибактериальная активность наноконкомпозитов была оценена на бактерии *Mycobacterium smegmatis* mc² 155 под действием излучения с длиной волны 465 нм и составила ~80%.

Продемонстрировано, что наноконкомпозиты AIS/TiO₂ под действием видимого излучения эффективно генерируют супероксид, что подтверждает переноса электрона от AIS ядра к оболочке TiO₂ композита. Синтезированные наноконкомпозиты продемонстрировали 80% антибактериальную активность против бактерии *Mycobacterium smegmatis* mc² 155. Полученные данные свидетельствуют о высокой перспективности такой системы для терапии бактериальных инфекций.

ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ОКСИДА ЦИНКА ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ ЕГО В КАЧЕСТВЕ ТРАНСДЮСЕРНОГО СЛОЯ В ГАЗОВЫХ СЕНСОРАХ

Долматов Д.А., Гущин М.Г., Онищук Д.А.

Научный руководитель – д.ф.-м.н., с.н.с. Вартамян Т.А.

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия
dimonelas@mail.ru

Для изучения сенсорных свойств наноструктур оксида цинка предварительно необходимо получить сам материал, исследовать его оптические свойства и морфологию. В настоящей работе оксид цинка был получен двумя способами: в результате химической реакции в растворе с последующим осаждением образовавшихся наночастиц оксида цинка на подложку при помощи метода спин-коутинга, а также при вакуумном осаждении оксида цинка, испаряемого электронным пучком. В последнем случае одновременно с распылением оксида цинка на ту же подложку из резистивного испарителя напылялось серебро с целью получения наночастиц, обладающих локализованным плазмонным резонансом.

Оксид цинка является широкозонным полупроводником, ширина его запрещенной зоны составляет 3.37 эВ. При возбуждении ультрафиолетовым излучением оксид цинка люминесцирует. Помимо интенсивной краевой люминесценции наблюдалась также люминесценция в зеленой области спектра, связанная с существованием дефектов кристаллической структуры. При изменении окружающей среды интенсивность люминесценции в зеленой полосе изменяется, что позволяет использовать наноструктуры на основе оксида цинка в газовых сенсорах. В полупроводниковых устройствах (выпрямительных и фотодиодов) Оксид цинка применяется также в выпрямителях и фотодиодах, рассчитанных на работу в коротковолновой области спектра. Кроме того, благодаря особенностям зонной структуры оксид цинка в ряде применений обладает преимуществами по сравнению с GaN и ZnSe. Высокая энергия связи экситона (60 мэВ), позволяет наблюдать экситонные эффекты при комнатной температуре.

Для получения наноструктур оксида цинка мы использовали два метода. Первый метод заключался в химическом получении коллоидного раствора наночастиц оксида цинка и нанесении их на диэлектрические подложки на спин-коутере. Второй метод заключался в осаждении оксида цинка в вакуумной установке Kurt J.Lesker PVD-75.

Первый метод базируется на реакции ацетата цинка с гидроксидом натрия NaOH. Для предотвращения осаждения преципитата полученный раствор размешивался в ультразвуковой ванне при $T=65$ °С в течение часа. Увеличение времени и температуры отжига приводит к смещению оптической плотности продукта реакции в длинноволновую область, а также к падению интенсивности люминесценции. Полученная взвесь наносилась с помощью пипетки-дозатора объёмом 100–500 мкл на диэлектрические подложки методом спин-коутинга. Скорость вращения чередовалась в диапазоне 2000–5000 оборотов в минуту. Для увеличения интенсивности фотолюминесценции полученные образцы отжигались при температуре 200 °С. Процесс термического восстановления, окисленного атмосферным воздухом подложки, более чем на порядок должно увеличивать интенсивность экситонной люминесценции. Но наиболее привлекательным для нас следствием отжига является тот факт, что высокотемпературный отжиг удаляет адсорбированный кислород, таким образом возникают кислородные вакансии, поскольку образование обедненного слоя представляет собой истощение свободных носителей заряда у поверхности, а его влияние на ионизацию прямо пропорционально связано с видимым излучением. Также была выполнена УФ-экспозиция для освобождения электронов от поверхностных ловушек, для уменьшения ширины обедненного слоя и усиления образования/излучения экситонов.

При измерении спектров люминесценции изменяя длину волны возбуждающего излучения в пределах длины волны 220–260 нм, было отмечено, что пик интенсивности принимаемого излучения находится на длине волны 353 нм.

Во втором методе был проведён эксперимент по созданию кластеров оксида цинка, совмещенных с серебряными наночастицами. В ходе предыдущих исследований было установлено, что оксид цинка при вакуумном осаждении обладает низкой адгезией к диэлектрическим подложкам. В то же время

серебро при вакуумном напылении легко образует островковые пленки. Было предположено, что в присутствии серебряных наночастиц адгезия оксида цинка увеличится. Кроме того, особый интерес представляло взаимное влияние локализованного плазмонного резонанса в серебряных наночастицах и электронных переходов в оксиде цинка. Для создания описанной выше гибридной наноструктуры в вакуумной установке Kurt J.Lesker PVD-75 было одновременно использовано два вида напыления: термическое напыление серебра и осаждение оксида цинка электронным пучком. Толщина полученного слоя была получена с помощью усредненных значений высот составляющей пленки, равной 20 нм.

