

МИНИСТЕРСТВО ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ
Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего образования
«ПЕНЗЕНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

ОТЗЫВ
РУКОВОДИТЕЛЯ МАГИСТЕРСКОЙ ДИССЕРТАЦИИ

Магистерская работа на тему: «Исследование квантово-размерных и интерфейсных эффектов в наноструктурах сложной геометрии»

Выполнена студентом Никитина Юлия Вячеславовна

Факультет ИТЭ

Кафедра «Нано- и микроэлектроника» Группа 22 ПДм1

Направление подготовки 11.04.04 «Электроника и наноэлектроника»,
профиль «Нано- и микроэлектроника»

Квалификация (степень) Магистр

Руководитель к.ф.-м.н. Карманов Андрей Андреевич

Качества выпускника, выявленные в ходе выполнения магистерской работы:

В ходе выполнения магистерской диссертации Никитина Ю.В. показала отличные навыки работы с современной научно-технической литературой, индексируемой в базах данных Web of Science, Scopus и RSCI. Продемонстрированы отличные знания в области микро- и нанoeлектроники, нанотехнологии, квантовых вычислений. Проведены исследования квантово-размерных и интерфейсных эффектов в наноструктурах сложной геометрии, на примере CdSe, ZnO, CuO. Выполнен анализ условий наблюдения квантово-размерных эффектов в наноструктурах сложной геометрии с учетом неоднородности их границы раздела. Результаты исследовательской работы представлены к опубликованию в изданиях РИНЦ.

Заключение:

Выполненная выпускником магистерская диссертация полностью соответствует техническому заданию. Степень соответствия подготовленности выпускника отвечает требованиям к результатам освоения программы магистратуры ФГОС ВО по направлению подготовки 11.04.04 «Электроника и нанoeлектроника». На основании вышеизложенного считаю, что магистерская диссертация заслуживает оценки «отлично», а ее автор Никитина Ю.В., присвоения квалификации «магистр» по направлению подготовки 11.04.04 «Электроника и нанoeлектроника».

«24» июня 2024 г.

Руководитель



Карманов А.А.

на тему: «Исследование квантово-размерных и интерфейсных эффектов в наноструктурах сложной геометрии»,
по направлению 11.04.04 – Электроника и наноэлектроника

Работа Никитиной Ю.В. соответствует всем требованиям, предъявляемым к магистерским диссертациям по направлению подготовки 11.04.04 «Электроника и наноэлектроника» и заслуживает оценки «отлично»

Директор-главный конструктор ООО НПК «Крона» В.Г. Ханбеков



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования

«ПЕНЗЕНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Факультет (институт)
информационных технологий
и электроники
(наименование)
Направление подготовки

Кафедра
«Нано- и микроэлектроника»
(наименование)

Магистерская программа

11.04.04. «Электроника и
наноэлектроника»
(код и наименование)
Нано- и микроэлектроника
(наименование)

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

на тему

Исследование квантово-размерных и интерфейсных эффектов в
наноструктурах сложной геометрии

Студент 22ПДм1
номер группы

Никитина Юлия Вячеславовна
подпись, дата ФИО полностью

Научный руководитель
к.ф.-м.н., доцент, ПГУ
должность, наименование организации

Карманов А.А.
подпись, дата инициалы, фамилия

Рецензент

Директор-гл. конструктор ООО НПК «Крона»
должность, наименование организации

Ханбеков В.Г.
подпись, дата инициалы, фамилия

Нормоконтролер ст. преподаватель
должность

Рыжова Т.Н.
подпись, дата инициалы, фамилия

Работа допущена к защите в ГЭК (протокол заседания кафедры от 10.06.24 № 10)
Заведующий кафедрой НнМЭ

должность, наименование организации

Пронин И.А.
подпись, дата инициалы, фамилия

Работа защищена с оценкой отл. (протокол ГЭК от 25.06.24 № 2)
Секретарь ГЭК

должность, наименование организации

Вольсков А.А.
подпись, дата инициалы, фамилия

РЕФЕРАТ

Пояснительная записка содержит 81 страниц машинописного текста, включает 31 рисунок, 1 таблицу, 54 формулу, список используемых источников из 40 наименований, 4 приложения.

Ключевые слова: квантовая точка, наночастицы, селенид кадмия, оксид цинка, оксид меди, просвечивающая электронная микроскопия, атомная силовая микроскопия, гибрид наночастиц золота и квантовых точек, структура ядро-оболочка, цилиндрическая симметрия, наноструктура сложной геометрии.

Цель работы: исследование квантово-размерных и интерфейсных эффектов в наноструктурах сложной геометрии.

Задачи работы:

1. Исследование нанопроволок из селенида кадмия, изготовленных с помощью цилиндрических полимерных щеток (*brush*) с амфифильной сердцевиной в качестве четко определенных одномолекулярных шаблонов.

2. Исследование усиленной фотолюминесценции гибридов наночастицы золота-квантовой точки, заключенных в «мохнатые» (*hairy*) полимерные нановолокна.

3. Исследование ограниченной донорной примеси в полую квантовую точку с цилиндрической оболочкой.

4. Анализ особенностей морфологии и параметров зонной структуры экспериментальных образцов наноструктур сложной геометрии на основе CuO-ZnO.

5. Анализ условий наблюдений квантовых размерных эффектов в наноструктурах сложной геометрии.

6. Расчет энергетических спектров и волновых функции квантовых точек с цилиндрической симметрией в рамках модели с бесконечно высокими стенками и со стенками конечной высоты.

7. Анализ воздействия освещенности на работу инженера-исследователя.

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	4
1 Анализ перспективных методик синтеза квантовых точек ядро-оболочки цилиндрической симметрии	5
1.1 Синтез и характеристика нанонитей селенида кадмия со структурой ядро-оболочка, где в качестве оболочки используется цилиндрическая полимерная щетка	5
1.2 Исследование усиленной фотолюминесценции гибридов наночастиц золота и квантовых точек, заключенных в мохнатые полимерные нановолокна	12
1.3 Поперечное сечение фотоионизации и энергия связи одиночной примеси в полый цилиндрической квантовой точке ядро-оболочка	22
2 Наноструктуры сложной геометрии как объект наблюдения квантово-размерных эффектов	26
2.1 Анализ особенностей морфологии и параметров зонной структуры экспериментальных образцов наноструктур сложной геометрии на основе CuO-ZnO	26
2.2 Анализ условий наблюдений квантовых размерных эффектов в наноструктурах сложной геометрии	30
3 Анализ энергетического спектра носителей заряда в квантовой точке в цилиндрической симметрии	42
3.1 Расчет энергетического спектра и волновых функции квантовых точек с цилиндрической симметрией в рамках модели с бесконечно высокими стенками	42
3.2 Расчет энергетического спектра и волновых функции квантовых точек с цилиндрической симметрией в рамках модели со стенками конечной высоты	47
4 Анализ воздействия освещенности на работу инженера-исследователя	51
Заключение	60
Список использованных источников	61
Приложение А. Задание на выпускную квалификационную работу	65
Приложение Б. Заявление для проверки ВКР на оригинальность	69
Приложение В. Протокол проверки ВКР на оригинальность	70
Приложение Г. Презентация к ВКР	73

ВВЕДЕНИЕ

Современная наука не перестает удивлять своими открытиями и технологическими прорывами. Одним из самых захватывающих направлений исследований является изучение квантовых размерных эффектов в наноструктурах сложной геометрии. Когда размеры материала становятся сравнимыми с характерной длиной волны электронов, начинают проявляться квантовые размерные эффекты. Это означает, что классические законы физики уже не могут описать поведение электронов в таких масштабах, и необходимо привлекать квантовую механику.

Рассматривая наноструктуры сложной геометрии, такие как нанотрубки, квантовые точки или нанопроволоки, квантовые размерные эффекты могут радикально изменить их физические и химические свойства. Например, электронный транспорт в наноструктурах может стать квантово-ограниченным, что приведет к изменению проводимости материала.

Изучение и управление квантовыми размерными эффектами имеет огромное значение для разработки новых материалов с уникальными свойствами. Например, наночастицы с квантовыми точками могут использоваться в сенсорах, оптических устройствах и катализаторах, благодаря их специфическим свойствам, обусловленным квантовыми размерными эффектами.

Квантовые размерные эффекты в наноструктурах сложной геометрии открывают удивительные возможности для создания материалов нового поколения. Понимание и контроль этих явлений помогут улучшить технологии в различных областях, от электроники до медицины.

1 Анализ перспективных методик синтеза квантовых точек ядро-оболочки цилиндрической симметрии

1.1 Синтез и характеристика нанонитей селенида кадмия со структурой ядро-оболочка, где в качестве оболочки используется цилиндрическая полимерная щетка

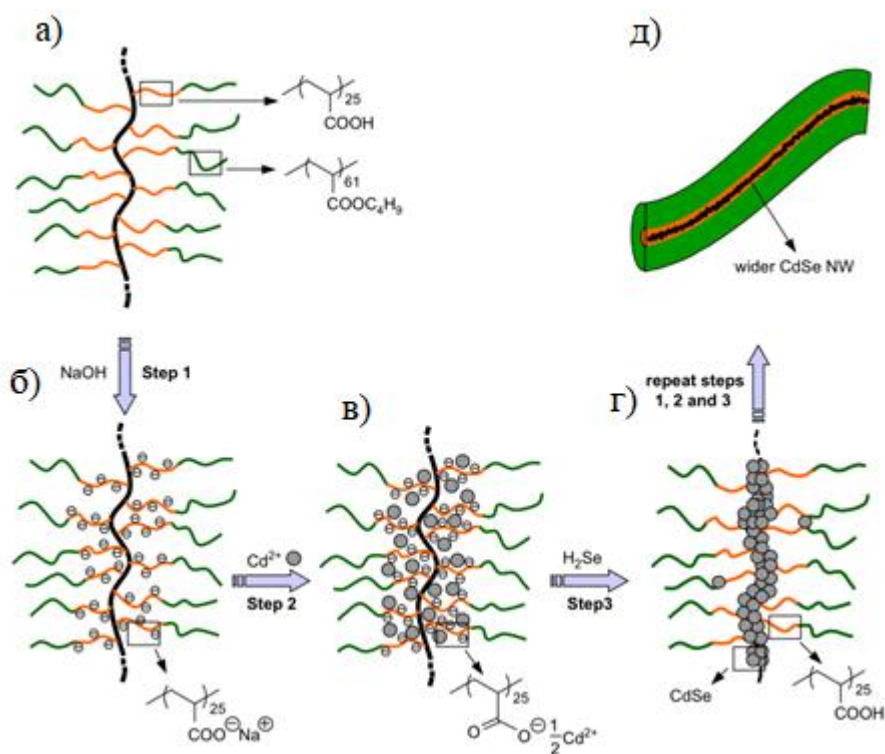
Большой интерес представляет тема синтеза нанопроволок селенида кадмия внутри ядра цилиндрической полимерной щетки с оболочкой.

В работе *JiayinYuan, MarkusDrechsler, YouyongXu, MingfuZhang, Axel H.E. Müller* были исследованы нанопроволки из селенида кадмия, которые были изготовлены с помощью цилиндрических полимерных щеток (*brush*) с амфифильной сердцевинкой в качестве четко определенных одномолекулярных шаблонов.

В ходе эксперимента использовались компоненты, обладающие высокой степенью чистоты аналитического класса и не требующие дополнительной очистки. Полимерная щетка (*brush*) $[AA_{25}-nBA_{61}]_{1500}$ (40 мг, насчитывающая 0,102 ммоль карбоксильных групп) была растворена в смеси из метанола и хлороформа. В дальнейшем в раствор вводили гидроксид натрия для реакции с 95% карбоксильных групп. После шестичасового перемешивания в раствор добавлялся раствор $CdAc \cdot 2H_2O$ (0,0720 М в метаноле), который перемешивали еще 12 часов. Процесс формирования частиц селенида кадмия осуществлялся в условиях аргоновой атмосферы. При этом смесь приняла насыщенный красный оттенок из-за плавления селенового порошка. Газ H_2Se вводили через стеклянный трубопровод одновременно с аргоном. Немедленное окрашивание смеси в красный цвет свидетельствовало о формировании наночастиц селенида кадмия. Через час после синтеза раствор подвергали процедуре замораживания-накачивания-оттаивания в три этапа, после чего его объем увеличивали до 100 мл [1].

Результаты эксперимента: основной метод, использующий цилиндрические полимерные щетки в качестве форм для создания нанопроволок CdSe, включает три этапа, изображенные на иллюстрации 1.1 [2]. На первом этапе (от а до б)

карбоксильные группы в ядре полиакриловой кислоты были нейтрализованы NaOH. Затем ионы Cd^{2+} были заменены ионами Na^+ с помощью ионного обмена (второй этап от б до в), что привело к образованию полихелата [3]. Очищенный раствор полихелата вступал в реакцию с газом H_2Se , образуя наночастицы CdSe в форме ядра-оболочки (третий этап от в до г).

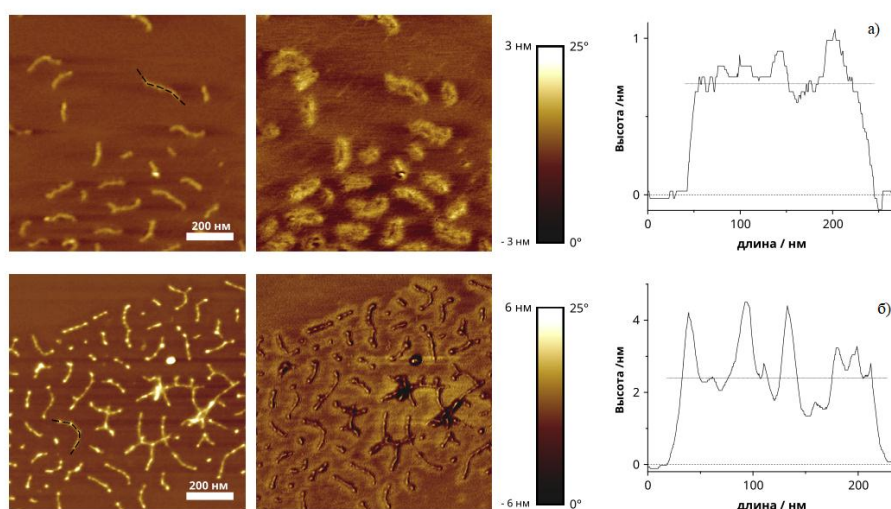


а) оболочка ядра цилиндрических полимерных щеток; б) нейтрализованная полимерная щетка с ядром из полиакрилат натрия; в) полихелат полимерной щетки и Cd^{2+} ; г) первый гибрид из нанопроволоки цилиндрической полимерной щетки и CdSe; д) второй гибрид нанопроволок цилиндрической полимерной щетки и CdSe

Рисунок 1.1 – Иллюстрация синтеза нанопроволок CdSe внутри цилиндрических полимерных щеток

На иллюстрации 1.2а изображена цилиндрическая полимерная щетка $[\text{AA}_{25}-n\text{BA}_{61}]_{1500}$ в форме мономолекулярного шаблона с низкой полидисперсностью длины ($L_w/L_n=1.08$), что позволяет определить, как размер, так и распределение размеров нанопроволок CdSe в области ядра [4]. Червеобразные структуры цилиндров ясно видны на изображении по высоте, в то время как структура ядра просматривается на фазовом изображении. После взаимодействия с

Cd^{2+} характерная морфология «жемчужного ожерелья» (*pearlnecklace*) идентифицируется с использованием АСМ-изображений на иллюстрации 1.2б из-за "сшивания" боковых цепей, вызванного взаимодействием между двухвалентными ионами Cd^{2+} и одновалентными карбоксилатными группами из различных боковых цепей. Для более детального изучения этого изменения профиль продольной высоты одиночной щетки проанализирован на иллюстрации 1.2, на которой цилиндрическая полимерная щетка (иллюстрация 1.2а, справа) имеет относительно более низкую высоту и более гладкий контур по сравнению с полихелатом (иллюстрация 1.2б, справа) [2].



