|  |  |
| --- | --- |
| SOMOGYI BÁLINT  Fizikus MSc, 3. félév  Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem Természettudományi Kar |  |

Témavezető:

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

Félvezető biomarkerek vizsgálata első elvű számításokkal

A TDK munkám elkészítése során szilíciumkarbid (SiC) nanokristályok elektronikus és optikai tulajdonságait vizsgáltam. A pár nm átmérőjű SiC nanokristályok ígéretesek fluoreszcens biológiai jelzőrendszerek megvalósítására (nem toxikusak, méretük elegendően kicsi, vízben jól oldódnak), de a fluoreszcens hullámhosszuk az ultraibolya-kék tartományba esik. A biológiai alkalmazások szempontjából a közeli infravörös tartományba (700-1300 nm) eső emisszió az előnyös, mivel itt az emberi test abszorpciója minimális. Színcentrumokat juttatva a nanokristályokba, optikai tulajdonságaik megváltoztathatók, és a közeli infravörös tartományban emittáló nanoszerkezetek is létrehozhatók.

Dolgozatomban átmenetifém ponthibák hatását vizsgáltam a nanokristályok abszorpciós spektrumára. Az utóbbi években kiderült, hogy volfrám, molibdén és vanádium szennyezők tömbi SiC-ban színcentrumokat képeznek, és az emittált fény hullámhossza a közeli infravörös tartományba esik. Kutatásom során fématomokat tartalmazó 1-2 nm-es átmérőjű nanokristályokat vizsgáltam, első elvű számítási módszerek segítségével. A sűrűségfunkcionál-elmélet és az időfüggő sűrűségfunkcionálelmélet a pár száz atomot tartalmazó nanorészecskék fizikai paramétereire kvantitatív értelemben is jó eredményeket ad. Két különböző geometriájú ponthibát vizsgáltam: (i) az első esetben a fématom egy szilíciumatom helyére épül be (MSi) (ii) a másik esetben pedig a fématom egy szilíciumatom helyére épül be, és egy szomszédos szénatom helyén vakancia van (MSi-Cvac). Vizsgáltam a különböző ponthibák energetikai viszonyait, és a nagy rendszámú fématomokra tekintettel a spin-pálya csatolás hatását is. Kiszámítottam a vizsgált rendszerek legkisebb gerjesztési energiát. A kutatásom legfontosabb eredményei a következők:

i) Számításaim alapján a volfrám, vanádium és molibdén ponthibákat tartalmazó SiC nanokristályok abszorpciós éle a közeli infravörös tartományba esik. Megállapítottam hogy egy adott ponthiba esetén a legkisebb gerjesztési energia csak enyhén függ a nanokristály méretétől.

ii) Az MSi ponthibák kialakulása energetikailag kedvezőbb az MSi-Cvac ponthibákéhoz képest, viszont ha nanokristályt vakanciákat tartalmaz, akkor ezek a fématom mellett csapdázódhatnak, és MSi-Cvac ponthibák is kialakulhatnak.

iii) A számításaim eredményei alapján a vizsgált nanoszerkezetek optikai tulajdonságai közel ideálisak a biológiai alkalmazások szempontjából.