Были изучены оптические свойства полученной структуры. На длинах волны возбуждающего излучения на 220 – 240 нм был получен максимум спектра краевой люминесценции – 355 нм. А на длинах волн зеленой полосы люминесценции 490-510 нм были получены наиболее заметные дефектные структуры на 570 нм. Структура была изучена на атомно-силовом микроскопе, в результате чего получен средний размер частиц, который равняется 10 нм.

Из двух вышеописанных методик получения пленок наиболее результативной считается напыление серебром, хотя она тоже имеет недостаток, главный из них это влияния серебра на изменение процессов люминесценции. Работа по этой тематике ведется и по сей день, однако уже сейчас можно выбрать эталонную в наших условиях методику получения наноструктур оксида цинка, обладающих фотолюминесценцией в зеленой области спектра.

Другие методики, связанные непосредственно проведением химических реакций, оказались менее результативными. Это связано с тем, что необходимо получить раствор в строго определённой концентрации и с наименьшим влиянием наружного излучения. Вдобавок к этому, погрешность электронных весов способствует нарушению пропорций.

ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ГИДРОФОБНЫХ МОЛЕКУЛ ПОРФИРИНОВОГО РЯДА

Тучин В.С., Маслов В.Г., Орлова А.О.

Научный руководитель – к.ф.-м.н., Колесова Е.П.

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

vlad.fioitu56@gmail.com

Задача поиска и развития методов эффективной терапии онкологических заболеваний является одной из наиболее остро стоящих в современном мире. Метод фотодинамической терапии (ФДТ) является одним из наиболее щадящих и одновременно с этим эффективных методов диагностики и терапии онкологических заболеваний. Он основан на способности сенсibilизаторов активных форм кислорода накапливаться в опухолевых тканях и под действием электромагнитного излучения видимого диапазона переходить в возбужденное состояние, в котором при взаимодействии с ближайшим окружением, генерировать активные формы кислорода, которые в свою очередь запускают механизмы апоптоза или некроза раковых клеток [1]. Соединения тетрапиррольного ряда сегодня широко используются в качестве сенсibilизаторов в ФДТ. Водорастворимые сенсibilизаторы, эффективно применяемые в современной ФДТ, склонны к агрегации при изменении условий окружающей среды, в частности рН. Агрегация молекул приводит к изменению функциональности молекул, а именно на эффективность генерации синглетного кислорода [2]. Гидрофобные молекулы демонстрируют высокую коллоидную стабильность и генерацию АФК, но требуют дальнейшей поверхностной модификаций для использования в терапии. Разработка нового типа биосовместимых фотосенсibilизаторов на основе гидрофобных молекул эффективно генерирующих АФК является актуальной задачей. Целью данной работы являлась оценка эффективности перехода молекулами порфиринового ряда в триплетное состояние на основе анализа их оптических свойств.

В работе исследовались оптические свойства протопорфирина IX и кобальтового комплекса тетраметилового эфира гематопорфирина. Для регистрации спектров поглощения и люминесценции использовались спектрофотометры UV-Probe 3600 и спектрофлуориметр Cary Eclipse. Кинетика люминесценции протопорфирина IX исследовалась с помощью сканирующего люминесцентного микроскопа MicroTime100 (PicoQuant). Спектры магнитного кругового дихроизма регистрировались с помощью спектрофотометра кругового дихроизма J-1500 (Jasco) и приставки MCD-581. Для исследования фотостабильности образцы подвергались длительному воздействию излучения с длиной волны излучения 405 нм и средней мощностью 3 мВт. Анализ спектров поглощения и люминесценции, зарегистрированных в течение облучения, показал, что при длительном облучении не происходит изменения оптических свойств образцов. Эффективность генерации синглетного кислорода протопорфирина IX и кобальтового комплекса тетраметилового эфира гематопорфирина составила 52% и 79% соответственно. Константы скорости генерации синглетного кислорода составили 9.3×10^7 и 11.4×10^7 соответственно [3].

Полученные результаты показали, что оба исследуемых вещества перспективны для создания нового типа фотосенсibilизаторов, так как показали высокую эффективность перехода в триплетное состояние [4]. Также важно отметить, что протопорфирин IX и кобальтовый комплекс тетраметилового эфира гематопорфирина имеют высокую фотостабильность, что является ключевым фактором для ФДТ. В дальнейшем эффективность генерации синглетного кислорода будет оценена экспериментально, по анализу люминесценции кислорода в ИК области.