а) основная оболочка цилиндрической полимерной щетки, $[\text{AA}_{25}\text{--}n\text{BA}_{61}]_{1500}$, б) полихелат цилиндрической полимерной щетки и ионов Cd^{2+} (средняя высота указана пунктирной линией)

Рисунок 1.2 – АСМ изображения полученные в режиме постукивания (слева – высота; справа – фаза) и профиль высоты одной щетки, отмеченной черной пунктирной линией

Данные о высоте профиля представлены в таблице 1.1. Из них следует, что взаимодействие Cd^{2+} ионов с карбоксильными группами (т.е. хелатирование) значительно увеличивает высоту полимерной щетки с 0,71 нм до 2,4 нм полихелата. Стандартное отклонение, отражающее неоднородность высоты щетки, также увеличивается с 0,2 нм до 1 нм при переходе от цилиндрической полимерной щетки к полихелату [6].

Таблица 1.1 – Анализ профиля высоты на АСМ – изображениях

Образцы	Средняя высота, нм	Стандартное отклонение, нм
основная оболочка цилиндрической полимерной щетки [AA ₂₅ –nBA ₆₁] ₁₅₀₀	0,71	0,2
полихелат	2,4	1
первый гибрид	2	0,64
гибридный полихелат	3,3	0,9
второй гибрид	2,66	1,44

При использовании просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) изображение чистых полимерных щеток остается нечетким из-за низкой контрастности. Однако добавление Cd^{2+} в процессе хелатирования значительно улучшает видимость. На иллюстрации 1.3 отображены червеобразные темные частицы размером от 7 до 13 нм, расположенные внутри цилиндрической полимерной щетки[2]. При увеличении можно увидеть цепочку темных точек, которая образует структуру полихелата «жемчужное ожерелье» [7].

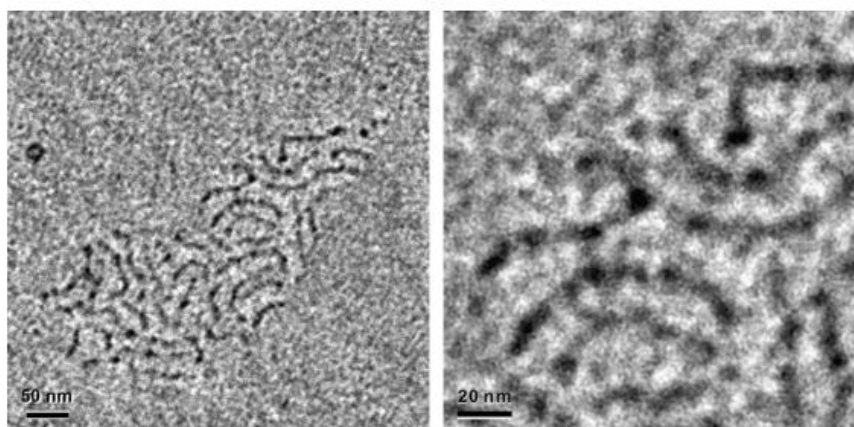


Рисунок 1.3 – Неокрашенные ПЭМ–изображения полихелата оболочки ядра цилиндрической полимерной щетки [AA₂₅nBA₆₁]₁₅₀₀ и ионов Cd^{2+} . Правое изображение – это увеличенный вид левого изображения

Структура «жемчужного ожерелья» разрушается в результате взаимодействия H_2Se с Cd^{2+} , что приводит к образованию гибридной структуры, как видно на изображении, полученном методом атомно-силовой микроскопии (АСМ) (см. рисунок 1.4а). Это происходит из-за того, что, несмотря на изоляцию координированных ионов Cd^{2+} в полихелате, CdSe , формирующийся на их месте, способен диффузировать, создавать ядра и трансформироваться в непрерывную фазу из-за утечки ионной связи между Cd^{2+} и карбоксильными группами [8]. Согласно данным, представленным в таблице 1.1, средняя высота полихелатов (2,4 нм) уменьшается до 2 нм у гибридной щетки, однако она все еще на 1,3 нм выше, чем у простого цилиндрического полимерного аналога. Кроме того, стандартное отклонение гибрида сокращается с 1 полихелата до 0,64, но по-прежнему превышает 0,2 у цилиндрической полимерной щетки. Таким образом, гибридные молекулы обладают относительно плоским строением по сравнению с полихелатами, но при этом более грубые, чем цилиндрические полимерные щетки. После восстановления координационных центров карбоновых кислот при формировании нанопроволок CdSe , процесс наполнения наночастицами CdSe осуществляется аналогичным способом [9]. Гибридный полихелат, получивший свое название в честь комбинации гибрида и координированных ионов Cd^{2+} , снова демонстрирует структуру, напоминающую «жемчужное ожерелье», на изображениях атомно-силового микроскопа (рисунок 1.4б), хотя эта структура не так очевидна, как у обычных полихелатов. Его средняя высота (таблица 1.1) увеличивается с 2 нм у гибрида до 3,3 нм, превышая высоту полихелатов на 0,9 нм из-за влияния увеличения размеров, вызванного формированием нанопроволок CdSe [10]. Стандартное отклонение гибридного полихелата увеличивается до 0,9, что немного меньше, чем у полихелатов, так как деформация, вызванная координацией, частично компенсируется прочной нанопроволокой CdSe внутри структуры. После взаимодействия Cd^{2+} с H_2Se второй гибрид сжимается до 2,66 нм, что больше, чем у первого гибрида, что в конечном итоге приводит к увеличению размеров полимерной структуры. Однако он неожиданно демонстрирует самое высокое стандартное отклонение, что может

свидетельствовать о том, что новые наночастицы CdSe делают форму нанопроводов более неоднородной [11].

На рисунке 1.4г показано изображение первого гибрида полимерной структуры и нанопроволоки CdSe, полученное с помощью просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ).

Исследование проводилось путем измерения ширины нанопроволок CdSe в различных областях, удаленных от деформированных соединений, для статистического анализа. На рисунке 1.4ж представлена кривая распределения, которая характеризуется колебаниями ширины от 5 до 11 нм, со средним значением 7,6 нм [12]. В результате добавления ионов Cd^{2+} в гибрид образуются выступы вдоль нанопроволок, как показано на рисунке 1.4д. Эти ионы координируются с карбоновыми группами, образуя кольцеобразные сферы, которые соединяются с нанопроволоками после добавления ионов Cd^{2+} . Анализ ширины гибридных полихелатов (рисунок 1.4з) показывает двухпиковое распределение. Первый пик соответствует значениям от 7 до 8 нм, а второй пик возникает около 10 нм из-за сфер вдоль нанопроводов. Процесс перезагрузки наночастиц CdSe в нанопроволоки завершается добавлением H_2Se в раствор гибридного полихелата. На рисунке 1.4е представлено ПЭМ-изображение гибрида с четко видимыми линейными нанопроволоками CdSe [13].

На иллюстрации 1.4и представлено статистическое распределение ширины, которое характеризуется биомодальным квазигауссовым профилем с центральным значением в 9,3 нм, что соответствует параметрам гибридного полихелата. Это свидетельствует о том, что наночастицы CdSe, образующиеся в сферических структурах гибридного полихелата, непосредственно связаны с поверхностью нанопроволоки CdSe. На иллюстрации 1.4 (а-в) представлены данные АСМ по высоте, где (а) показывает первый гибрид ядро-оболочки цилиндрической полимерной щетки и нанопроволоки CdSe с диапазоном в 6 нм, (б) демонстрирует гибридное сочетание первого гибрида с ионами Cd^{2+} с диапазоном в 12 нм, а (в) отражает гибрид полимерной щетки и нанопроволоки CdSe с диапазоном в 12 нм. На каждом из изображений, отмеченных черным пунктирным контуром, представлены отдельные полимерные щетки или гибриды, которые были

использованы для анализа высоты. Этот анализ проделан на неокрашенных изображениях ПЭМ, представленных на иллюстрациях 1.4 (г-е), а также на статистических диаграммах диаметров нанопроволоки по ширине, показанных на соответствующих изображениях ПЭМ (1.4ж-и)[2].

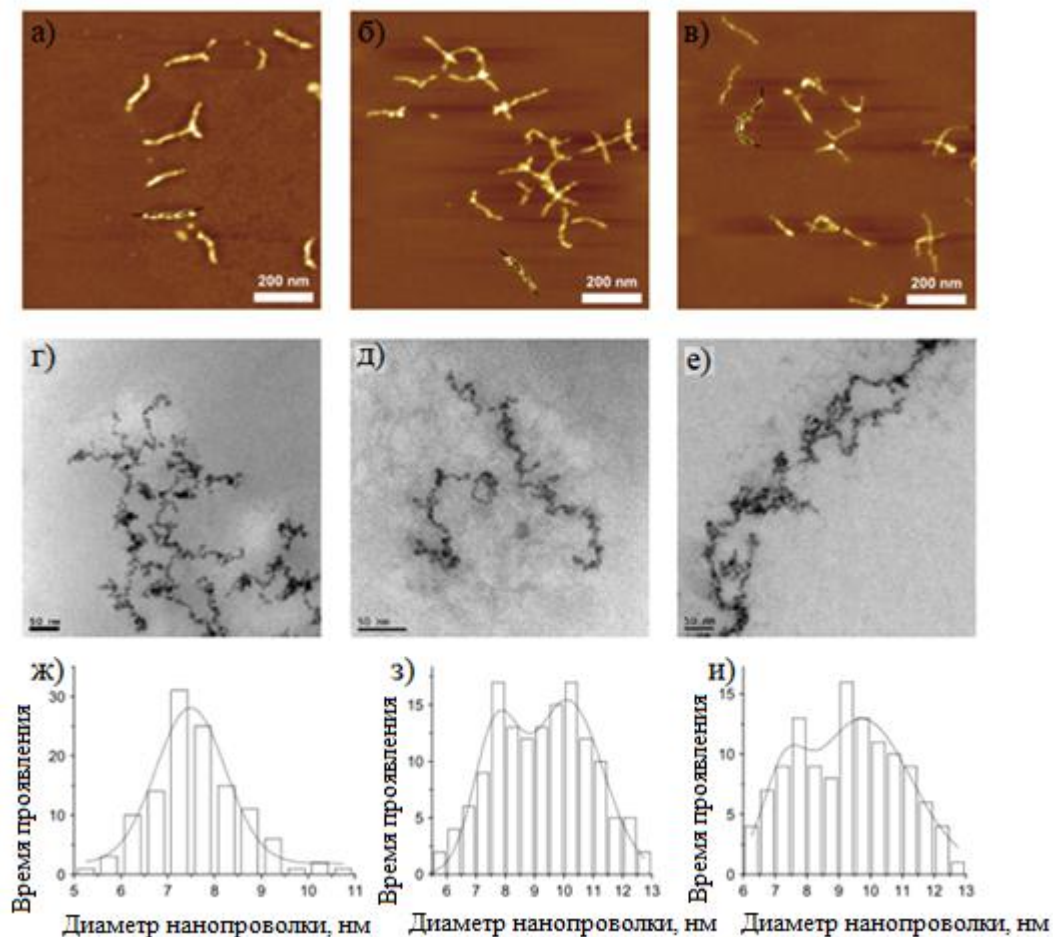


Рисунок 1.4 – Изображение АСМ и ПЭМ

Из вышесказанного следует, что нанопроволки CdSe были успешно изготовлены в условиях мягкого раствора с структурой ядро-оболочка с ядром полиакриловой кислоты и оболочки в качестве мономолекулярных шаблонов. Материалы были охарактеризованы с помощью АСМ, ПЭМ. Отдельные нанопроволки CdSe, защищенные полимерной оболочкой щетки, можно обрабатывать в растворе, и они могут служить кандидатами для электронных наноразмерных устройств[3].

1.2 Исследование усиленной фотолюминесценции гибридов наночастиц золота и квантовых точек, заключенных в мохнатые полимерные нановолокна

Также большой интерес представляет тема усиленной фотолюминесценции гибридов наночастицы золота-квантовой точки, заключенных в «мохнатые» (*hairy*) полимерные нановолокна.

В работе *SajanSingh, AvinashRaulo, AjeetSingh, MonaMittal, AndriyHorechyy, René Hübner, PetrFormanek, RajivK. Srivastava, SameerSapra, AndreasFery, andBhanuNanda* было изучено влияние наночастиц золота на фотолюминесценцию квантовых точек CdSe, заключенных в пространственно разделенных мягких наноразмерных цилиндрических областях.

Синтез квантовых точек из CdSe. Для создания квантовых точек CdSe был использован следующий метод: в колбе с круглым дном были смешаны 1-октадецен (10 мл), CdO (0,01 ммоль) и олеиновая кислота (0,4 ммоль). Полученную смесь нагревали с помешиванием до температуры 280°C. Затем температуру понизили до 80°C, чтобы получить прозрачный раствор. Далее, при температуре 80°C, в раствор добавили октадециламин (3 г) и оксид триоктилфосфина (ТОПО) (2 г). На втором этапе раствор снова нагревали до 280°C с непрерывным помешиванием. Затем Se (0,1 ммоль) растворили в триоктилфосфине (ТОР) (3,5 мл) при комнатной температуре, чтобы получить раствор, содержащий селен в виде предшественника (ТОР-Se). ТОР-Se были введены в раствор с Cd, который поддерживался при 280°C. Затем температуру раствора уменьшили до 260°C. Процесс продолжался до формирования квантовых точек CdSe требуемого размера. Затем наночастицы CdSe очищали с помощью фазового разделения, используя смесь гексан-метанол 1:1, и затем осаживали с помощью ацетона. Очищенные наночастицы были окончательно диспергированы в хлороформе. Концентрацию наночастиц определили с помощью спектроскопии поглощения в ультрафиолетовой и видимой области [14].

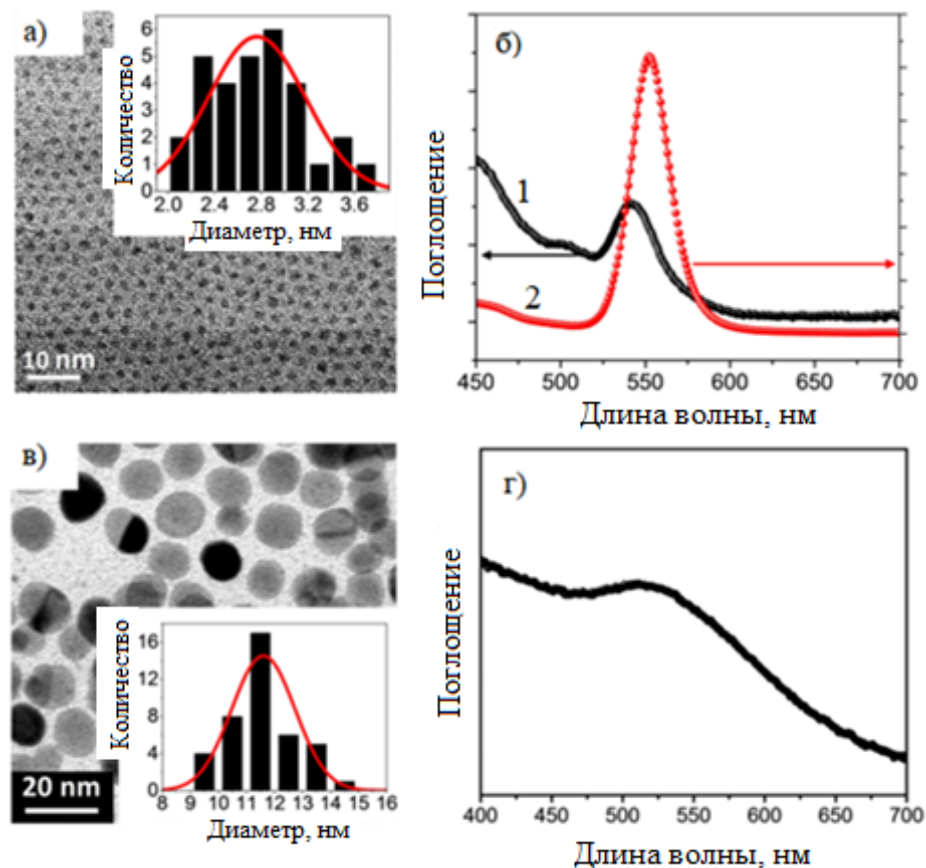
Синтез наночастиц золота. Для создания наночастиц золота использовали следующий метод: октадециламин (0,466 г, 0,0017 М) растворяли в 90 мл хлороформа, затем добавляли 10 мл 0,012 М раствора

$\text{HAuCl}_4 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ (тетрахлороаурата водорода) для получения желтого раствора. Эту смесь обрабатывали ультразвуком в течение 3 часов, в результате чего цвет раствора менялся с желтого на бесцветный. Далее, при активном перемешивании, вводили 5 мл 0,0013 М раствора боргидрида натрия в этаноле для завершения процесса восстановления. Вскоре бесцветный раствор приобретал фиолетовый оттенок, что указывало на образование наночастиц золота. После продолжительного перемешивания в течение 12 часов хлороформ практически полностью удаляли путем испарения. Затем добавляли 150 мл этанола для осаждения наночастиц золота. Осадок промывали трижды этанолом для удаления лишних поверхностно-активных веществ и сушили при 54°C в течение ночи. Затем высушенные наночастицы золота диспергировали в хлороформе [15].

