

# Felületi plazmon rezonancia elvű bioszenzorok és stimulált emissziós mikroszkópia

Esettanulmányok az elektromágneses tér  
és az anyag kölcsönhatásáról

**Fekete Ádám**

Témavezető: Dr. Csurgay Árpád

2015. március 9.



Pázmány Péter Katolikus Egyetem  
Információs Technológiai és Bionikai Kar

# Tartalomjegyzék

## I. tézis csoport: Felületi plazmon rezonancia elven működő bioszenzorok

- Fém- és molekuláris réteg modellezése

- Ekvivalens áramkörü modell

- CST és áramkörü modell összehasonlítása

- Paraméterek optimalizálása

## II. tézis csoport: A stimulált emissziós mikroszkópia elve és alkalmazási lehetőségei

- Kvantum-klasszikus modell

- Master egyenletek

- Numerikus eredmények

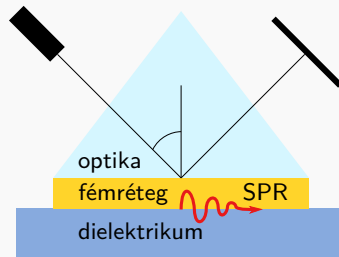
## III. tézis csoport: Komplex hullámfüggvények háromdimenziós ábrázolása

- Pontfelhő: megtalálási valószínűség reprezentálása

- Szintérték: egyéb tulajdonságok megjelenítése



# Felületi plazmon rezonancia elven működő bioszenzorok



## 1.1. tézis

Ab initio molekula szimuláció felhasználásával számszerű becslést adtam a Kretschmann elrendezésű felületi plazmon rezonancia elven működő bioszenzor specifikációjára, gáz, illetve híg oldatok esetében. Az általam kidolgozott módszer lehetővé teszi a klasszikus elektromágneses tér szimulációjának felhasználásával a bioszenzor fémrétegének és gerjesztésnek megfelelő tervezését és paraméterezését a jobb mérési eredmény elérése érdekében.

<sup>1</sup> Á. Fekete, *Int. J. Circ. Theor. Appl.*, vol. 41, no. 6, pp. 646–652, 2013.

# Fém- és molekuláris réteg modellezése

## Fémréteg

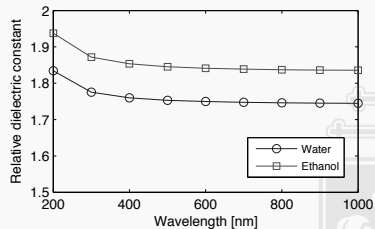
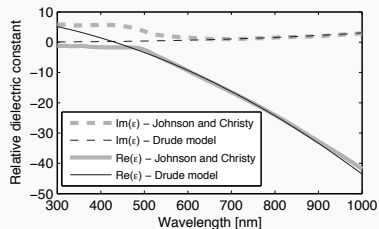
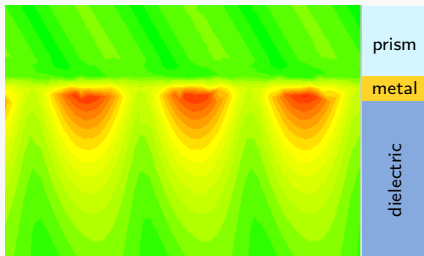
- Drude modell

$$\varepsilon_{\infty} = 10, \omega_p = 13.8 \cdot 10^{15} [\text{Hz}],$$

$$\gamma = 1.075 \cdot 10^{14} [\text{Hz}]$$

## Molekuláris réteg

- GAMESS, Hartree-Fock, 6-31G(d)
- időfüggő perturbációs számítás
- dipólus-dipólus közelítés

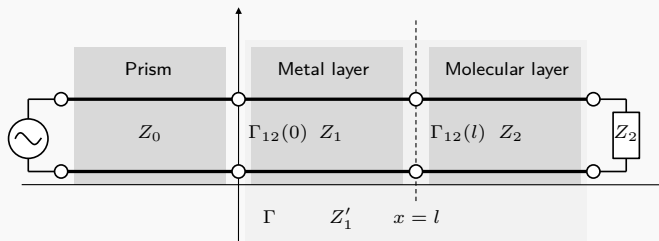


	szimuláció (632 [nm])	mérés (optikai)	mérés (dc)
víz	1.75	1.77	80.4
etanol	1.84	1.85	24.3

# Ekvivalens áramköri modell

## 1.2. tézis

Közelítő, de a gyors tervezést lehetővé tevő áramköri modellt alkottam a Kretschmann elrendezésű bioszenzor működésére.



$$Z_0 = \frac{c}{\omega} \frac{\varepsilon_0}{\sqrt{\varepsilon_0 - k_0^2}}, \quad Z_1 = \frac{c}{\omega} \frac{\varepsilon_1}{\sqrt{\varepsilon_1 - k_0^2}}, \quad Z_2 = \frac{c}{\omega} \frac{\varepsilon_2}{\sqrt{\varepsilon_2 - k_0^2}}, \quad \text{ahol } k_0 = \sqrt{\varepsilon_0} \sin \theta.$$

$$\Gamma = \frac{\Gamma_{01} + \Gamma_{12} e^{-2j\beta l}}{1 + \Gamma_{01} \Gamma_{12} e^{-2j\beta l}}, \quad \text{ahol } \beta = -\frac{\omega}{c} \sqrt{\varepsilon_1 - \varepsilon_0 \sin^2 \theta} \text{ a terjedési együttható.}$$

<sup>1</sup> Á. Fekete, *Int. J. Circ. Theor. Appl.*, vol. 41, no. 6, pp. 646–652, 2013.