- 1 Naidoo C., Kruger C.A., Abrahamse H. Photodynamic Therapy for Metastatic Melanoma Treatment: A Review // *Technology in Cancer Research & Treatment*. – 2018. – V. 17. – P. 1–15
- 2 Palewska K. Molecular aggregation in soluble phthalocyanines - Chemical interactions vs. π -stacking // *Optical Materials*. – 2012. – V. 34 (№ 10). – P. 1717-1724.
- 3 Паркер С. Фотолюминесценция растворов. – Москва: МИР, 1972. – 30–75 с.
- 4 Vinklársek I.S., Scholz M., Dedic R., Hála, J. Singlet oxygen feedback delayed fluorescence of protoporphyrin IX in organic solutions // *Photochemical & Photobiological Sciences*. – 2017. – V. 16 (№ 4). – P. 507–518.

ФОРМИРОВАНИЕ КУЛОНОВСКИХ КРИСТАЛЛОВ В ЛИНЕЙНЫХ ИОННЫХ ЛОВУШКАХ С ЗАПИРАЮЩИМИ ЭЛЕКТРОДАМИ

Романова А.В., Рудый С.С., Рождественский Ю.В.

Научный руководитель – д.ф.-м.н., проф. Рождественский Ю.В.

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

anromanna98@gmail.com

Кулоновские кристаллы – упорядоченные структуры, которые формируются в ионных ловушках в результате суперпозиции сил кулоновского взаимодействия и взаимодействия с удерживающим потенциалом ионной ловушки [1]. Локализация наноструктур в ионных ловушках позволяет изучать их свойства без влияния со стороны подложки и окружающей среды [2], а изучение свойств кулоновских кристаллов, формирующихся из наноструктур, позволяет изучать взаимодействие между такими частицами. В настоящий момент наиболее часто рассматривают одномерные (1D) и зигзагообразные (2D) структуры, а более сложные случаи, такие трехмерные структуры, изучены мало. Более того, практически не исследованы радиальные кулоновские кристаллы, формирующиеся в сильно деформированном эффективном потенциале одиночной частицы [3,4]. В настоящей работе представлено теоретическое описание и математическое моделирование радиальных 2D и 1D структур, формирующихся из ионов Ca^+ .

Кулоновские кристаллы можно описать с помощью геометрических параметров, таких как поперечный размер ρ и нормы относительных полярных $||\Delta\phi||$ и азимутальных $||\Delta\theta||$ углов [5]. Анализируя изменение геометрических параметров при изменении энергии системы, можно показать существование различных кулоновских кристаллов и фазовые переходы между возможными устойчивыми конфигурациями. Для примера рассмотрим систему из 7 частиц в случае, когда на силовые электроды подается только переменное напряжение. На Рисунке 1 представлены графики поперечного размера (зеленая линия), относительного полярного угла (синяя линия) и относительного азимутального угла (оранжевая линия) в зависимости от напряжения на запирающих электродах V_{end} .

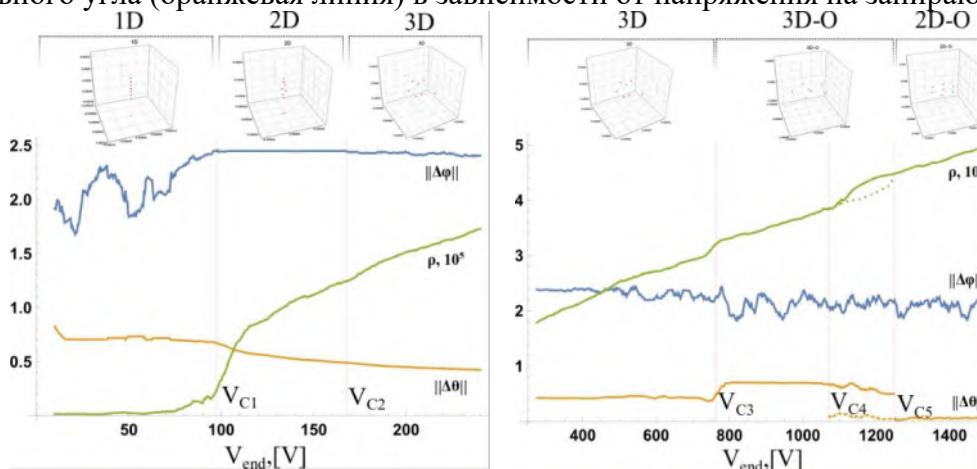


Рисунок 1 – функции поперечного размера (зеленая линия), нормы относительного полярного (синяя линия) и азимутального (оранжевая линия) углов в зависимости от напряжения на запирающих электродах V_{end} . Вертикальными линиями обозначены точки фазовых переходов.

