|  |  |
| --- | --- |
| THIERING GERGŐ  Fizikus mesterképzési szak MSc, 3. félév  Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Természettudományi Kar |  |

Témavezető:

|  |
| --- |
| Dr. Gali Ádám  egyetemi docens, BME TTK |

Nikkel hibák gyémánt nanokristályokban

TDK dolgozatom motivációja biológiai jelzőrendszerként használható színcentrumok keresése nanogyémántban. Ezen jelzőrendszerek útja optikai úton (pl. fotolumineszcencia) nyomon követhetőek lennének a szervezeten belül, amennyiben biológiailag inertek ezek a színcentrumok. A szén alapú gyémánt nanokristályok biológiailag kompatibilisnek tűnnek. Ha a belsejükbe egy olyan ponthibát tudnánk létrehozni, amely a látható fény vagy közeli infravörös energiatartományában gerjeszthető, akkor azzal in vivo fluoreszcens biológiai jelzőrendszert alkottunk [1]. Nitrogén-vakancia színcentrum a nanogyémántban már használható erre a célra, amely szobahőmérsékleten nagyon széles spektrumban ad 650-750 nm hullámhossz tartományban jelet. Dolgozatomban más energiákkal gerjeszthető, illetve más színnel fluoreszkáló nanokristályt keresek. Így a nitrogén-vakancia centrumok mellett alternatív megoldást jelentenének.  
Hibamentes gyémánt nanokristályok már kereskedelemben is kaphatóak, 5 nm átmérőjű gyémánt nanokristályok létrehozhatóak például robbantásos módszerrel [2]. Ezek azonban nem fluoreszkálnak a megkívánt energiatartományban. Ugyanakkor a tömbi gyémántban kísérleti úton kimutattak nikkel tartalmú hibákat [3], amelyek más és más optikai tulajdonságokkal rendelkeznek. Ezen hibák mágneses tulajdonságait sűrűségfunkcionál elmélet segítségével már vizsgálták [4]. Ha hasonló nikkel hibákat tartalmazó biológiailag inert nanokristályokat tudnánk előállítani, hasonlóan a nitrogén-vakancia színcentrumhoz. Dolgozatomban nikkel szennyezőt tartalmazó ponthibák optikai tulajdonságait vizsgáltam meg nanogyémántokban, ahol a kvantumbezártság illetve a felület optikai tulajdonságaira gyakorolt hatását tanulmányoztam. A gerjesztési spektrumokat időfüggő sűrűségfunkcionál (TDDFT) elméleten alapuló kóddal határoztam meg.  
Az általam vizsgált legnagyobb nanokristályok ~450 szénatomot tartalmaznak, ami ~1,7 nm átmérőhöz tartozik, de a legtöbb vizsgálatot a számolásigény miatt ennél kisebb ~150 szénatomot (~1,1 nm átmérő) tartalmazó modellben végeztem el. A nanokristály felületét hidrogén atomokkal zártam le. A TDDFT módszerrel megkaptam a gerjesztési energiákat illetve az egyes gerjesztések természetét is meg tudtam vizsgálni, azaz mely állapotok vesznek részt a gerjesztésben. Számításaim alapján a nikkel hiba szerkezetének függvényében valóban létre tudnánk hozni alternatív színű fluoreszcens nanogyémántokat, amelyek a 400-700 nm hullámhossz tartományban aktívak az eddigi számításaim alapján.

1. E.B. Voura, J.K. Jaiswal, H. Mattoussi, S.M. Simon, Nature Medicine 10, 993-998, 2004
2. V.N. Mochalin, O. Shenderova, D. Ho, Y. Gogotsi, Nature Nanotechnology 7,11-23, 2012
3. J. Isoya, H. Kanda, Y. Uchida. Phys. Rev. B, 42:9843-9852, Dec 1990.
4. R. Larico, J. F. Justo, W. V. M. Machado, L. V. C. Assali. Phys. Rev. B, 79:115202, 2009.