Получение композитных наноструктур на основе блок-сополимера/CdSe/Au. Раствор блок-сополимера полистирол-блок-поли(4-винилпиридин) был подготовлен в хлороформе при обычной температуре. Стоит отметить, что хлороформ является универсальным растворителем как для полистирола, так и для поли(4-винилпиридина). Затем в раствор блок-сополимера постепенно добавляли определенное количество квантовых точек CdSe, рассеянных в хлороформе, при постоянном перемешивании. После 24 часов перемешивания к раствору блок-сополимера/CdSe добавляли измеренное количество наночастиц золота, также диспергированных в хлороформе. Далее композитный раствор блок-сополимера/CdSe/Au подвергали непрерывному перемешиванию в течение 48 часов. Затем для контролируемого самосбора композитный раствор выдерживали в герметичной камере с насыщенным паром хлороформа. В камере имелось небольшое отверстие, через которое растворитель медленно испарялся. После полного испарения растворителя образцы помещали в вакуумную печь на 2 дня при комнатной температуре для удаления остаточного растворителя. Полученные и высушенные образцы затем повторно диспергировали в циклогексане для извлечения цилиндрических областей, содержащих CdSe/Au [16].

Описание полученных данных. Впервые была проведена характеристика наноструктуры, состоящей из тополовых квантовых точек CdSe и

наночастицзолота, стабилизированных октадециламином, с использованием просвечивающего электронного микроскопа. На микрофотографии (рисунок 1.5а) и графике распределения размеров квантовых точек CdSe (рисунок 1.5а, вставка) видно, что синтез был проведен успешно и все точки имеют одинаковый размер с средним значением в $2,8 \pm 0,2$ нм. Первая экситонная полоса поглощения и соответствующая ей полоса излучения присутствуют в УФ-видимом диапазоне при длинах волн 541 нм и 553 нм соответственно, что подтверждается данными флуоресценции и поглощения, представленными на рисунке 1.5б [17]. Исследование выявило, что средний размер квантовых точек на основе CdSe составляет 2,9 нм, что было определено на основе анализа первого пика в спектре поглощения. Этот размер находится в согласии с измерениями, проведенными методом ПЭМ. На иллюстрациях 1.5в и 1.5г представлены соответственно изображение ПЭМ и спектр поглощения для наночастиц из золота. Из анализа изображения ПЭМ и сопровождающего его графика размера частиц видно, что средний размер наночастиц золота составляет $11,5 \pm 2$ нм [18]. Спектр поглощения наночастиц золота демонстрирует характерную полосу поверхностного плазмона с максимумом при 520 нм. При этом спектр излучения квантовых точек CdSe, который имеет максимум при 553 нм, значительно схож с полосой поглощения поверхностного плазмона наночастиц золота. Это указывает на вероятность передачи энергии, поглощенной поверхностным плазмоном, от наночастиц золота к квантовым точкам CdSe [19].



а) ПЭМ-изображение, б) спектр поглощения (1 – черная кривая) и спектр фотолюминесценции (2 – красная кривая) квантовых точек CdSe, в) ПЭМ-изображение, г) спектр поглощения наночастиц Au

Рисунок 1.5 – ПЭМ-изображения и его графики

Было замечено, что поверхностный плазмонный резонанс от наночастиц Au сильно влияет на оптические свойства квантовых точек, когда они расположены близко друг к другу в нанометровом масштабе. В настоящем исследовании два различных типа оптически активных частиц были упакованы вместе, заключив их в цилиндрические полимерные нанодомены. Для этой цели был выбран асимметричный цилиндрикообразующий сополимер полистирол-блок-поли(4-винилпиридин), который образует цилиндрические домены поли(4-винилпиридин), встроенные в матрицу поверхностного плазмона. Хорошо известно, что поли(4-винилпиридин) обладает превосходной реакционной способностью по отношению к различным типам наночастиц, включая металлы, полупроводники и диэлектрики. Следовательно, цилиндрические домены поли(4-винилпиридин) могут служить отличным «хозяином» (*host*) для квантовых точек и наночастиц [20]. Схематическая иллюстрация подхода, используемого в

настоящей работе, для инкапсуляции квантовых точек CdSe и наночастиц Au в цилиндрическом домене блок-сополимер показаны на рисунке 1.6 [18].

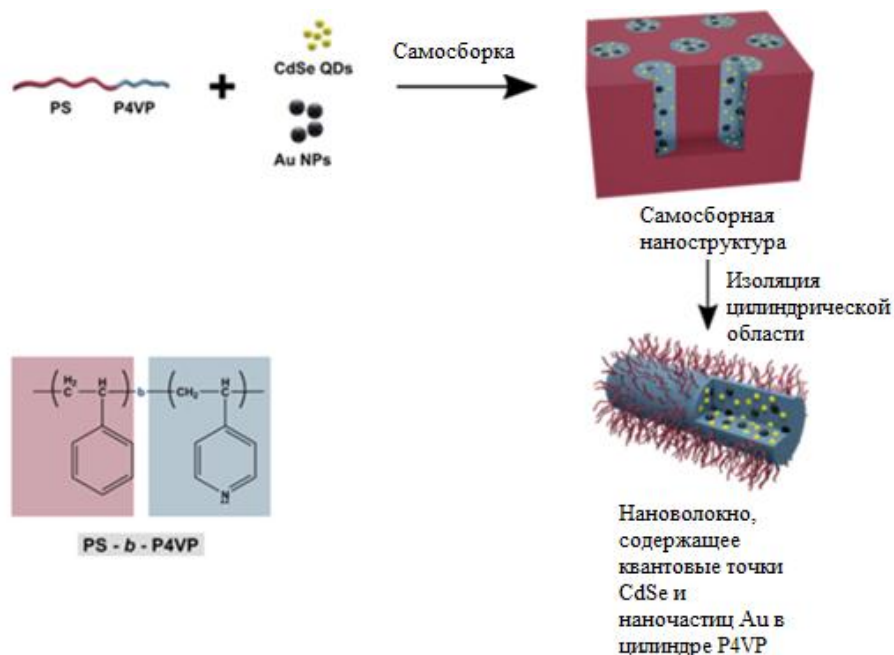


Рисунок 1.6 – Схематическая иллюстрация для получения структурных нановолокон блок-сополимер, содержащих наночастицы Au и квантовые точки CdSe в ядре нановолокон

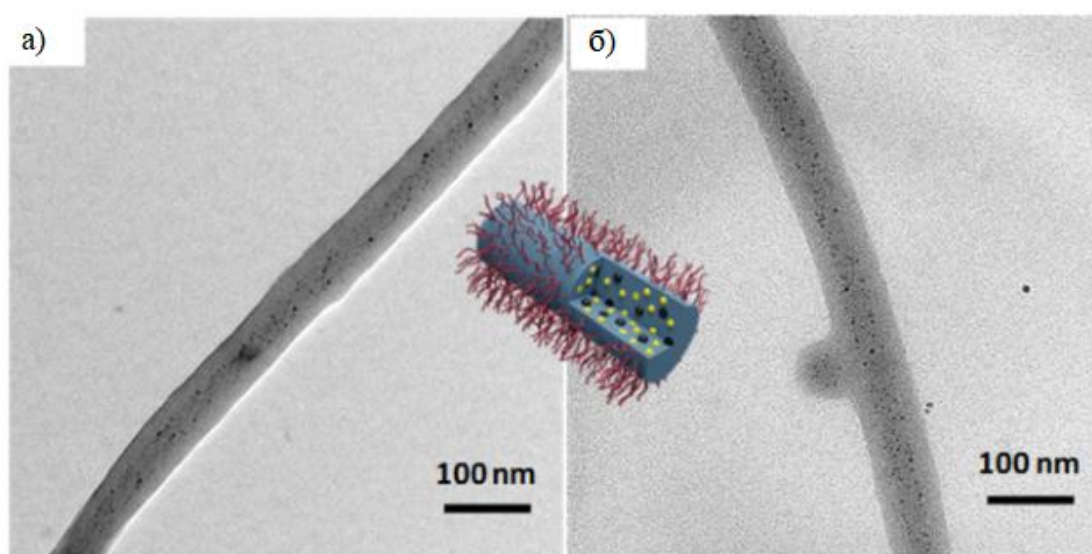
Таким образом, все три компонента, были отдельно растворены в хлороформе, а затем смешаны вместе ступенчатым образом. Поэтапное добавление квантовых точек с последующими наночастицами Au было сделано для обеспечения случайного включения двух типов добавок в домены поли(4-винилпиридин) и, следовательно, минимизации агрегации из-за любых возможных взаимодействий между квантовых точек и наночастиц Au вовремя самосборки. Затем давали возможность самосборки из раствора хлороформа путем медленного испарения растворителя с образованием наноцилиндров поли(4-винилпиридин) в матрице поверхностного плазмона [21]. Впоследствии цилиндрические домены были извлечены путем селективного «набухания» (*swelling*) и распада матрицы поверхностного плазмона с использованием подхода

селективного растворителя. Это было сделано путем погружения объемных образцов в селективный растворитель поверхностного плазмона, то есть циклогексан. Селективное набухание матрицы поверхностного плазмона отталкивает цилиндрические домены поли(4-винилпиридин) друг от друга и при достаточном разбавлении наблюдается дисперсия отдельных цилиндров ядро-оболочка, состоящих из ядра поли(4-винилпиридин) и загруженных наночастицами/квантовыми точками, и оболочки набухшего растворителя. Следует отметить, что молекулы циклогексана сольватируют только матрицу поверхностного плазмона, в то время как домены поли(4-винилпиридин) остались невредимыми. Такие условия обеспечивают, что квантовые точки и наночастицы Au, инкапсулированные внутри цилиндрических доменов поли(4-винилпиридин), также остаются незатронутыми после стадии дезинтеграции [22].

Из предварительного эксперимента было установлено, что наночастицы Au, стабилизированные лигандом октадециламин, также благоприятствуют фазе поли(4-винилпиридин) и, следовательно, предпочтительно расположены внутри их доменов. Следует отметить, что химический состав поверхности двух функциональных зон, то есть квантовых точек и наночастиц Au, был почти одинаковым. Следовательно, как только обе функциональные возможности по отдельности равномерно распределяются в домене поли(4-винилпиридин), ожидалось, что их смесь также будет случайным образом распределена в данном домене [23].

Затем была проанализирована объемная морфология композитов блок-сополимер/CdSe/Au с использованием измерений малоугловым рассеянием рентгеновского излучения (МРРИ). Профили интенсивности МРРИ для чистого блок-сополимера и различных композитных образцов блок-сополимер/CdSe/Au. Кривая интенсивности МРРИ чистого блок-сополимера выявила пики в соотношении $1: \sqrt{3}: \sqrt{7}$, что означает наличие цилиндрических доменов, упакованных в шестиугольную решетку. Кроме того, в МРРИ профили интенсивности составных образцов, пики рассеяния наблюдаются в соотношении $1: \sqrt{3}: \sqrt{4}$, что позволяет предположить, что шестиугольно упакованная

цилиндрическая морфология также сохраняется в образцах композита блок-сополимер/CdSe/Au. Результаты МРРИ дополнительно подтверждаются визуализацией ТЕМ микротомированных образцов композитов блок-сополимер/CdSe/Au [24]. В качестве примера на рисунке 1.7 показаны шестигранно упакованные цилиндрические структуры образца композита блок-сополимер/CdSe/Au при массовом соотношении CdSe: Au=1:1[18]. Кроме того, было обнаружено, что квантовые точки CdSe, а также наночастицы Au расположены внутри цилиндрических доменов, образованных блоками поли(4-винилпиридин).



а) 1:1 и б) 1:0,3. Вставка между а) и б) показывает схематическое изображение функционального нановолокна

Рисунок 1.7 – ПЭМ-изображения функциональных нановолокон, высвободившихся в циклогексане после набухания и распада матрицы полистирол композитов полистирол-блок-поли(4-винилпиридин)/CdSe/Au с различным массовым соотношением CdSe: Au

На последующем этапе композиты обрабатывали циклогексаном, который предпочтительно взаимодействует с матричной фазой полистирола. Это приводит к выделению цилиндрических областей блок-сополимера в форме функциональных нановолокон типа ядро-оболочка в циклогексане. Для создания различных образцов количество квантовых точек CdSe поддерживалось постоянным (5% по массе относительно блок-сополимера), в то время как

соотношение CdSe:Au изменялось. На рисунке 1.7 представлены ПЭМ-микрофотографии функциональных нановолокон, извлеченных из тройных композитов блок-сополимер/CdSe/Au, полученных при двух разных соотношениях CdSe:Au [25]. На рисунке 1.8 показано типичное изображение сканирующей просвечивающей электронной микроскопии в темном поле под большим углом и соответствующие карты элементов углерода, азота, золота, кадмия и селена в функциональных нановолокнах полистирол-блок-поли(4-винилпиридин)/CdSe/Au. Анализ энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии однозначно подтверждает наличие как квантовых точек CdSe, так и наночастиц Au в ядре поли(4-винилпиридин) функциональных нановолокон, которое определяется взаимодействиями квантовых точек-пиридина и Au-пиридина. На рисунке 1.8 видно, как одно волокно, так и два объединенных волокна [18]. Слившиеся волокна могли образоваться в процессе испарения растворителя при подготовке образца к ПЭМ или быть сохранены на этапе селективного растворения [26].