Сверху представлены структуры, формирующиеся в данном диапазоне параметров

Точками фазовых переходов будут являться те точки, в которых характер роста функций резко изменяется. Так, например, область значений напряжения на запирающих электродах до 100В соответствует линейной структуре: так как все ионы лежат на оси z , значение поперечного размера стремится к нулю, а относительный полярный угол не определен. Фазовому переходу от одномерной к двумерной структуре соответствует значение постоянного напряжения $V_{C1} = 100$ В, функция поперечного размера начинает резко расти, а норма относительного полярного угла принимает постоянное значение. Фазовому переходу от двумерной к трехмерной структуре соответствует точка V_{C2} , в которой относительные полярные углы принимают значения от $[0; 2\pi]$, и значение нормы $||\Delta\phi||$ уже не является постоянным. Так, анализируя изменение функций, можно выделить еще три фазовых

перехода – в точках V_{C3}, V_{C4} и V_{C5} . Ожидается, что после перехода к трехмерным структурам будут наблюдаться фазовые переходы только между различными трехмерными конфигурациями. Однако из данного моделирования видно, что в точке V_{C5} наблюдается формирование не трехмерной, а двумерной структуры 2D-О.

Еще более интересный случай при подаче на силовые электроды комбинации переменного и постоянного напряжения, то можно наблюдать формирование различных радиальных двумерных и одномерных структур (Рисунок 2). Такие кристаллы подобны «обычным» кулоновским кристаллам, однако они ориентированы перпендикулярно оси симметрии ловушки. Ранее радиальные 1D кристаллы не наблюдались ни теоретически, ни экспериментально.

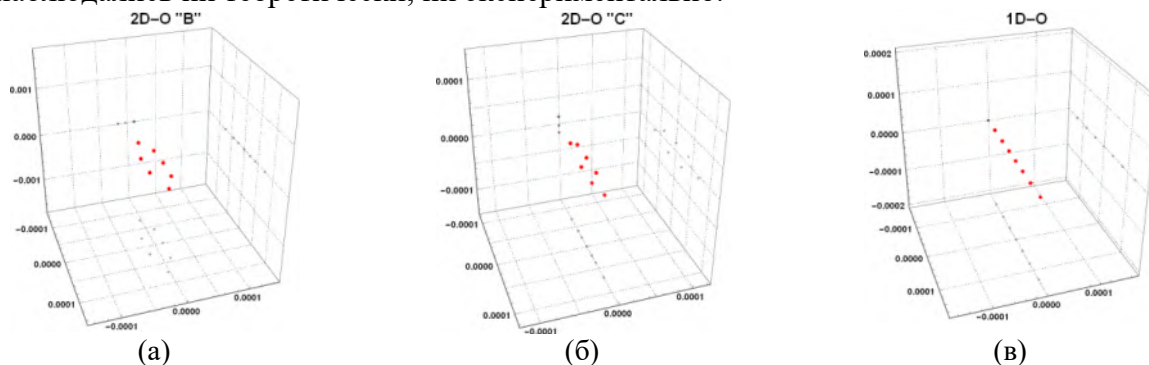


Рисунок 2 – радиальные 2D и 1D кулоновские кристаллы, формирующиеся в линейной квадрупольной ловушке с двумя запирающими электродами при подаче напряжения на силовые электроды а) $U_0 = 1.35\text{В}, V_{end} = 1300\text{В}$; б) $U_0 = 2.1\text{В}, V_{end} = 800\text{В}$; в) при $U_0 = 2\text{В}, V_{end} = 1200\text{В}$

Таким образом, в данной работе теоретически было продемонстрировано, что при значительной величине постоянного напряжения на запирающих электродах наблюдается формирование радиальных кулоновских кристаллов. Результаты моделирования для классического подключения ловушки соответствуют экспериментальным данным для 2D кристаллов, полученным в 2020 году группой Д’Онофрио [6]. Затем было показано, что, если на силовые электроды подается комбинация постоянного и переменного напряжения, формируются ранее не известные одномерные радиальные структуры. Такие кристаллы подобны «обычным» кулоновским кристаллам, однако они ориентированы перпендикулярно оси симметрии ловушки.

- 1 Drewsen M. Ion coulomb crystals // *Physica B: Condensed Matter*. – 2015. – V. 460. – P. 105–113.
- 2 Coppock J. E. et al. Deposition of levitated charged nanoparticles on a substrate using an electrostatic lens // *Proceedings of SPIE*. – 2018. – V. 10723. – P. 107231N:1-9.
- 3 Yan L. L. et al. Exploring structural phase transitions of ion crystals // *Scientific reports*. – 2016. – V. 6 (№ 1). – P. 1–9.
- 4 Rudyi S. S. et al. Outside localization around a toroidal electrode of a Paul trap // *Journal of Physics Communications*. – 2020. – V. 4 (№ 1). – P. 015022.
- 5 Romanova A. V., Rudyi S. S., Rozhdestvensky Y. V. The rigorous criteria for the phase transitions in Coulomb crystals // *arXiv preprint arXiv:2102.08912*. – 2021.
- 6 D’Onofrio M. et al. Radial two-dimensional ion crystals in a linear Paul trap // *arXiv preprint arXiv:2012.12766*. – 2020.

ПОЛУЧЕНИЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ПЛЕНОК ИЗ НАНОЧАСТИЦ SnO₂

Маргарян И.В.

Научный руководитель – к. ф.-м. н., Литвин А. П.

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

igormargaryan@niuitmo.ru

Были исследованы коллоидные наночастицы (КН) SnO₂, полученные низкотемпературным синтезом из SnCl₂·2H₂O и Т-мочевины. Также было исследовано формирование слоя перовскита на осажденных слоях КН SnO₂. Исследование образовавшихся структур проводилось с помощью атомно-силового микроскопа (АСМ).

Электрон-транспортный слой имеет ключевое значение в экстракции носителей заряда из активного слоя солнечного элемента (СЭ) и переносе носителей заряда к электроду. Слой из КН SnO₂ применяется во множестве архитектур СЭ на основе перовскита в качестве электрон-транспортного слоя благодаря высокой эффективности экстракции электронов, высокой проводимости и возможности наносить наночастицы (НЧ) из коллоидного раствора. Тем не менее, проводимость такого слоя НЧ как правило ниже, чем у слоя SnO₂, полученного такими методами как атомно-слоевое осаждение или химическое осаждение. Эта проблема может быть решена методами постсинтетической обработки раствора НЧ и оптимизацией метода осаждения слоя, однако подробных работ по данной тематике найдено не было.

Для получения НЧ SnO₂ был использован низкотемпературный водный синтез. НЧ SnO₂ наносились при температуре 40 °С из водного раствора. Полученные пленки исследовались методами атомно-силовой микроскопии (АСМ). На АСМ изображениях образца, осажденного из водного раствора SnO₂, видно, что слой состоит из крупных агрегатов. Агрегация НЧ может происходить из-за долгого воздействия условий окружающей среды и Ван-Дер-Ваальсова взаимодействия НЧ в коллоидном растворе. Для преодоления этой проблемы было проведено всестороннее исследование агрегации НЧ в коллоидном растворе. Для осаждения НЧ применялись различные параметры температуры и скорости нанесения. Было исследовано влияние растворителя на агрегацию и осаждение слоя. Выяснено, что использование смеси полярных растворителей способствует меньшей агрегации НК в коллоидном растворе и более равномерной поверхности слоя. АСМ изображения полученных образцов показало, что с увеличением концентрации этанола уменьшается склонность НЧ SnO₂ к агрегации в пленке. Для проверки применимости таких пленок для производства СЭ на основе перовскита, было исследовано формирование пленки перовскита поверх пленки SnO₂.

Для получения раствора перовскита MAIPbI₃ в инертной атмосфере были использованы иодид свинца (PbI₂) и иодид метиламмония (MAI) в соотношении 1/1. В качестве растворителя использовались N,N-диметилформамид (DMF) и диметилсульфоксид (DMSO). Также был приготовлен использован раствор антирастворителя: использовался раствор хлорбензола и ацетонитрил (7 % об.). АСМ и SEM изображения полученных пленок доказывают, что такой слой SnO₂ является хорошей основой для роста пленки перовскита и качество пленки перовскита сравнимо с качеством пленки перовскита осажденной на чистое покровное стекло.

В данной работе изучены одни из наиболее перспективных материалов для создания электрон-транспортных слоев в перовскитных СЭ. Были представлены этапы создания, нанесения и исследования электрон-транспортного слоя SnO₂ и активного перовскитного слоя. Была исследована морфология поверхности электрон-транспортного слоя с помощью атомно-силового микроскопа, и определена наиболее подходящая концентрация прекурсора (этанола). Исследование перовскитного слоя также проводилось посредством АСМ. Данные слои в дальнейшем будут использованы для создания полноценной перовскитной СЭ.

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ХИМИЧЕСКОГО ОКРУЖЕНИЯ, СОСТАВА ПРЕКУРСОРОВ И ТЕМПЕРАТУРЫ СИНТЕЗА НА ФОРМИРОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ ПЕРЕХОДОВ В ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ УГЛЕРОДНЫХ ТОЧКАХ

Степаниденко Е.А.

Научный руководитель – к. ф-м. н. Ушакова Е.В.

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

stepanidenko.e@mail.ru

Углеродные точки (С-точки) – это новый люминесцентный наноматериал, хорошо поглощающий излучение в области высоких частот видимого спектра, а также обладающий широкой полосой фотолюминесценции (ФЛ), часто зависимой от длины волны возбуждения. Простота синтеза, низкая токсичность и уникальные оптические свойства позволяют применять С-точки для диагностики и терапии опухолевых заболеваний, а также для создания современных устройств “зеленой” фотоники и др.

