

## Углеродные наночастицы с оптическими переходами в красной области спектра

Ушакова Е.В.<sup>1,2</sup>, Степаниденко Е.А.<sup>1</sup>, Ведерникова А.А.<sup>1</sup>, Тучин В.С.<sup>1</sup>, Черевков С.А.<sup>1</sup>

*elena.ushakova@itmo.ru*

<sup>1</sup> Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

<sup>2</sup> Городской университет Гонконга, Гонконг, КНР

Углеродные наночастицы с размерами до 20 нм и фотолюминесценцией в видимом и ближнем инфракрасном спектральных диапазонах являются сравнительно новым представителем углеродных наноматериалов. Энергетическая структура таких наночастиц зависит как от используемых прекурсоров и параметров синтеза (температура, время реакции и пр.), так и от взаимодействия со средой. Углеродные наночастицы являются биосовместимыми и дешевыми в производстве, в связи с чем являются привлекательными для их использования в качестве люминесцентных маркеров в биомедицине. Особый интерес привлекают наночастицы с оптическими переходами в красной и ближней инфракрасной областях спектра для избежания перепоглощения и автофлуоресценции тканей, что, в свою очередь, приводит к увеличению сигнал/шум при визуализации и качества изображений биологических образцов.

Наша группа оптимизировала синтез углеродных наночастиц на основе реакции лимонной кислоты и формамида с оптическими переходами в красной спектральной области. Было показано, что, начиная с молярного соотношения молекул лимонной кислоты к формамиду равного 1 к 4, происходит формирование оптического центра с максимумом полосы фотолюминесценции на 620 нм с квантовым выходом равным 19% [1]. Для дальнейшего применения углеродных наночастиц для биовизуализации нами был разработан метод функционализации поверхности различных углеродных наночастиц с оптическими переходами в зеленой и красной спектральных областях [2]. Было показано успешное создание оболочки из молекул L-цистеина, ковалентно связанных с поверхностью наночастиц, при этом спектры поглощения и фотолюминесценции не изменились. Для дальнейшей разработки новых типов углеродных наночастиц нами была разработана модель машинного обучения для предсказания оптических откликов углеродных наночастиц в красной и ближней инфракрасной областях спектра [3]. Для этого была собрана и проанализирована база данных, включающая в себя параметры синтеза и положения полос поглощения и фотолюминесценции со значениями квантового выхода фотолюминесценции, которая использовалась в качестве материала для обучения различных моделей машинного обучения. Сравнение экспериментально полученных данных и данных, предсказанных регрессионной моделью, показало хорошее качество разработанной модели. Работы были проведены при финансовой поддержке Российского научного фонда (22-13-00294).

### Ссылки

1. E.A. Stepanidenko, A.A. Vedernikova, M.D. Miruschenko, D.R. Dadadzhyanov, D. Feferman, B. Zhang, S. Qu, E.V. Ushakova, *JPC Lett* (2023), **14**, 11522.
2. A.A. Vedernikova, M.D. Miruschenko, I.A. Arefina, J. Xie, H. Huang, A.V. Koroleva, E.V. Zhizhin, S.A. Cherevko, A.S. Timin, K.A. Mitusova, S.A. Shipilovskikh, E.V. Ushakova, *JPC Lett* (2023) **15**, 113.
3. V.S. Tuchin, E.A. Stepanidenko, A.A. Vedernikova, S.A. Cherevko, D. Li, L. Li, A. Döring, M. Otyepka, E.V. Ushakova, A.L. Rogach, *Small* (2024), 2310402.