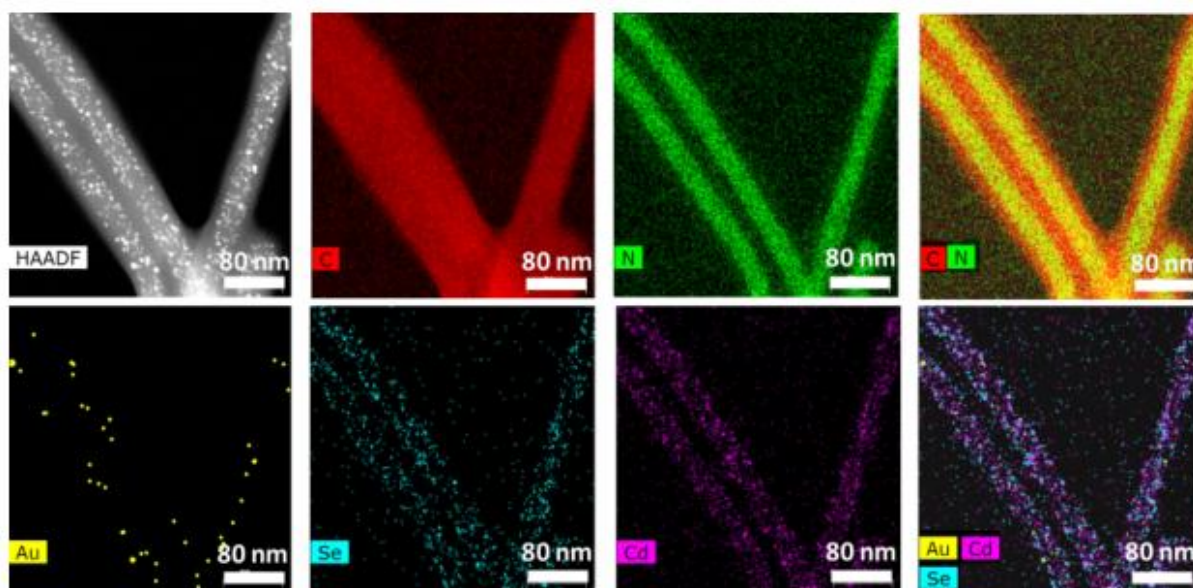


Рисунок 1.8 – Микрофотография просвечивающей электронной микроскопии в темном поле под большим углом и карты распределения элементов на основе энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии композитных функциональных нановолокон полистирол-блок-поли(4-винилпиридин)/CdSe/Au при массовом соотношении CdSe:Au 1:1

Была получена довольно подробная картина увеличения и подавления фотолюминесценции в изучаемых системах блок-сополимер/CdSe/Au. Как иллюстрируется на рисунке 1.9, количество наночастиц Au может регулировать оптимальное расстояние между квантовыми точками CdSe и наночастицами Au [18]. Изначально интенсивность фотолюминесценции возросла за счет передачи энергии поглощения поверхностного плазмона от наночастиц Au к квантовым точкам CdSe, поскольку предполагалось, что расстояние между ними увеличится из-за небольшого количества наночастиц Au [27]. Однако масштаб расстояния между CdSe и Au также определяет ЛАД/явления переноса заряда от КТ CdSe к AuNPs. Следует отметить, что гашение в излучении происходит во многом из-за переноса электронов Ферстера резонансного переноса энергии/переноса фотовозбужденных от полупроводниковой квантовых точек к металлическим наночастицам. Следовательно, поскольку количество наночастиц Au превышает критический порог, физическое ограничение квантовых точек и наночастиц Au, заключенных в цилиндры, вероятно, заставит часть из них приблизиться друг к другу, так что резонансная энергия/электроны могут легко передаваться из квантовых точек CdSe к наночастицам Au, что приводит к подавлению излучения. Следовательно, в настоящем исследовании усиление и подавление излучения являются результатом взаимодействия между передачей энергии из-за поверхностного плазмона резонансной связи и энергией/передача заряда с квантовых точек CdSe на наночастицы Au [28].

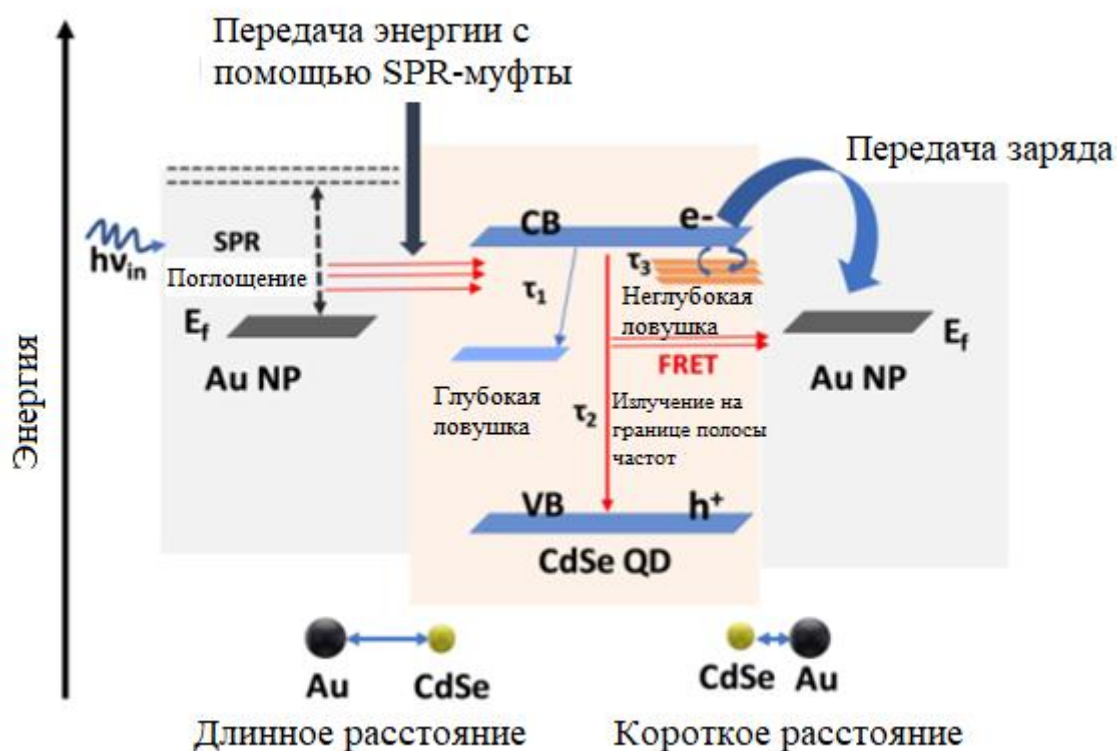


Рисунок 1.9 – Схематическая диаграмма механизма усиления и подавления эмиссии квантовых точек в функциональных нановолокнах

Из вышесказанного следует, что расстояние между наночастицами Au и квантовыми точками CdSe в ядре цилиндра регулировалось путем изменения количества наночастиц Au по отношению к квантовым точкам CdSe. Было замечено, что интенсивность фотолюминесценции квантовых точек CdSe увеличивается при очень низких массовых соотношениях наночастиц Au. При более высоких весовых соотношениях CdSe/Au интенсивность фотолюминесценции снижалась и полностью уменьшалась при массовом соотношении 1:1. Полученные функциональные нановолокна применяются в сенсорных устройствах, биовизуализации и функциональных оптоэлектронных устройствах [25].

1.3 Поперечное сечение фотоионизации и энергия связи одиночной примеси в полый цилиндрической квантовой точке ядро-оболочка

В данной работе была исследована ограниченная донорная примесь в полый квантовой точке с цилиндрической оболочкой. Предполагается, что заряды полностью локализованы внутри оболочки жесткими стенками. В рамках приближения эффективной массы и с использованием простого вариационного подхода была рассчитана энергия связи донора в зависимости от размеров оболочки, чтобы исследовать поведение притяжения электрона примеси при очень малой толщине. Результаты показывают, что энергия связи донорной примеси, помещенной в центр цилиндрических точек ядра/оболочки, сильно зависит от размера оболочки. Энергия связи увеличивается, когда ширина оболочки становится меньше, и показывает то же поведение, что и в простой цилиндрической квантовой точке. Также было исследовано сечение фотоионизации, учитывая только плоскостную поляризацию падающего излучения. Его поведение определяется в зависимости от энергии фотона, размера оболочки и положения донора. Измерение фотоионизации в таких системах представляет большой интерес для понимания оптических свойств носителей в квантовых точках.

В зависимости от степени удержания были изготовлены многочисленные разновидности нанополупроводниковых материалов различной формы (среди прочего, проволока, точка, линза и пластинка).

Была рассмотрена цилиндрическая квантовая точка ядро-оболочка с внутренним и внешним радиусами a и b , соответственно и высота H должно быть намного длиннее, чем b ($H \geq b$). Эта ситуация соответствует карандаш образной структуре. Предположено, что два чешуйчатых материала, используемых для ядра и оболочки, имеют большие смещения полос, как $CdS/HgSi$ или как SiO_2 . В таких случаях носители заряда можно считать полностью заключенными в материале оболочки. Таким образом, конструкцию можно описать полым цилиндром представленной на рисунке 1.10.

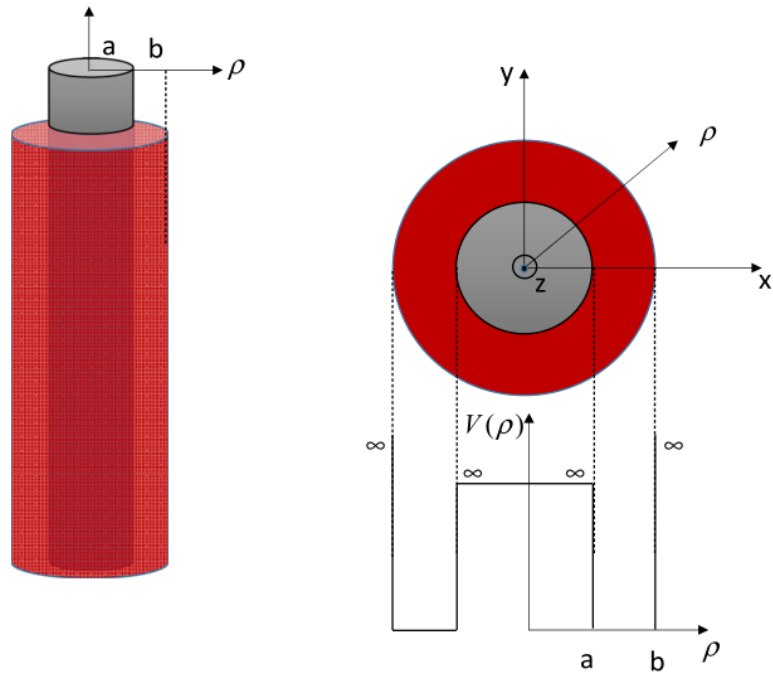


Рисунок 1.10 – Цилиндрическая структура

Чтобы понять влияние положения примеси, было представлено на рисунке 1.11 энергия связи в зависимости от отношения a/b для трех значимых позиций ионизированного донора: $\rho_D = a$, $\rho_D = (a + b)/2$ и $\rho_D = b$.

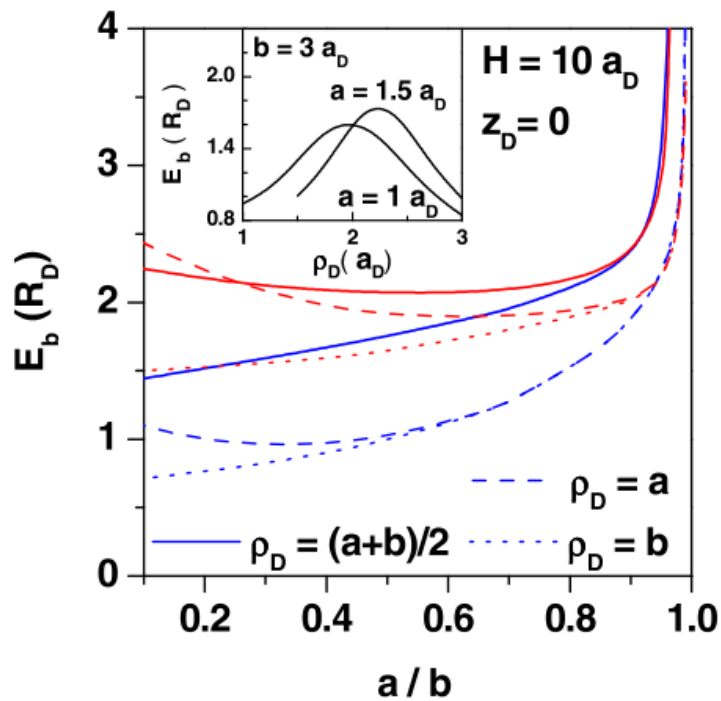


Рисунок 1.11 –Энергия связи примеси

Было рассмотрено оба случая: слабое ограничение ($b = 3a_D$) и сильное ограничение ($b = 1a_D$). Рассмотрим анализа в случае слабого ограничения (синие

кривые). Как видно, радиальное положение примеси в оболочке играет важную роль в поведении энергии связи. Энергия более значима для $\rho_D = (a + b)/2$, для $\rho_D = a$, для $\rho_D = b$, относительно отношения $E_b(b) < E_b(a) < E_b((a + b)/2)$ независимо от значения коэффициента a/b . Следовательно, взаимодействие электрона с примесью сильнее $\rho_D = (a + b)/2$, как видно на рисунке 1.11. Это связано с тем, что электрон локализован очень близко к ионизированному донору и его плотность абсолютно симметрична относительно примеси, что maximизирует кулоновское взаимодействие. По мере продвижения ионизированного донора к краям ($\rho_D = a$, и $\rho_D = b$), электрон стремится заполнить все пространство оболочки и может избежать притяжения ионизированного донора. Таким образом, плотность теряет свою симметрию, и, следовательно, среднее расстояние между электронами и ионами maximизируется, а потенциал притяжения менее ощутим, что приводит к ослаблению энергии связи. Также, кривые, соответствующие $\rho_D = a$, и $\rho_D = b$ раздельно, когда отношение (a/b) стремится к нулю. Анализируя фигуру в окне, была обнаружена эта асимметрия, когда ионизированный донор смещается на внутренний или внешний край.

Но с другой стороны, в режиме сильного ограничения ($b = 1a_D$, красные кривые), энергия связи сохраняет почти те же профили, что и при слабом ограничении. В этом режиме наличие пересечения кривых относительно $\rho_D = a$ и $\rho_D = (a + b)/2$, когда a стремится к нулю из-за преобладания сильных ограничений эффектов.

Было проанализировано влияние z -осевого положения ионизированного донора. В качестве примера была выбрана цилиндрическая оболочка радиусом $b = 3a_D$, высота $H = 10a_D$, и несколько положений примеси вдоль z -направления, сохраняющее постоянное $\rho_D = (a + b)/2$. На рисунке 1.12 суммируется энергия связи по отношению a/b для двух различных осевых положений примеси $z_D = 0$ и $z_D = \pm H/2$.

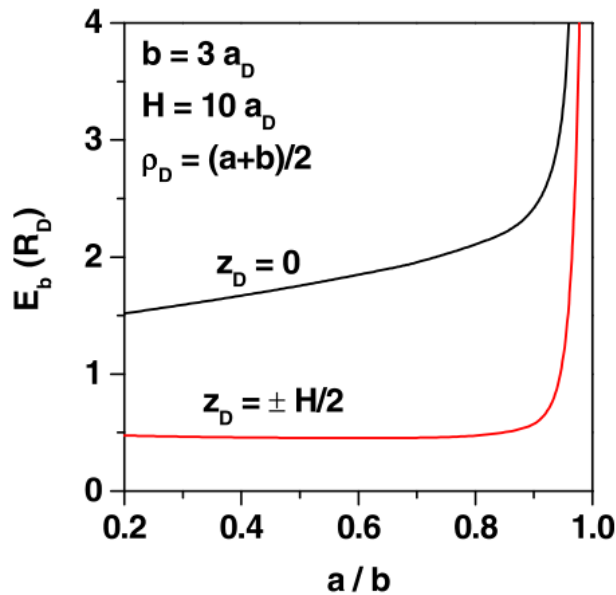


Рисунок 1.12 – Энергия связи ионизированного донора

Простое сравнение двух кривых показывает, что при размещении ионизированного донора на поперечных краях ($z_D = \pm H/2$) энергия связи остается постоянной, а затем резко возрастает при $(a/b)_{crit}$, но когда примесь помещается в $z_D = 0$ изменение становится очевидным и монотонно возрастает, достигая большого значения связывания, когда (a/b) как правило $(a/b)_{crit}$. Это сравнение позволяет заключить, что энергия связи чувствительна к расстоянию электронной примеси вдоль оси z только в случае $z_D = 0$.