Несмотря на возросший интерес к С-точкам за последние годы, все еще существует ряд задач, требующих решения. Во-первых, необходимы детальные исследования, позволяющие точно установить внутреннюю структуру и природу излучения С-точек, а также зависимость этих параметров от используемых прекурсоров для синтеза частиц. Во-вторых, существует проблема, связанная с созданием С-точек с излучением в длинноволновом диапазоне спектра (в том числе в ИК диапазоне) и высоким квантовым выходом (КВ) ФЛ. В-третьих, для создания активных сред устройств фотоники необходимо решить проблему, связанную с тушением ФЛ С-точек в твердом состоянии из-за агрегации наночастиц. Данное исследование посвящено определению состава и свойств С-точек, полученных различными методами синтеза из разных прекурсоров и направлено на решение вышеупомянутых проблем.

В работе было определено влияние дополнительных прекурсоров и растворителя на формирование люминесцентных центров внутри С-точек на основе лимонной кислоты (ЛК), флороглюцина, а также о-фенилендиамина. Было исследовано влияние окружающей среды на центры излучения С-точек, на основе ЛК и этилендиамина. И представлена модель строения данных С-точек, согласно которой частицы можно представить как матрицу из углерода в sp^3 -гибридизации, в которую включены углеродные домены в sp^2 -гибридизации – различные полициклические ароматические углеводороды (ПАУ), обуславливающие ФЛ С-точек. Была установлена температурная зависимость морфологии и оптических переходов С-точек, синтезируемых шаблонным методом из ИК красителя: чем выше температура синтеза, тем более монодисперсные частицы формируются, при этом увеличение температуры синтеза приводит также к разрушению центров излучения в ИК диапазоне спектра. В работе также был разработан метод получения светоизлучающего композитного наноструктурированного материала на основе С-точек и пористых стекол. Предложенный метод позволяет сохранять КВ ФЛ С-точек, избежать агрегации и самотушения, а также подходит для С-точек любого состава.

Таким образом, данное исследование позволяет лучше понять природу ФЛ С-точек и то, как различные параметры влияют на оптические переходы С-точек, что позволит в дальнейшем создавать наночастицы с заданной структурой электронных уровней энергии. Предложенный шаблонный метод и установленные зависимости позволят синтезировать С-точки с ФЛ в длинноволновом спектральном диапазоне. Продемонстрировано, что С-точки являются перспективными для создания композитных люминесцентных материалов. Результаты работы могут применяться в дальнейшем для разработки и создания новых С-точек и материалов на их основе для создания экологичных современных устройств фотоники, а также для применения их в области биомедицины.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТА ПЛАЗМОН-УСИЛЕННОЙ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ В УГЛЕРОДНЫХ ТОЧКАХ

Арефина И.А., Дададжанов Д.Р., Ведерникова А.А.

Научный руководитель – к.ф.-м.н. Ушакова Е.В.

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

irina-arefina97@mail.ru

В настоящее время актуальным и быстроразвивающимся направлением в нанопотонике является создание композитных структур. Одной из наиболее интересных комбинаций наночастиц является комплекс, созданный на основе металлической частицы и флуорофора, из-за возможности увеличения вероятности спонтанной излучательной рекомбинации экситонов в ближнем поле металлических структур (эффект Парселла) и, как следствие, увеличение квантового выхода флуорофора вместе с уменьшением времен затухания ФЛ. Углеродные точки (С-точки) являются люминесцентным материалом с уникальными свойствами, которые демонстрируют большой потенциал во многих применениях. Их преимуществами являются высокая фото- и химическая стабильности, простой синтез, настраиваемая фотолюминесценция (ФЛ) и возможность создания С-точек с люминесценцией в широком спектральном диапазоне, однако высокий квантовый выход (до 80%) наблюдается только в сине-зеленой области спектра. Таким образом, целью этой работы было получение углеродных точек со стабильными и улучшенными оптическими характеристиками.

Для достижения поставленной цели были исследованы оптические свойства углеродных точек в коллоидном растворе с серебряными наночастицами. С-точки были получены сольвотемальным методом из о-фенилендиамина и бензойной кислоты и далее обозначены как AS. Полученные углеродные точки демонстрируют максимум поглощения на длине волны 450 нм и полосой ФЛ на 650 нм с коротковолновым плечом на 490 нм при возбуждении на 405 нм. Коллоидные серебряные наночастицы (НЧ) были получены с помощью метода импульсной лазерной абляции серебряной мишени в жидкости 2-ой гармоникой Nd:YAG лазера с длиной волны 532 нм. Максимум поглощения серебряных НЧ, которые далее будут обозначены как Ag, находится на длине волны 420 нм.

