

Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiect în anul 2025

Cifra proiectului **25.80012.5007.38TC**

Denumirea Proiectului **Cercetarea proprietăților fotocatalitice a nanomaterialelor 2D calcogenide**

Rezumat în limba română pentru anul 2025 1 pagină

Cercetarea din prima etapă a proiectului prezintă investigația cuprinzătoare a posibilității obținerii nanostructurilor din SnS, SnS₂ din cristale masive, prin exfolierea mecanică cu ajutorul ultrasunetelor, și studiul proprietăților nanostructurilor obținute. Nanostructurile au fost obținute în baie cu ultrasunete în soluție apoasă, la frecvența de 35 kHz.. Au fost investigate proprietățile morfologice, structurale și optice. Analiza difracției cu raze X a confirmat prezența fazei ortorombice pentru SnS și fazei hexagonale pentru SnS₂. Principalele reflexii detectate ale SnS au corespuns planurilor (013), (022), (122), (016) și (310). Reflexiile cele mai intense ale SnS₂ s-au regăsit la planurile (012), (003), (110), (103), (112), (201) și (005). Absența reflexiilor suplimentare și a maximelor cu rata FWHM înaltă, denotă puritatea fazei și lipsa impurităților semnificative. Imaginile obținute cu ajutorul microscopiei electronice cu baleiaj (SEM) dovedește obținerea nanostructurilor din SnS și SnS₂ cu dimensiuni în diapazonul 50 – 3000 nm, cu grosimea pînă la 100 nm. Din măsurătorile de transmisie și reflexie au fost calculate spectrele de absorbție după metoda Tauc și determinate marginile de absorbție corespunzătoare energiilor benzilor interzise, pentru SnS fiind de $E_g \approx 1,25$ eV și pentru SnS₂, $E_g \approx 2,0$ eV. Ambele materiale au banda interzisă indirectă. Valoarea absorbției pentru nanostructurile din SnS₂ este de ordinul 10^4 cm⁻¹, iar a SnS este de 10^5 cm⁻¹. Împrăștierea Raman a fost măsurată cu lungimea de undă de excitare 633 nm. Spectrele Raman oferă o confirmare suplimentară a fazelor cristaline. În spectrul Raman pentru SnS au fost observate modurile vibraționale la frecvențe 96, 163, 188, 222, 307 cm⁻¹ și 205, 315 cm⁻¹ pentru SnS₂. Analiza Raman a confirmat absența fazelor mixte și prezența numai fazelor dorite. Lățimea redusă a benzilor Raman arată un grad bun de cristalinitate. Analizele SEM, XRD și Raman au confirmat formarea structurilor de dimensiuni nanometrice, cu faze cristaline pure și parametri optici optimi pentru aplicații moderne. Investigațiile au demonstrat că obținerea nanostructurilor prin exfolierea mecanică a cristalelor masive cu ajutorul ultrasunetelor reprezintă o metodă eficientă pentru obținerea nanostructurilor din SnS și SnS₂, oferind avantajele controlului crescut asupra dimensiunilor, purității și morfologiei particulelor. Materialele obținute în prima etapă a proiectului urmează a fi investigate din punct de vedere fotocatalitic pentru descompunerea unor compuși organici sau farmaceutici, sau alte aplicații precum stocarea energiei sau optoelectronică.

The research in the first stage of the project presents a comprehensive investigation of the possibility of obtaining nanostructures of SnS and SnS₂ from bulk crystals through mechanical exfoliation assisted by ultrasound, and the study of the properties of the resulting nanostructures. The nanostructures were obtained in an ultrasonic bath in an aqueous solution at a frequency of 35 kHz. Morphological, structural, and optical properties were investigated. X-ray diffraction analysis confirmed the presence of the orthorhombic phase for SnS and the hexagonal phase for SnS₂. The main detected reflections of SnS corresponded to the planes (013), (022), (122), (016), and (310). The most intense reflections of SnS₂ were found at the planes (012), (003), (110), (103), (112), (201) and (005). The absence of additional reflections and maxima with high FWHM indicates phase purity and the lack of significant impurities. Images obtained using scanning electron microscopy (SEM) demonstrate the formation of SnS and SnS₂ nanostructures with sizes in the range of 50–3000 nm and thicknesses up to 100 nm. From transmission and reflection measurements, absorption spectra were calculated using the Tauc method, and the absorption edges corresponding to bandgap energies were determined: for SnS, $E_g \approx 1.25$ eV, and for SnS₂, $E_g \approx 2.0$ eV. Both materials have an indirect bandgap. The absorption value for SnS₂ nanostructures is on the order of 10^4 cm⁻¹, while for SnS it is 10^5 cm⁻¹. Raman scattering was measured with an excitation wavelength of 633 nm. Raman spectra provide additional confirmation of the crystalline phases. In the Raman spectrum for SnS, vibrational modes were observed at frequencies of 96, 163, 188, 222, and 307 cm⁻¹, and at 205 and 315 cm⁻¹ for SnS₂. Raman analysis confirmed the absence of mixed phases and the presence of only the desired phases. The narrow width of the Raman bands indicates a good degree of crystallinity. SEM, XRD, and Raman analyses confirmed the formation of nanometer-sized structures with pure crystalline phases and optimal optical parameters for modern applications. The investigations demonstrated that obtaining nanostructures by mechanical exfoliation of bulk crystals using ultrasound is an efficient method for producing SnS and SnS₂ nanostructures, offering advantages such as increased control over particle size, purity, and morphology. The materials obtained in the first stage of the project will be further investigated for photocatalytic applications in the decomposition of organic or pharmaceutical compounds, as well as other uses such as energy storage or optoelectronics.

Conducătorul de proiect

Kappen
(semnătura)

dr. Andrei TÎRON
(numele, prenumele)

Data:

LS