Была исследована ограниченная донорная примесь в поллой квантовой точке с цилиндрической оболочкой, где электронно-примесная пара полностью ограничена внутренней частью оболочки с жесткими стенками. Энергия связи донора была изучена в зависимости от размеров оболочки, чтобы понять поведение притяжения электронов примеси для очень малой толщины. Результаты показывают, что энергия связи донорной примеси, помещенной в центр цилиндрических точек ядра/оболочки, сильно зависит от размера оболочки, и она увеличивается, когда толщина оболочки становится меньше, и ведет себя так же, как и энергия связи простой цилиндрической квантовой точки.

Полученные данные о сечении фотоионизации в таких системах представляют большой интерес для понимания оптических свойств носителей в квантовых точках [29].

2 Наноструктуры сложной геометрии как объект наблюдения квантово-размерных эффектов

2.1 Анализ особенностей морфологии и параметров зонной структуры экспериментальных образцов наноструктур сложной геометрии на основе CuO-ZnO

Нанопроволка CuO была приготовлена простым и высокопроизводительным методом термического окисления на воздухе. Сначала медную фольгу толщиной 1 мм разрезали на фрагменты толщиной 2 см и промывали в течение 5 минут в ацетоне и изопропиловом спирте с использованием ультразвуковой ванны. Затем медную фольгу несколько раз промывали в деионизированной воде, сушили в потоке газообразного азота и помещали на керамическую подложку. После этого медную фольгу подвергли термическому окислению на воздухе при температуре 450 °C в течение 12 часов при атмосферном давлении в конвекционной печи. Чтобы получить массивы нанопроволок CuO-ZnO ядро-оболочка, поверхность массивов нанопроволок CuO была покрыта тонкой пленкой ZnO методом радиочастотного магнетронного распыления. Затем массивы нанопроволок CuO-ZnO ядро-оболочка, приготовленные на медной фольге, были добавлены в сверхчистый изопропиловый спирт с помощью ультразвука для достижения суспензии нанопроволок. Основные этапы изготовления массивов нанопроволок CuO-ZnO ядро-оболочка представлены на рисунке 2.1.

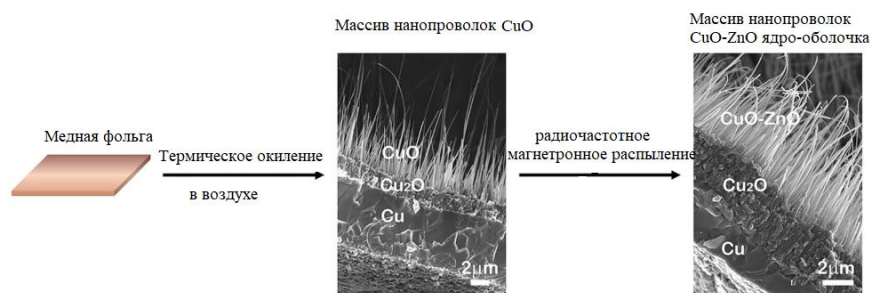
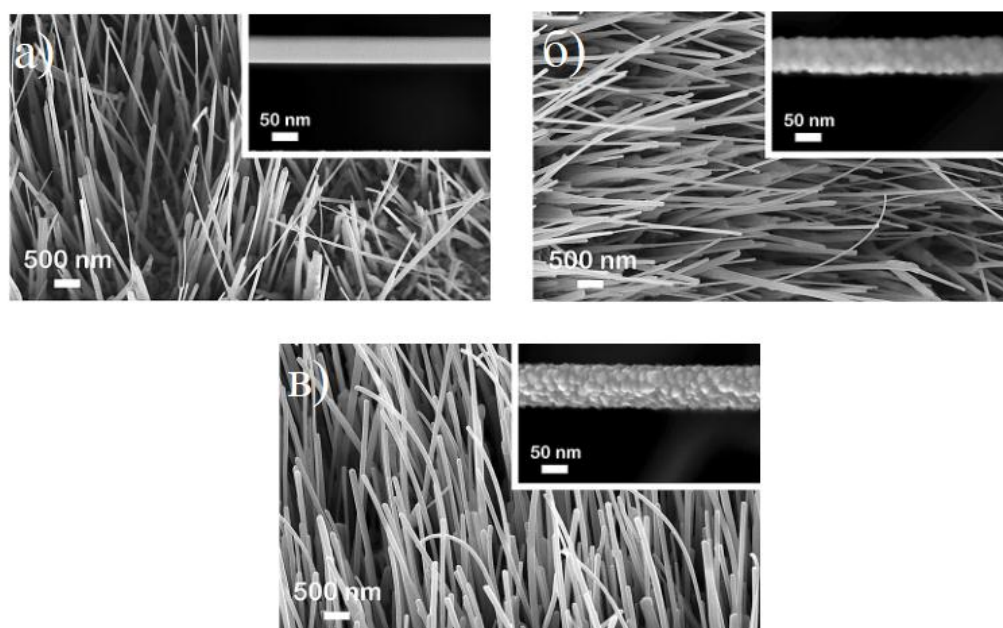


Рисунок 2.1 – Схематическое изображение основных этапов изготовления массивов нанопроволок CuO-ZnO ядро-оболочка

Морфологические свойства наночастиц CuO и массивы нанопроволок ядро-оболочка CuO-ZnO представлены на рисунке 2.2. Нанопроволоки CuO

выращиваются вертикально на медной фольге, причем в случае нанопроволок CuO–ZnO_2 ядро–оболочка наблюдается небольшой наклон из-за осаждения более толстой оболочки ZnO. Изображения полевой эмиссионной сканирующей электронной микроскопии (ПЭСЭМ) нанопроволок CuO при большем увеличении (рисунок 2.2а) и массивы нанопроволок ядро–оболочка CuO–ZnO (рисунок 3 вставка б, вставка в) имеют средний диаметр около 50 нм для нанопроволок CuO, 70 нм для нанопроволок ядро–оболочка CuO–ZnO_1 и 80 нм для нанопроволок ядро–оболочка CuO–ZnO_2. Таким образом, толщину оболочки ZnO можно оценить примерно в 10 нм для CuO–ZnO_1 и 15 нм для CuO–ZnO_2. Кроме того, можно заметить, что оболочка ZnO, покрывающая поверхность нанопроволок CuO, представляет собой тонкую зернистую наноструктурированную пленку, имеющую фрактальную структуру.

Изображение ПЭСЭМ наночастиц CuO и массивы нанопроволок ядро–оболочка CuO–ZnO представлены на рисунке 2.2.



а) нанопроволока CuO; (б) нанопроволока CuO–ZnO_1 ядро–оболочка;
в) нанопроволока CuO–ZnO_2 ядро–оболочка

Рисунок 2.2 – Изображения ПЭСЭМ при разном увеличении

Для оценки электрических и фотоэлектрических свойств одиночных нанопроволок CuO и нанопроволок CuO–ZnO в оболочке ядра использовались

электронно-лучевая литография (ЭЛЛ) и сфокусировано индуцированное осаждение ионным пучком (СИОИП) для контакта с одиночными нанопроволоками. Таким образом, одиночные нанопроволоки CuO были соединены с помощью СИОИП с Pt контактами (толщина 300 нм) с двух концов нанопроволоки с Ti-Pt интердигитированными электродами. На рисунке 2.3а представлено ПЭСЭМ-изображение одиночной нанопроволоки CuO, контактирующей с помощью СИОИП с расстоянием около 10 мкм между двумя металлическими контактами Pt. Соответственно, одиночные нанопроволоки CuO-ZnO с ядром-оболочка были соединены с помощью ЭЛЛ, растворения ZnO в водных растворах наноразмеров, СИОИП и методов тонкопленочного осаждения, в результате чего одиночные нанопроволоки были соединены с одного конца (на оболочке ZnO) с Ti-Au (толщиной 100 нм/200 нм) с помощью ЭЛЛ, а с другого конца (на сердцевине CuO) с Pt (толщиной 300 нм) с помощью ПЭСЭМ. На рисунке 2.3 б показано ПЭСЭМ-изображение одной нанопроволоки CuO-ZnO_1 с ядром-оболочка, контактирующей с ЭЛЛ и СИОИП, с расстоянием между двумя металлическими контактами Ti-Au и Pt около 5 мкм, а на рисунке 2.3 в ПЭСЭМ-изображение одной нанопроволоки CuO-ZnO_2 с ядром-оболочка с расстоянием между контактами около 9 мкм. Более того, ПЭСЭМ-изображения при большем увеличении (рисунок 2.3 б, в) одиночных нанопроволок CuO-ZnO_1 и CuO-ZnO_2 с ядром-оболочка свидетельствуют о наличии интерфейса между CuO и ZnO, полученного при растворении в водном растворе оболочки ZnO на одном конце нанопроволоки CuO-ZnO с ядром-оболочка. Это позволяет исследовать электрические свойства самой радиальной гетероструктуры без учета помех, исходящих от границы раздела полупроводник/электрод, при соответствующей толщине оболочки. толщины оболочки.

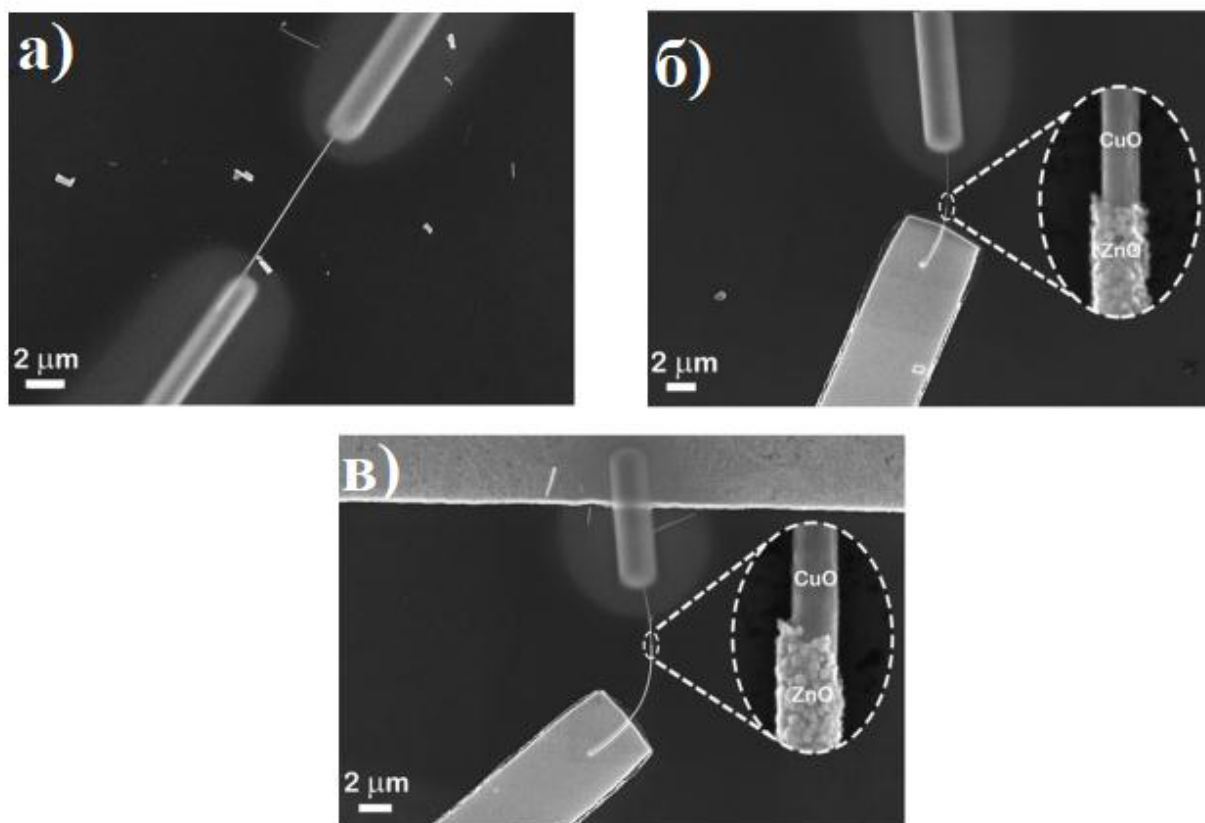


Рисунок 2.3 – Изображения ПЭСЭМ

На рисунке 2.4 представлена энергетическая зонная диаграмма квантовой точки.

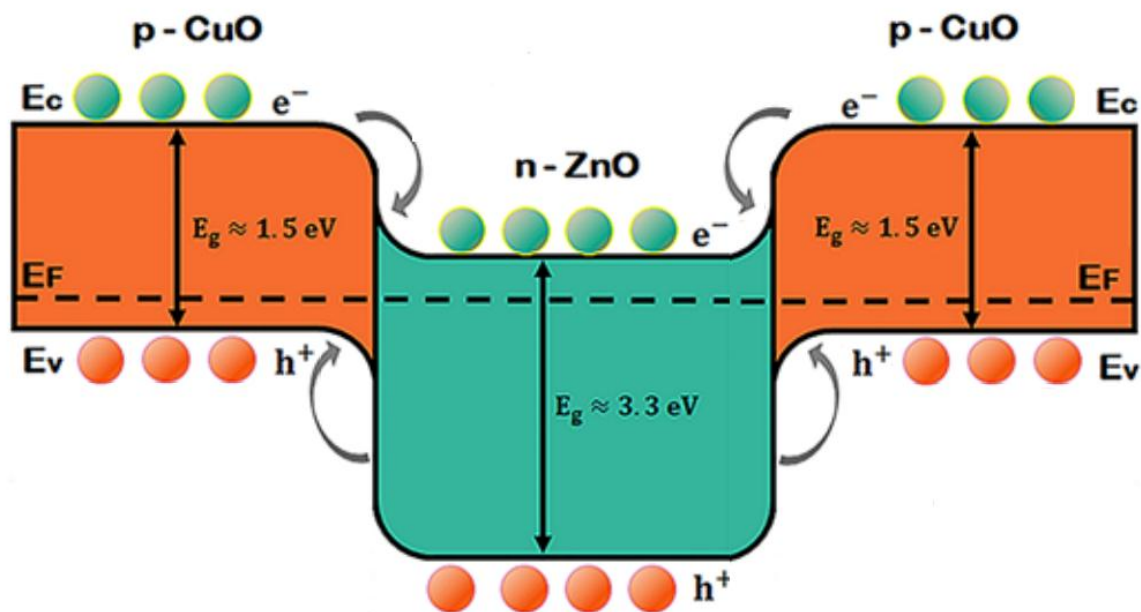


Рисунок 2.4 – Энергетическая зонная диаграмма квантовой точки ядро-оболочка: p-CuO, n-ZnO, p-CuO.

Для одиночной нанопроволоки CuO-ZnO_2 с ядром-оболочкой (рисунок 4) подчеркнута нелинейная асимметричная форма, обусловленная радиальным гетеропереходом, образующимся между ядром CuO и оболочкой ZnO. В этом случае увеличения фототока при освещении на длине волны 635 нм не происходит, в то время как увеличение фототока можно легко заметить при освещении на длинах волн 520 нм и 405 нм. Увеличение фототока диода с радиальным гетеропереходом *p-n* происходит за счет объединения ядра CuO и оболочки ZnO в гетеропереход со ступенчатым зазором, что приводит к усилению разделения зарядов на границе раздела ядро-оболочка CuO-ZnO.

