

МОЖЛИВІСТЬ ВИКОРИСТАННЯ КВАНТОВИХ ТОЧОК ЯК ДЕТЕКТОРНИХ ЕЛЕМЕНТІВ ДЛЯ ВИЗНАЧЕННЯ ПОЛІАЦЕНІВ

Муқановська І. В., Сушко О. А.

Науковий керівник – д.ф.-м.н., проф. Рожицький М.М.

Харківський національний університет радіоелектроніки

61166, Харків, пр. Леніна, 14, каф. біомедичної інженерії,

тел./факс (057) 702-03-69, e-mail: iren_mukanovskaya@mail.ru

This work considers a possibility of use of spherical semiconductor quantum dots for polycyclic aromatic hydrocarbons detection in water objects. The quantum-chemical calculation of 3,4-benzopyrene molecular structure and quantum dot bandgap dependence on its radius was carried out.

В наш час дуже важливою є проблема забруднення навколишнього середовища. Одними з найбільш небезпечних забрудників є поліциклічні ароматичні вуглеводні (ПАВ), серед яких особливо небезпечним є 3,4-бензпірен (БП). БП – п'ятикільцевий поліциклічний ароматичний вуглеводень, який є дуже сильним мутагеном і канцерогеном. БП здатен взаємодіяти з макромолекулами клітини – білками та ДНК, порушуючи їх функціональні властивості, що призводить до онкологічних хвороб. Тому виявлення БП є однією з важливих задач сучасної екології та токсикології.

Існує низка традиційних методів визначення ПАВ. Найбільш розповсюдженими є хроматографічний, імуно-хімічний та біологічний методи. Кожен з них має свої переваги і недоліки. Через це є потреба у розробці нових методів детектування БП, що спроможні визначати його наявність в різних середовищах, зокрема у воді за допомогою сучасних наноматеріалів, наприклад квантових точок (КТ). КТ – клас систем, в яких проявляється ефект розмірного квантування енергії електронів, дірок та екситонів. До цього класу відносять напівпровідникові кристали, в яких всі три просторові розміри зіставлені за порядком величини з боровським радіусом екситона в об'ємному матеріалі. До найбільш широко відомих КТ можна віднести композитні сполуки CdSe та CdTe, які люмінесціюють практично у всьому видимому діапазоні. Великий інтерес мають квантові точки, модифіковані органічними молекулами, завдяки чому суттєво підвищується їх випромінювальна здатність та стабільність.

Унікальні фізичні властивості КТ забезпечують можливість розробки на їх основі різних фотонних та оптоелектронних пристроїв, включаючи сенсори [1]. Особливу увагу привертають оптичні властивості квантових точок, для яких характерним є випромінювання достатньо вузького та симетричного спектру флуоресценції (напівширина піку флуоресценції $\approx 20\div 30$ нм) як наслідок високої розмірної однорідності. Важливою властивістю КТ, яка дозволяє використовувати їх як детекторні елементи сенсорів для визначення різноманітних речовин-аналітів є можливість неоптичного збудження флуоресценції за рахунок рекомбінації

відповідних різнозаряджених носіїв. У випадку, якщо можливо формування у тестовому зразку аніон-радикала KT^- та катіон-радикалу BP^+ , то вірогідним є їх взаємодія з переносом електрона з валентної зони КТ на нижню заповнену молекулярну орбіталь аналіта БП, у результаті чого КТ опиняється в збудженому стані. При переході КТ в основний стан з рекомбінацією електрон та дірка у валентній зоні може випромінюватись квант світла, що свідчить про наявність у зразку аналіта. Але такий перенос електрона можливий лише за умови, що ширина забороненої зони КТ менша або дорівнює різниці енергій граничних орбіталей аналіта, що необхідно досліджувати за допомогою математичного моделювання [2].

В роботі проведений розрахунок молекулярної структури БП шляхом розв'язання рівняння Шредінгера неемпіричним методом у наближенні Хартрі-Фока з використанням програми для проведення квантово-хімічних розрахунків NucleonChem 8.0. Для розрахунку ширини забороненої зони КТ та залежності її від радіуса використовували формулу [3]

$$E_g^{nano} = E_g^{bulk} + \frac{\hbar^2}{8m_0r^2} \left(\frac{1}{m_e^*} + \frac{1}{m_h^*} \right) - \frac{1,8e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_0r},$$

де $E_g^{bulk} = hc / \lambda^{bulk}$ – ширина забороненої зони об'ємного напівпровідника, \hbar – стала Планка (Дж), λ^{bulk} – довжина хвилі поглинання об'ємного напівпровідника, для CdSe $\lambda^{bulk} = 709$ нм, m_0 – маса електрона, r – радіус КТ, m_e^*, m_h^* – ефективна маса електрона та дірки відповідно, для CdSe $m_e^* = 0,13$, $m_h^* = 0,45$; ϵ_0 – абсолютна діелектрична проникність, ϵ – відносна діелектрична проникність середовища КТ, для CdSe $\epsilon = 10,6$.

В результаті розрахунків обрані оптимальні параметри КТ типу CdSe для використання їх як детекторних елементів для визначення БП.

Література:

1. Сушко, О.А. Оптичний сенсор на основі напівпровідникових квантово-розмірних структур для визначення конденсованої ароматики у водних об'єктах довкілля [Текст] / О.А. Сушко, М.М. Рожицький // Системи обробки інформації. - 2013. - Т. 2(109). - С. 259-264
2. Сушко, О.А. Нанофотонний метод визначення органічних канцерогенів у водних середовищах [Текст] / О.А. Сушко, М.М. Рожицький // Східно-Європейський журнал передових технологій. - 2012. - Т.1/5(55). – 40-46.
3. Kayamma, Y. Quantum-size effects of interacting electrons and holes in semiconductor microcrystals with spherical shape / Y. Kayamma // Phys.Rev.B.–1988.–38.–P. 9797–9805.