Для изучения взаимодействия углеродных точек и серебряных НЧ в коллоидном растворе была выбрана пара флуорофор-металлическая НЧ, которые соответствуют условиям резонанса, и приготовлены две серии образцов. Концентрация исходные растворы С-точек и серебряных НЧ составляла не более 0.1 отн.ед. Далее производились микродобавки по 10 мкл AS в раствор Ag (Ag + AS) и Ag в раствор AS (AS+Ag). Максимальная добавка составила 100 мкл. При каждом добавлении регистрировались спектры поглощения и ФЛ. Поглощение раствора С-точек при добавлении 100 мкл серебряных НЧ увеличилось, а в случае раствора Ag+100мклAS – уменьшилось, вместе с небольшим изменением формы спектра поглощения. ФЛ раствора С-точек при возбуждении на 405 нм с максимальной добавкой Ag привело к увеличению ее интенсивности. Стоит также отметить, что пик ФЛ на 490 нм вырос в 2 раза, в отличии от пика ФЛ на 656 нм, который не находился в полном резонансе со спектром поглощения серебряных НЧ. Времена затухания люминесценции для растворов Ag+100мклAS и AS+100мклAg составили 2.3 и 1.5 нс, соответственно. Среднее время жизни ФЛ исходного раствора углеродных точек равно 2.5 нс.

Таким образом, в работе было получено усиление полосы люминесценции в 2 раза при возбуждении на длине волны 405 нм вместе с увеличением поглощения С-точек, что может говорить о наличии взаимодействия между флуорофором и серебряными НЧ даже в коллоидном растворе. Небольшое уменьшение времени затухания люминесценции вместе с усиление ФЛ говорит о наличии эффекта Парселла. Следующем этапом будет использование карбодиимида для контроля расстояния между наночастицами и создания комплексов на основе С-точек и металлических НЧ. Результаты, полученные в данной работе, в дальнейшем могут быть использованы для разработки устройств нанопотоники с улучшенными выходными и эксплуатационными характеристиками.

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПЕРЕНОСА ЭНЕРГИИ В КОМПЛЕКСАХ AIS КВАНТОВЫХ ТОЧЕК С МОЛЕКУЛАМИ AL(OH)-СУЛЬФОФТАЛОЦИАНИНА

Муркина А.Д., Дубовик А.Ю., Орлова А.О., Колесова Е.П.

Научный руководитель – к.ф.-м.н, ассистент Колесова Е. П.

Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

murkina.ana@yandex.ru

Онкологические заболевания представляют серьезную опасность и носят глобальный характер. Фотодинамическая терапия – один из нехирургических способов лечения рака и предраковых состояний. В ее основе лежит использование специальных веществ – фотосенсибилизаторов, избирательно накапливающихся в патологических клетках. Взаимодействие света определенной длины волны и фотосенсибилизатора приводит к фотохимической реакции, в результате которой образуются активные формы кислорода, в частности синглетный кислород, взаимодействие с которыми приводит к апоптозу раковых клеток. AL(OH)-сульфофталоцианин (ФЦ) способен эффективно генерировать синглетный кислород при переходе в возбужденное состояние в результате поглощения излучения. Данный факт привел к разработке лекарственных препаратов на основе ФЦ, успешно применяющихся для ФДТ. Формирование комплексов на основе молекул ФЦ и полупроводниковых квантовых точек (КТ) позволит расширить спектральный диапазон активности фотосенсибилизатора. За счет эффективного безызлучательного переноса энергии от КТ к ФЦ такие структуры будут генерировать синглетный кислород под излучением широкого спектрального диапазона. Использование AgInS_2 тройных КТ за счет отсутствия ионов Cd в составе является перспективной основой комплексов для биомедицинских приложений. Целью данной работы стала оценка эффективности переноса энергии в комплексах AIS КТ с молекулами ФЦ, при различной архитектуре КТ.

В ходе работы были созданы комплексы AgInS_2 (AIS), AIS/ZnS квантовых точек с молекулами AL(OH)-сульфофталоцианина, комплексы формировались путем добавки стокового раствора молекул красителя к водному раствору квантовых точек в соотношении 0.25:1, 0.5:1, 1:1, 3:1, 5:1 молекул ФЦ к раствору КТ. Нарастивание оболочки ZnS на КТ приводит к трехкратному увеличению квантового выхода люминесценции и коротковолновому сдвигу спектров люминесценции, что сопровождается уменьшением интеграла перекрытия спектров донора и акцептора примерно на 40%. Несмотря на это, теоретическая эффективность переноса энергии составляет ~100 % в обоих случаях. Анализ оптических свойств сформированных комплексов показал агрегацию молекул в комплексах, что было подтверждено с помощью спектроскопии МКД. Экспериментальная оценка тушения люминесценции КТ в комплексах показала, что 73 % КТ связаны в комплексы с молекулами, и эффективность переноса энергии для AIS и AIS/ZnS КТ составляет 80% и 35% соответственно.

Продемонстрировано, что несмотря на меньший квантовый выход люминесценции безоболочечных КТ AgInS_2 , эффективность внутрикомплексный переноса энергии по механизму Ферстера (FRET) для них составляет 80%. В то время как для КТ $\text{AgInS}_2/\text{ZnS}$ эта величина составляет всего 35% за счет увеличения расстояния между донором и акцептором и уменьшения интеграла перекрытия спектров. Полученные результаты свидетельствуют о высокой перспективности комплексов AIS-ФЦ для ФДТ, и в дальнейшем будет проведена оценка фотодинамического эффекта на раковых клетках.