Схематическое изображение зонной диаграммы гетероперехода CuO-ZnO при освещении, полученной в *p-n* диоде на основе одиночной нанопроволоки CuO-ZnO_2 ядро-оболочка, представленной на рисунке 4. При освещении *p-n* гетероперехода CuO-ZnO генерируемый фототок усиливается за счет выравнивания зон II типа, полученного в радиальной архитектуре "ядро-оболочка" за счет подавления рекомбинации фотогенерированных зарядов и повышения эффективности сбора фотогенерированных носителей заряда [30].

2.2 Анализ условий наблюдений квантовых размерных эффектов в наноструктурах сложной геометрии

Наблюдение квантово-размерного эффекта в нанообъектах (нанопроволоках, нановискерах, нанотрубках) цилиндрической формы возможно при выполнении следующих условий:

1) при заданной температуре, его высота и диаметр должен на несколько порядков превышать постоянную кристаллической решетки a_0 и быть соизмеримой с длиной волны де-Бройля:

$$\lambda \approx \frac{h}{\sqrt{3 \cdot m_e^* \cdot k \cdot T}}, \quad (2.1)$$

где h – постоянная Планка, m_e^* – эффективная масса носителей заряда, k – постоянная Больцмана, T – температура.

Для квантовых точек селенида кадмия, находящихся при комнатной температуре равной 300К, эффективная масса электрона $m_e^* = 0,13m_e$ (где m_e – масса покоя электрона).

$$\lambda \approx \frac{6,63 \cdot 10^{-34} \cdot \text{Дж} \cdot \text{с}}{\sqrt{3 \cdot 1,183 \cdot 10^{-31} \cdot \text{кг} \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \frac{\text{Дж}}{\text{К}} \cdot 300 \cdot \text{К}}} = 1,73 \cdot 10^{-8} \text{ м}$$

Для квантовых точек оксида цинка, находящихся при комнатной температуре равной 300К, эффективная масса электрона $m_e^* = 0,19m_e$ (где m_e – масса покоя электрона).

$$\lambda \approx \frac{6,63 \cdot 10^{-34} \cdot \text{Дж} \cdot \text{с}}{\sqrt{3 \cdot 1,729 \cdot 10^{-31} \text{ кг} \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \frac{\text{Дж}}{\text{К}} \cdot 300 \cdot \text{К}}} = 1,43 \cdot 10^{-8} \text{ м}$$

Для квантовых точек оксида меди, находящихся при комнатной температуре равной 300К, эффективная масса электрона $m_e^* = 0,4m_e$ (где m_e – масса покоя электрона).

$$\lambda \approx \frac{6,63 \cdot 10^{-34} \cdot \text{Дж} \cdot \text{с}}{\sqrt{3 \cdot 3,64 \cdot 10^{-31} \cdot \text{кг} \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \frac{\text{Дж}}{\text{К}} \cdot 300 \cdot \text{К}}} = 9,86 \cdot 10^{-9} \text{ м}$$

Постоянная кристаллической решетки: для селенида кадмия $a_0 = 0,43\text{нм}$, тогда отношение $\lambda/a_0 \approx 40$; для оксида цинка $a_0 = 0,33\text{нм}$, тогда отношение $\lambda/a_0 \approx 44$; для оксида меди $a_0 = 0,47\text{нм}$, тогда отношение $\lambda/a_0 \approx 21$.

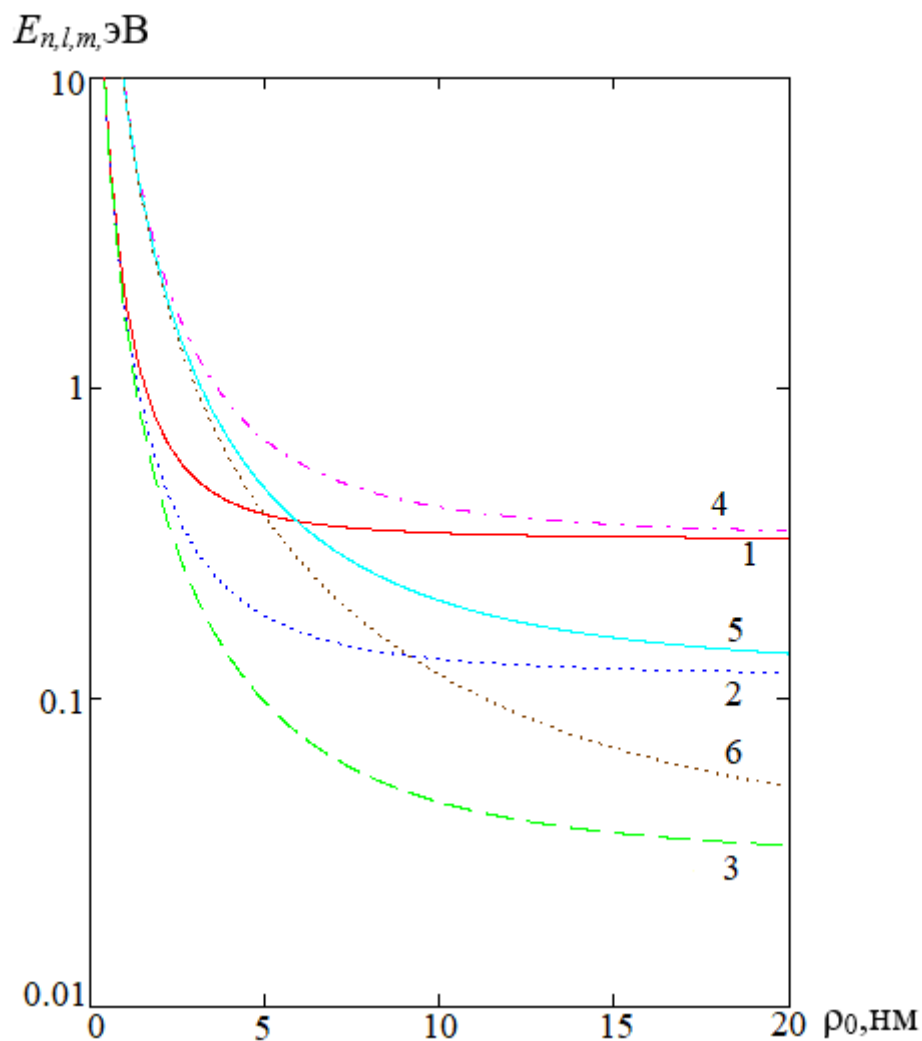
2) должно быть большое расстояние между энергетическими уровнями, что способствовало бы видимому проявлению квантово-размерных эффектов. Оно должно превышать тепловую энергию носителей заряда [29].

Энергетический спектр носителей заряда в цилиндрической квантовой точке находится по формуле:

$$E_{nlm} = \frac{\hbar^2}{2 \cdot m_e^*} \cdot \left(\frac{\xi_{nl}^2}{\rho_0^2} + \frac{\pi^2 \cdot m^2}{h^2} \right), \quad (2.2)$$

где $\hbar$ – приведенная постоянная Планка, ξ – n -й корень цилиндрической функции Бесселя порядка l , ρ_0 – радиус основания квантовой точки, h – высота квантовой точки, $m = 1, 2, 3, \dots$

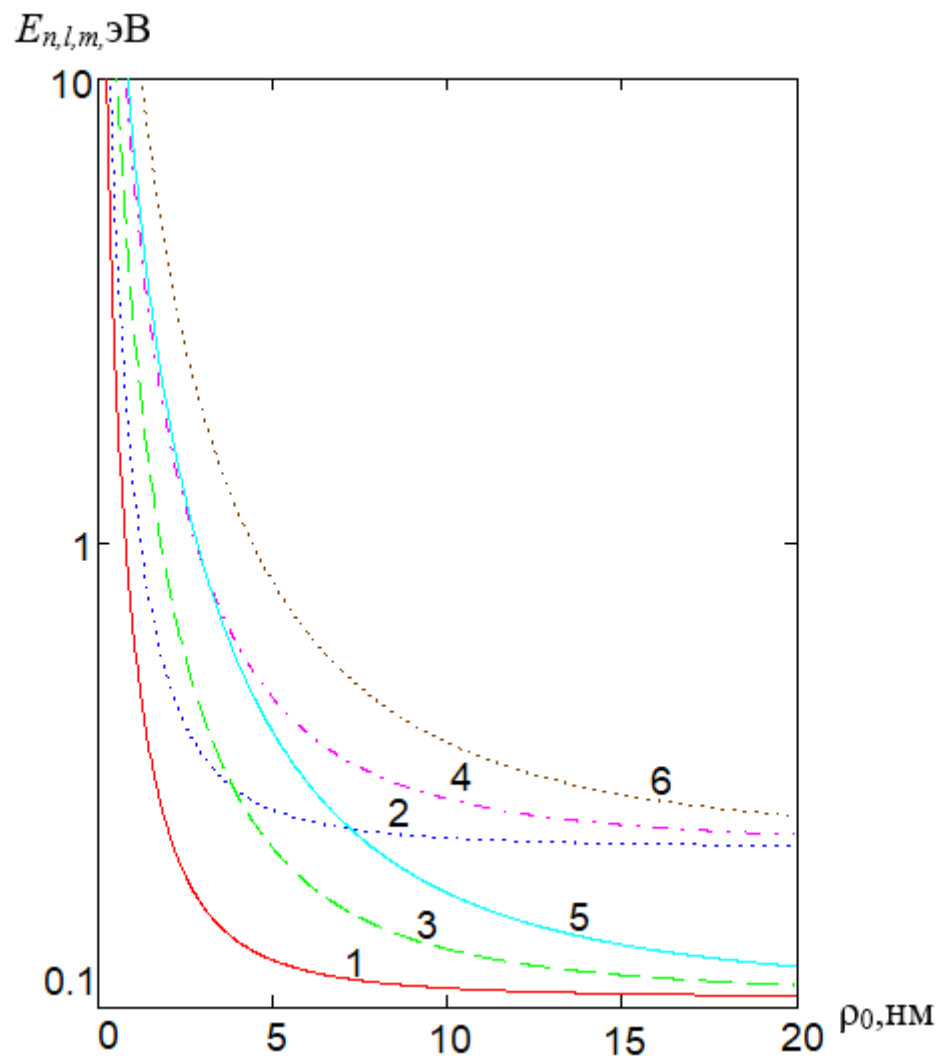
На рисунке 2.5 представлена зависимость энергетического спектра от радиуса основания квантовой точки ρ_0 для селенида кадмия.



1 – $n=1$, $h=3$ нм; 2 – $n=1$, $h=5$ нм; 3 – $n=1$, $h=10$ нм; 4 – $n=2$, $h=3$ нм; 5 – $n=2$, $h=5$ нм; 6 – $n=2$, $h=10$ нм

Рисунок 2.5 – Зависимость энергетического спектра от радиуса основания квантовой точки ρ_0 селенида кадмия

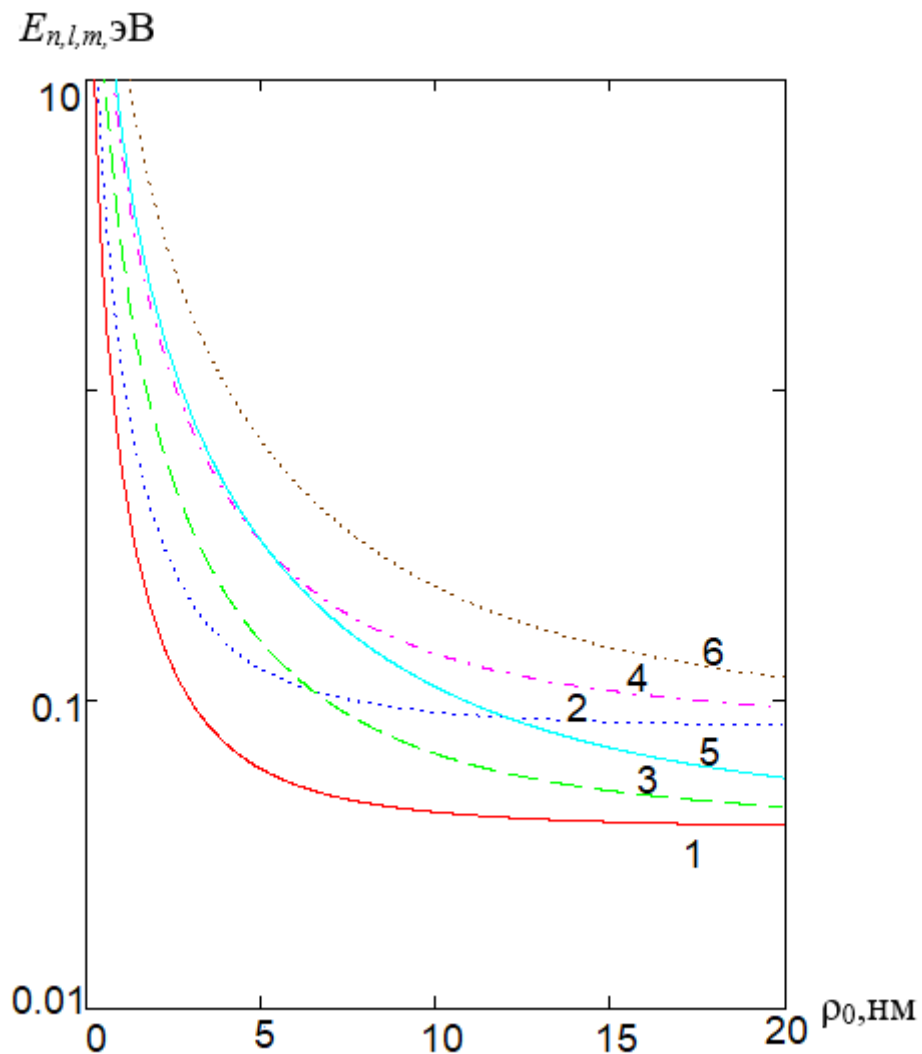
На рисунке 2.6 представлена зависимость энергетического спектра от радиуса основания квантовой точки ρ_0 для оксида цинка и оксида меди при $h=3$ нм.



