УДК 544.723.2

**Получение спектров флуоресценции углеродных нанотрубок,**

 **внедренных в кристаллическую матрицу**

**А.К. Стародубцева, Т.А. Меределина**

*Благовещенский государственный педагогический университет (г. Благовещенск)*

*starodubtseva\_an@mail.ru*

*В данной работе получены спектры флуоресценции углеродных нанотрубок, внедренных в кристаллические матрицы гексана, толуола и орто-ксилола. Показано, что свойства матрицы существенно влияют на спектральные характеристики. Выявлен наиболее приоритетный растворитель для получения линейчатых спектров углеродных нанотрубок.*

Углеродные нанотрубки (УНТ) обладают уникальными физическими свойствами и имеют большой потенциал применения: производство и использование сверхпрочных волокон, изготовление полевых логических схем и чипов памяти, адсорбентов, нанокатализаторов, материалов оптоэлектроники, сенсорных систем и многое другое [1]. Существует множество методов измерения и исследования наноструктур. Информацию о морфологии кристалла могут дать рентгеновский структурный анализ, масс-спектрометрия, электронная спектроскопия, расстояние между колебательными уровнями энергии молекул и атомов можно определить применяя инфракрасную и рамановскую спектроскопию. Однако ни один из приведенных методов не позволяет оценить квантовые переходы электронов внутри атома. Информацию о колебательной структуре излучающих молекул можно получить по узким линиям спектра люминесценции замороженных растворов. В данной работе получены спектры люминесценции многослойных углеродных нанотрубок, внедренных в кристаллическую матрицу нескольких растворителей.

Углеродные многослойные нанотрубки представляют собой цилиндрические структуры, вложенные друг в друга, диаметры которых могут составлять от 3 до 40 нм, а длины достигать нескольких микрон, заканчиваются трубки как правило фуллеренными полусферами С240. Каждый цилиндр это гигантская молекула, в которой атомы углерода sp2 – гибридизированы, три электрона образуют прочные σ-связи, четвертый электрон входит в π-электронную подсистему молекулы. Исследуемые растворы нанотрубок имели концентрации 10-7, 10-8, 10-9 моль/л в н-гексане СН3(СН2)4СН3 и двух ароматических растворителях орто-ксилоле C₆H₄(CH₃)₂ и толуоле C₆H₅(CH₃). Молекула н-гексана представляет собой линейную цепь шести атомов углерода, соединенных одинарными связями, орто-ксилол и толуол состоят из бензольного кольца, соединенного с двумя и одной метильными группами соответственно. Готовые растворы запаивались в трубки и замораживались в жидком азоте при температуре 77,3 К, возбуждение осуществлялось твердотельным лазером с длиной излучения 337 нм. Регистрация спектров флуоресценции производилась на спектрографе ИСП-51 с применением ПЗС линейки TCD1304DG. Для расшифровки спектров написана и использовалась программа №2017616306 «Модуль автоматизации спектрального анализа для спектрографа ИСП-51» [2].

Характеристики спектров флуоресценции УНТ в гексане, орто-ксилоло и толуоле представлены в табл. 1. Видно, что спектр представляет собой одну линию полушириной от 1,71 см-1 до 2,04 см-1 с максимумом в районе 480 нм. Интенсивность линии в каждом растворители увеличивается с ростом концентрации растворенного вещества. В свою очередь ширина линии определяются множеством степеней свободы многоатомных молекул нанотрубок. К сужению линий приводит ограничение степеней свободы, для этого желательно свести взаимодействие молекул исследуемого вещества с матрицей к минимуму. Этому способствует то, что, в условиях низкой концентрации, молекулы нанотрубок изолированы друг от друга, а растворители матрицы не способны образовывать водородных связей. При температуре жидкого азота матрица кристаллизуется, «вымораживая» многочисленные колебательные и вращательные состояния, переходы между электронными состояниями дают ультрафиолетовый или видимый спектры.

*Таблица 1)*

**Характеристики спектра флуоресценции углеродных нанотрубок**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Концентрация, моль/л | Длина волны, нм | Интенсивность, относ. ед. | Полуширина, см-1 |
| Гексан |
| 10-7 | 479,72 | 1421 | 1,9 |
| 10-8 | 479,75 | 1092 | 1,88 |
| 10-9 | 479,71 | 1003 | 1,9 |
| Орто-ксилол |
| 10-7 | 479,55 | 1082 | 1,71 |
| 10-8 | 479,57 | 1043 | 1,93 |
| 10-9 | 479,55 | 949 | 1,86 |
| Толуол |
| 10-7 | 479,60 | 984 | 1,86 |
| 10-8 | 479,57 | 948 | 1,96 |
| 10-9 | 479,55 | 864 | 2,04 |

Эксперимент показал, что при концентрации 10-7 моль/л спектры во всех матрицах имеют максимальную интенсивность. При сравнении спектра УНТ в разных растворителях при концентрации 10-7 моль/л, заметно, что наиболее удобной матрицей для УНТ является гексан. Спектр в матрице гексана самый интенсивный, это можно объяснить геометрией молекулы гексана, молекула вытянута и способна принимать различные формы, поворачиваясь около простых [σ-](https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%A1%D0%B8%D0%B3%D0%BC%D0%B0-%D1%81%D0%B2%D1%8F%D0%B7%D1%8C)связей (таб. 2). В отличии от гексана орто-ксилол и толуол, обладая ароматической природой, могут взаимодействовать с π-электронной системой нанотрубок.

*Таблица 2)*

**Характеристики растворителей**

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Свойство | Гексан (C₆H₁₄) | Орто-ксилол (C8H10) | Толуол (C7H8) |
| Молекулярная масса, г/моль | 86,18 | 106,17 | 92,14 |
| Плотность, г/см³ | 0,660 | 0,880 | 0,867 |
| Температура кристаллизации, °C | -95 | -25 | -95 |
| Диэлектрическая проницаемость | 1,89 | 2,56 | 2,38 |
| Полярность (индекс полярности) | 0,0 | 2,5 | 2,4 |
| Вязкость при 20°C, мПа·с | 0,326 | 0,81 | 0,59 |
| Растворимость фуллерена C₆₀, мг/мл | 0,0028 | 6,0 | 2,8 |
| Длина молекулы, нм | 0,72-0,73 | 0,9 | 0,9 |
| Структурная формула молекулы |  |  |  |

При изучении объемных молекул УНТ важно учитывать свойства растворителей, которые могут оказывать влияние на спектральные характеристики. Растворители с низкой полярностью, такие как гексан, минимально взаимодействуют с молекулами нанотрубок, что приводит к сужению спектральных линий.

**Л И Т Е Р А Т У Р А**

1. Кирчанов В. С. Наноматериалы и нанотехнологии: учебное пособие / В. С. Кирчанов. – Пермь. Изд-во Перм.НИПУ. – 2016. – 193 с.

2. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ №2017616306 «Модуль автоматизации спектрального анализа для спектрографа ИСП-51». Автор: Антонов А.А. Зарегистрировано в Реестре программ для ЭВМ 07 мая 2019 г.