ИССЛЕДОВАНИЕ НОВЫХ КОНЬЮГАТОВ НА ОСНОВЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК AIS/ZNS И ФОТОСЕНСИБИЛИЗАТОРА ФТАЛОЦИАНИНА АЛЮМИНИЯ ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ ФОТОТЕРАНОСТИКИ

Яковлев Д.В.^{1,3}, Колесова Е.П.², Аннас К.И.², Фаррахова Д.С.³, Сизова С.В.¹, Орлова А.О.², Олейников В.А.¹,

Научный руководитель – д.ф.-м.н., проф. Олейников В.А.

¹ Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН, Москва, Россия

² Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

³ Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН, Москва, Россия
yakovlevrsmu@gmail.com

На сегодняшний день люминесцентные коллоидные полупроводниковые нанокристаллы, также известные как квантовые точки (КТ), представляют большой интерес для применения во многих областях, особенно в биомедицинских приложениях, таких как нацеливание на опухоли, диагностика и долгосрочная биовизуализация [1, 2]. К сожалению, обычно изучаемые квантовые точки II – VI или III – V групп, содержащие металлы «класса А», такие как: Cd, As, Hg и Pb, вряд ли могут быть использованы в биологических исследованиях из-за их известной токсичности [3, 4]. В связи с этим перспективной представляется разработка и исследование биомаркеров на основе КТ из относительно не токсичных полупроводников I-III-VI групп, таких как CuInS₂ и AgInS₂ (AIS). Помимо этого, КТ AIS способны самостоятельно генерировать активные формы кислорода (АФК) при лазерном воздействии, что при конъюгации с молекулами фотосенсибилизатора (ФС) может повысить эффективность проводимой фотодинамической терапии (ФДТ) [5]. На сегодняшний день для проведения флуоресцентной диагностики (ФД) и ФДТ онкологических и воспалительных заболеваний используют различные классы фотосенсибилизаторов, одним из которых является фталоцианин алюминия с коммерческим названием “Фотосенс”. Этот ФС хорошо себя зарекомендовал в диагностике и лечении многих раковых заболеваний [6]. Квантовый выход флуоресценции фталоцианина алюминия 57%-85%. При этом он имеет ряд недостатков, одним из которых является быстрое выведение из зоны интереса. Материалом, лишенным такого недостатка, являются коллоидные квантовые точки. Среднее время выведения квантовых точек из организма мышей составляет более одной недели при однократном внутривенном введении [7]. Эта характеристика может также повысить эффективность терапии из-за отсутствия необходимости постоянных инъекций ФС перед процедурой ФДТ.

Исходя из этого были синтезированы полупроводниковые КТ AIS/ZnS с соответствующими спектроскопическими свойствами для последующей эффективной конъюгации с фотосенсибилизатором. Проведена конъюгация карбодииимидным способом коллоидных КТ AIS/ZnS и уже разрешенным к клиническому применению фотосенсибилизатором - фталоцианином алюминия, с целью повышения эффективности биоимиджинга, а также ФДТ. Показана эффективность Фёсторовского резонансного переноса энергии с полупроводниковых КТ на молекулы фотосенсибилизатора.

- 1 Yang Y. et al. High-efficiency light-emitting devices based on quantum dots with tailored nanostructures // *Nature Photonics*. – 2015. – V. 9. – P. 259–266.
- 2 Yuan M., Liu M., Sargent E. H. Colloidal quantum dot solids for solution-processed solar cells // *Nature Energy*. – 2016. – V. 1. – P. 16016.
- 3 Liu B.R. et al. Cellular Internalization of Quantum Dots Noncovalently Conjugated with Arginine-Rich Cell-Penetrating Peptides // *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*. – 2010. – V. 10 (№ 10). – P. 6534–6543.
- 4 Qu L., Peng X. Control of photoluminescence properties of CdSe nanocrystals in growth // *Journal of the American Chemical Society*. – 2002. – V. 124. – P. 2049–2055.
- 5 Su Y. et al. The cytotoxicity of CdTe quantum dots and the relative contributions from released cadmium ions and nanoparticles properties // *Biomaterials*. – 2010. – V. 31. – P. 4829–4834.

- 6 Shiryaev A.A., et al. Photodynamic therapy of classic Kaposi's sarcoma with video-fluorescence control // Photodiagnosis and Photodynamic Therapy. – 2021. – V.35. – P. 102378.
- 7 Истомина М. С и др.. Исследование возможности использования коллоидных квантовых точек на основе AgInS₂/ZnS для флуоресцентного имиджинга в сравнении с флуорофорами, закрепленными на поверхности наночастиц // Трансляционная медицина. – 2017. – Т. 4 (№ 4). – С. 56–65.