1 – CuO $n=1$; 2 – ZnO $n=1$; 3 – CuO $n=2$; 4 – ZnO $n=2$; 5 – CuO $n=3$;
6 – ZnO $n=3$

Рисунок 2.6 – Зависимость энергетического спектра от радиуса основания квантовой точки ρ_0 оксида цинка и оксида меди при $h=3$ нм

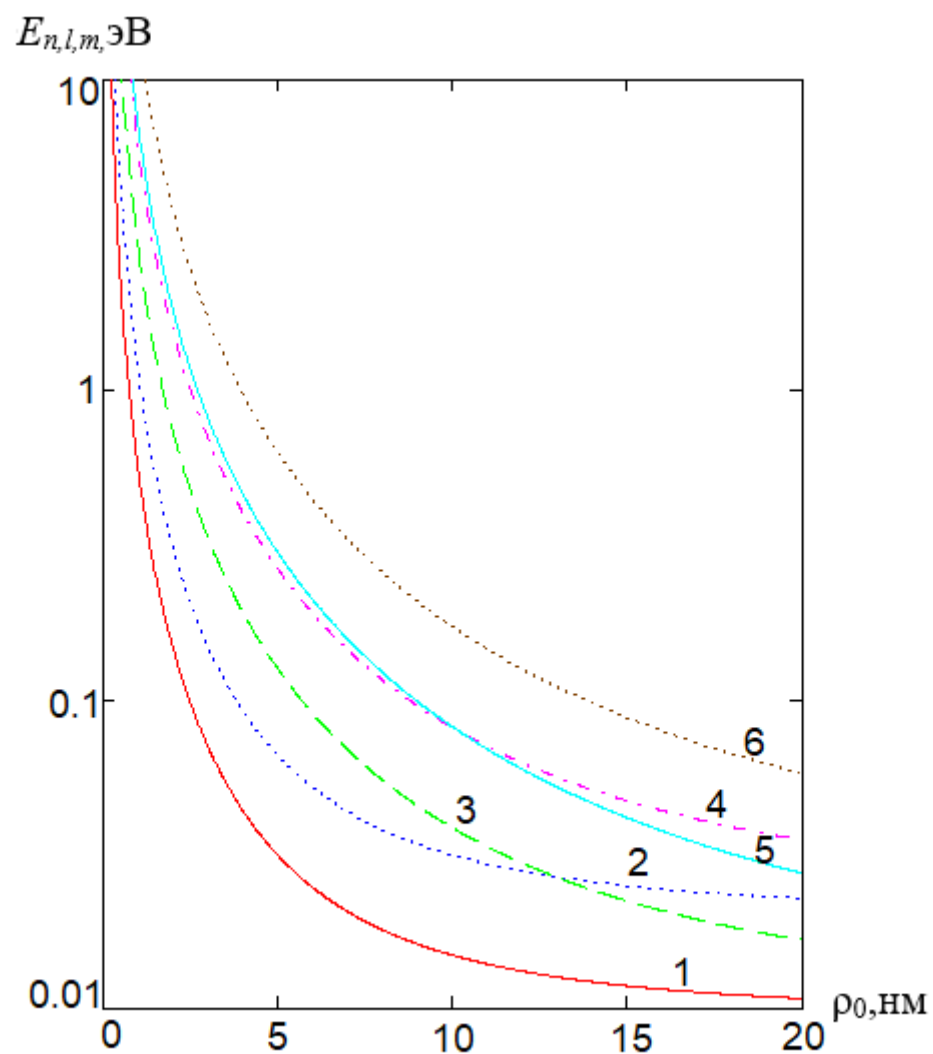
На рисунке 2.7 представлена зависимость энергетического спектра от радиуса основания квантовой точки ρ_0 для оксида цинка и оксида меди при $h=5$ нм.



1 – CuO $n=1$; 2 – ZnO $n=1$; 3 – CuO $n=2$; 4 – ZnO $n=2$; 5 – CuO $n=3$;
6 – ZnO $n=3$

Рисунок 2.7 – Зависимость энергетического спектра от радиуса основания квантовой точки ρ_0 оксида цинка и оксида меди при $h=5\text{ нм}$

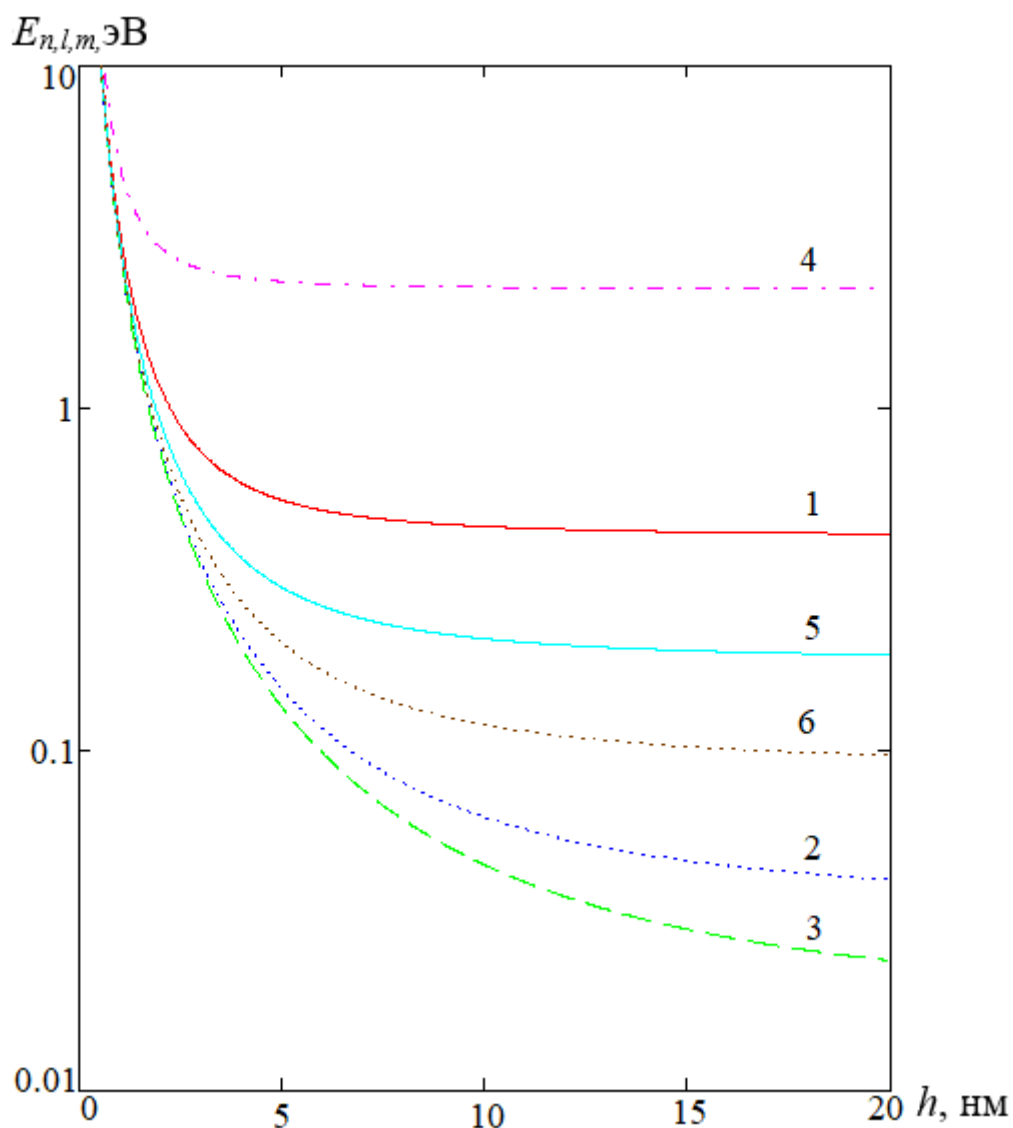
На рисунке 2.8 представлена зависимость энергетического спектра от радиуса основания квантовой точки ρ_0 для оксида цинка и оксида меди при $h=10\text{ нм}$.



1 – CuO $n=1$; 2 – ZnO $n=1$; 3 – CuO $n=2$; 4 – ZnO $n=2$; 5 – CuO $n=3$;
6 – ZnO $n=3$

Рисунок 2.8 – Зависимость энергетического спектра от радиуса основания квантовой точки ρ_0 оксида цинка и оксида меди при $h=10\text{nm}$

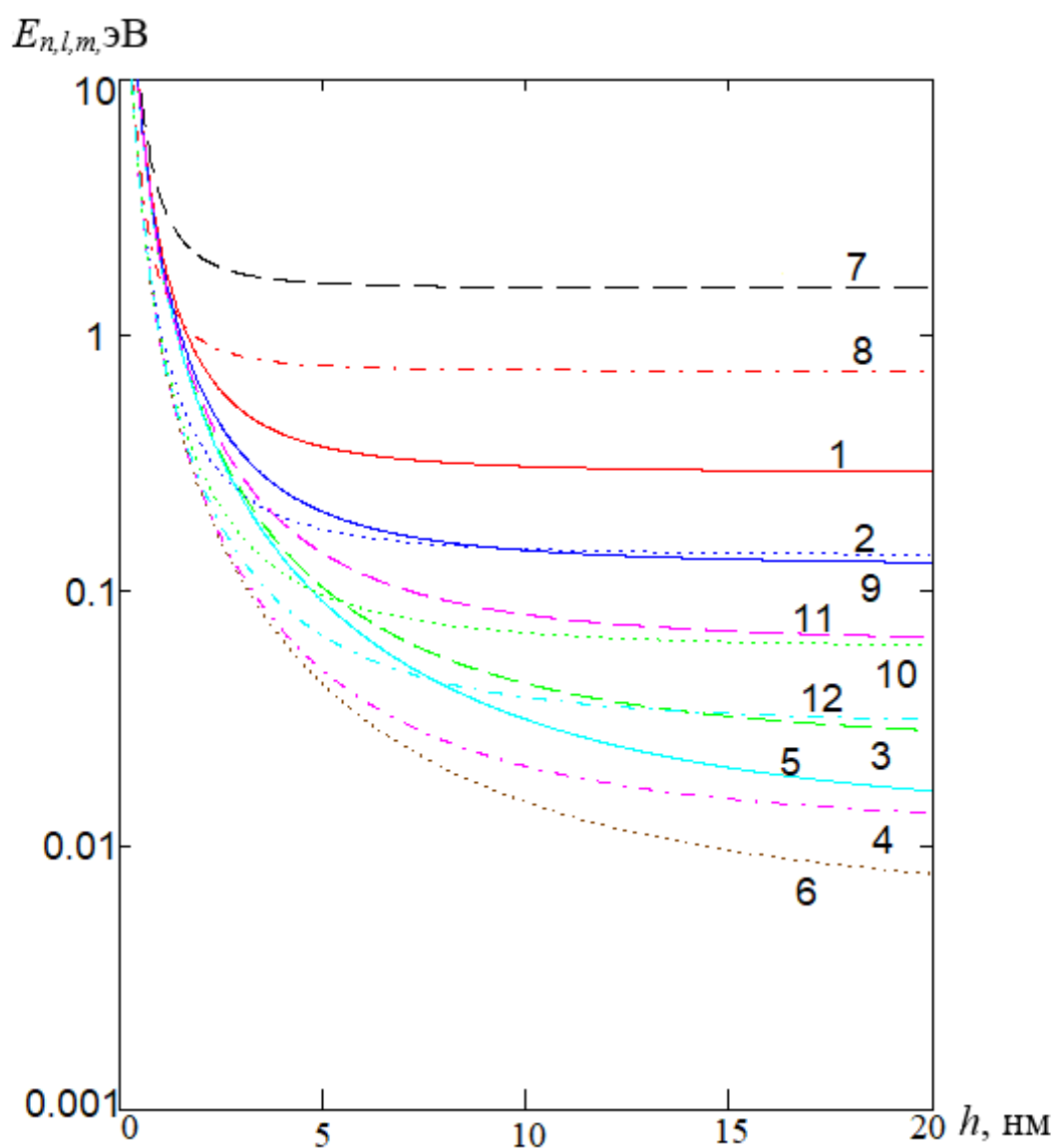
На рисунке 2.9 представлена зависимость энергетического спектра от высоты основания квантовой точки h для селенида кадмия.



1 – $n=1, \rho_0=2\text{ нм}$; 2 – $n=1, \rho_0=7\text{ нм}$; 3 – $n=1, \rho_0=10\text{ нм}$; 4 – $n=2, \rho_0=2\text{ нм}$; 5 – $n=2, \rho_0=7\text{ нм}$; 6 – $n=2, \rho_0=10\text{ нм}$

Рисунок 2.9– Зависимость энергетического спектра от высоты основания квантовой точки h для селенида кадмия

На рисунке 2.10 представлена зависимость энергетического спектра от высоты основания квантовой точки h для оксида цинка и оксида меди.



- 1 – $\text{ZnO}n=1, \rho_0=2\text{нм}$; 2 – $\text{CuO}n=1, \rho_0=2\text{нм}$;
 3 – $\text{ZnO}n=1, \rho_0=7\text{нм}$; 4 – $\text{CuO}n=1, \rho_0=7\text{нм}$;
 5 – $\text{ZnO}n=1, \rho_0=10\text{нм}$; 6 – $\text{CuO}n=1, \rho_0=10\text{нм}$;
 7 – $\text{ZnO}n=2, \rho_0=2\text{нм}$; 8 – $\text{CuO}n=2, \rho_0=2\text{нм}$;
 9 – $\text{ZnO}n=2, \rho_0=7\text{нм}$; 10 – $\text{CuO}n=2, \rho_0=7\text{нм}$;
 11 – $\text{ZnO}n=2, \rho_0=10\text{нм}$; 12 – $\text{CuO}n=2, \rho_0=10\text{нм}$

Рисунок 2.10– Зависимость энергетического спектра от высоты основания квантовой точки h для оксида цинка и оксида меди

На рисунке 2.11 представлено расстояние между соседними энергетическими уровнями как функция от ρ_0 для селенида кадмия.

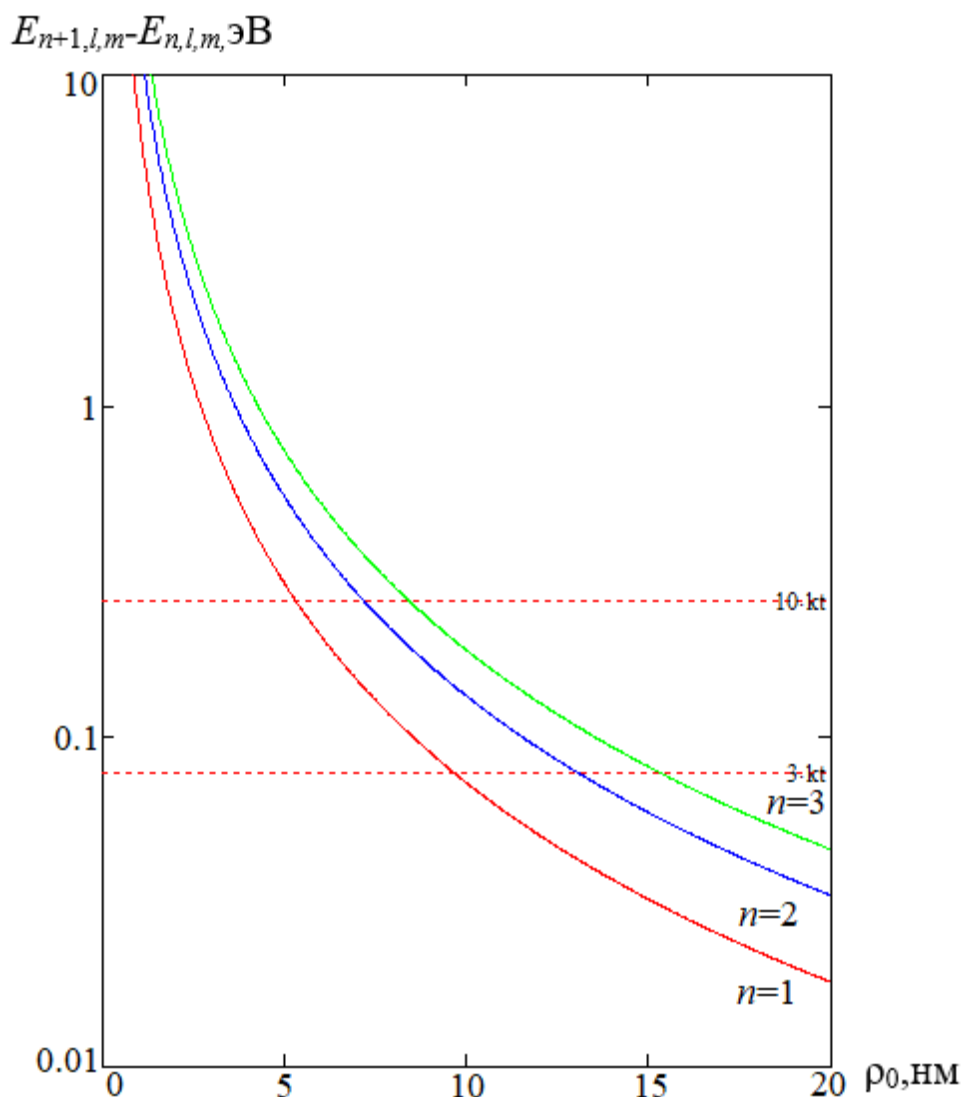


Рисунок 2.11 – Расстояние между соседними энергетическими уровнями как функция от ρ_0 ($h=3$ нм, $l=0$, $m=1$) для селенида кадмия

На рисунке 2.12 представлено расстояние между соседними энергетическими уровнями как функция от ρ_0 для оксида цинка и оксида меди.

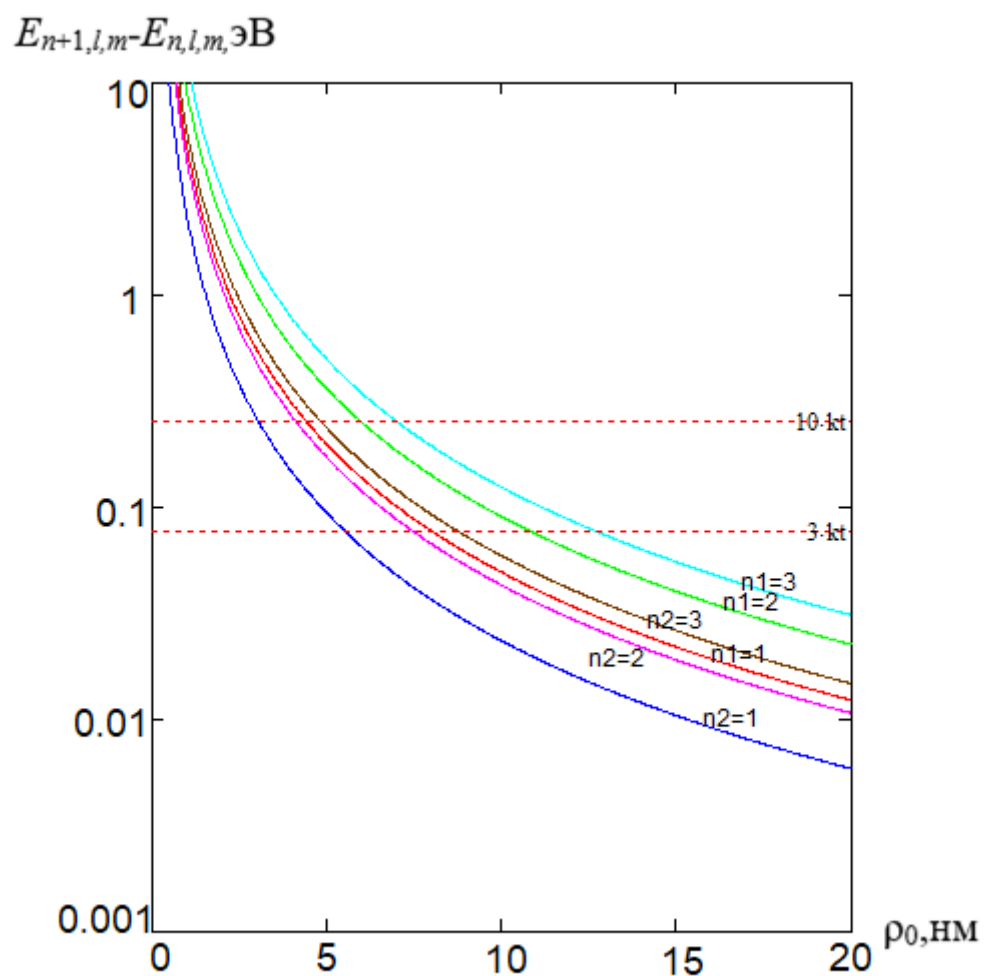


Рисунок 2.12 – Расстояние между соседними энергетическими уровнями как функция от ρ_0 ($h=3\text{ нм}$, $l=0$, $m=1$) для оксида цинка(n_1) и меди(n_2)

На рисунке 2.13 представлено расстояние между соседними энергетическими уровнями как функция от h селенида кадмия.

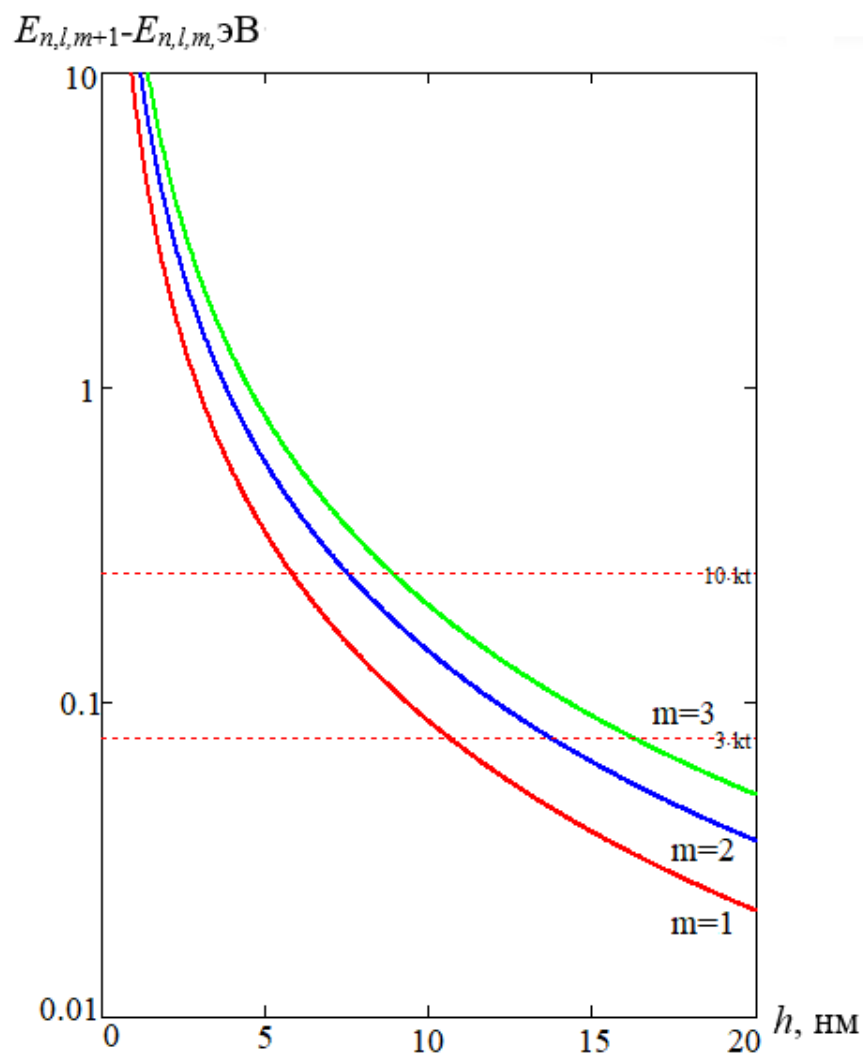


Рисунок 2.13 – Расстояние между соседними энергетическими уровнями как функция от h ($\rho_0=2\text{нм}$, $l=0$, $n=1$) для селенида кадмия

На рисунке 2.14 представлено расстояние между соседними энергетическими уровнями как функция от h для оксида цинка и оксида меди.

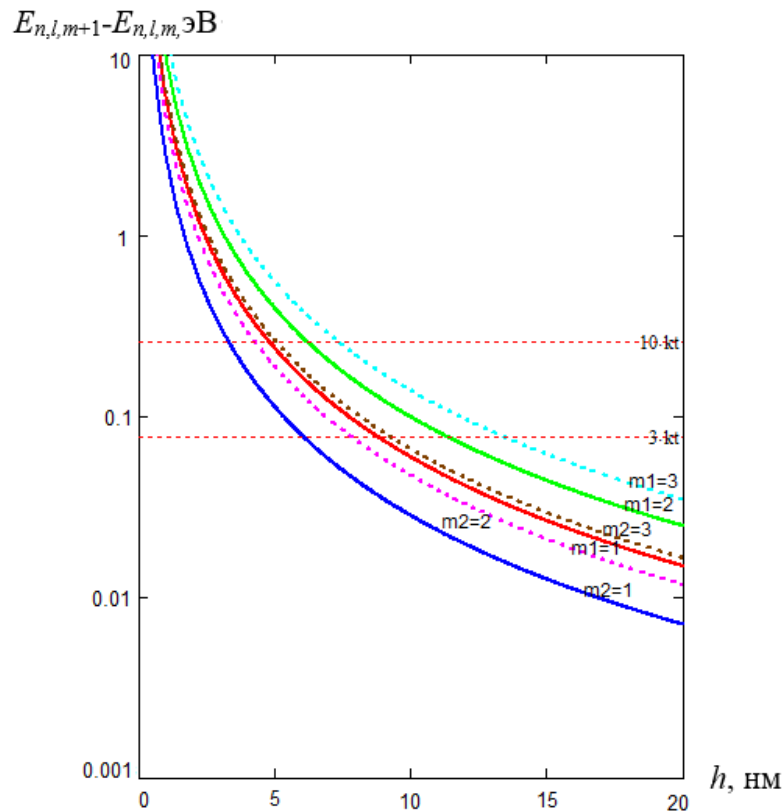


Рисунок 2.14 – Расстояние между соседними энергетическими уровнями как функция от h ($\rho_0=2\text{нм}$, $l=0$, $n=1$) для оксида цинка(m_1) и оксида меди(m_2)

3) При наличии отдельных дискретных уровней в структуре системы:

$$\Delta E = \frac{\hbar \cdot e}{m_e^* \cdot \mu} \quad (2.3)$$

Для селенида кадмия:

$$\Delta E_{CdSe} = \frac{1,055 \cdot 10^{-34} \cdot \text{Дж} \cdot \text{с} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \cdot \text{Кл}}{1,183 \cdot 10^{-31} \cdot \text{кг} \cdot 600 \cdot \frac{\text{см}^2}{\text{В} \cdot \text{с}}} = 2,38 \cdot 10^{-21} \text{ Дж}$$

Для оксида цинка:

$$\Delta E_{ZnO} = \frac{1,055 \cdot 10^{-34} \cdot \text{Дж} \cdot \text{с} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \cdot \text{Кл}}{1,729 \cdot 10^{-31} \cdot \text{кг} \cdot 180 \cdot \frac{\text{см}^2}{\text{В} \cdot \text{с}}} = 5,42 \cdot 10^{-21} \text{ Дж}$$

Для оксида меди:

$$\Delta E_{CuO} = \frac{1,055 \cdot 10^{-34} \cdot \text{Дж} \cdot \text{с} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \cdot \text{Кл}}{3,64 \cdot 10^{-31} \cdot \text{кг} \cdot 280 \cdot \frac{\text{см}^2}{\text{В} \cdot \text{с}}} = 1,656 \cdot 10^{-21} \text{ Дж}$$

3 Анализ энергетического спектра носителей заряда в квантовой точке в цилиндрической симметрии

3.1 Расчет энергетического спектра и волновых функции квантовых точек с цилиндрической симметрией в рамках модели с бесконечно высокими стенками

Известно, что уравнение Шредингера для квантовой точки имеет вид [30]:

$$\left(-\frac{\hbar}{2 \cdot m^*} \cdot \nabla^2 + V(r)\right) \cdot \psi(r) = E \psi(r), \quad (3.1)$$

где m^* – эффективная масса носителя заряда в рассматриваемой зоне; $\hbar$ – приведенная Планка; $V(r)$ – статический потенциал, который пространственно ограничивает движение носителей заряда внутри квантовой точки; ψ – огибающая волновая функция, потенциал гидродинамической скорости носителей заряда одного знака; $E = \mathcal{E} - E_j(0)$, $E_j(0)$ – энергия в экстремуме j -й зоны, $\mathcal{E}$ – энергетический спектр носителей заряда.

Рассмотрим модель квантовой точки с цилиндрической симметрией. На рисунке 3.1 представлена система координат, используемые для вычисления огибающих волновых функции.

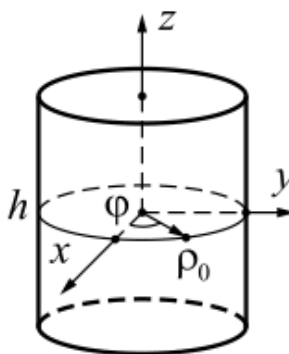


Рисунок 3.1 – Система координат для вычисления огибающих волновых функции квантовых точек с цилиндрической симметрией

Данная модель позволяет описывать нанокристаллы в форме призм с почти круглыми основаниями. Волновые функции и энергетический спектр электронов в данной модели могут быть найдены аналитически только при наличии

бесконечно высокого потенциального барьера для носителей заряда. С учетом этого потенциал $V(r)$ определяется выражением:

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r \in QD \\ \infty, & r \notin QD \end{cases}, \quad (3.2)$$

где область QD определяется выражением:

$$QD = \left\{ \begin{array}{l} 0 \leq \rho \leq \rho_0 \\ 0 \leq \varphi < 2\pi \\ -\frac{h}{2} \leq z \leq \frac{h}{2} \end{array} \right\} \quad (3.3)$$

где ρ_0 – радиус основания квантовой точки; h – высота квантовой точки.

Внутри квантовой точки в цилиндрических координатах уравнение (3.1) имеет вид:

$$-\frac{\hbar}{2 \cdot m^*} \cdot \left[\frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial}{\partial \rho} \cdot \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \cdot \psi(\rho, \varphi, z) = E \psi(\rho, \varphi, z) \quad (3.4)$$

В выражение (3.4) подставим произведение $R(\rho)\Phi(\varphi)Z(z)$ вместо $\psi(\rho, \varphi, z)$:

$$-\frac{\hbar}{2 \cdot m^*} \cdot \left[\frac{1}{\rho} \cdot \frac{d}{d\rho} \cdot \left(\rho \frac{d}{d\rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \cdot \frac{d^2}{d\varphi^2} + \frac{d^2}{dz^2} \right] \cdot R\Phi Z = ER\Phi Z \quad (3.5)$$

Введем замену:

$$k^2 = \frac{2 \cdot m^* \cdot E}{\hbar^2} \quad (3.6)$$

В выражение (3.5) подставим (3.6) и упростим:

$$\frac{1}{\rho} \cdot \frac{d}{d\rho} \cdot \left(\rho \frac{dR}{d\rho} \right) \Phi Z + \frac{1}{\rho^2} \cdot \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} R Z + \frac{d^2 Z}{dz^2} R \Phi = -k^2 R \Phi Z \quad (3.7)$$

Выражение (3.7) умножим на $1/(R\Phi Z)$ получим:

$$\frac{1}{R} \frac{1}{\rho} \cdot \frac{d}{d\rho} \cdot \left(\rho \frac{dR}{d\rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{1}{\Phi} \cdot \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} + \frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2} = -k^2 \quad (3.8)$$

Методом разделения переменных получим дифференциальные уравнения:

$$\frac{1}{R} \frac{1}{\rho} \cdot \frac{d}{d\rho} \cdot \left(\rho \frac{dR}{d\rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{1}{\Phi} \cdot \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} + k^2 = -\frac{1}{Z} \frac{d^2 Z}{dz^2} = \mu^2 \quad (3.9)$$

Первое дифференциальное уравнение:

$$\frac{d^2 Z}{dz^2} + \mu^2 Z = 0 \quad (3.10)$$

Из (3.9) получим следующее выражение:

$$\frac{1}{R} \frac{1}{\rho} \cdot \frac{d}{d\rho} \cdot \left(\rho \frac{dR}{d\rho} \right) + k^2 - \mu^2 = -\frac{1}{\rho^2} \frac{1}{\Phi} \cdot \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} \quad (3.11)$$

Умножим выражение (3.11) на $1/\rho^2$ получим:

$$\frac{1}{R} \cdot \rho \cdot \frac{d}{d\rho} \cdot \left(\rho \frac{dR}{d\rho} \right) + \rho^2 (k^2 - \mu^2) = -\frac{1}{\Phi} \cdot \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} = \lambda^2 \quad (3.12)$$

Второе дифференциальное уравнение:

$$\frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} + \lambda^2 \Phi = 0 \quad (3.13)$$

Из (3.13) получим следующее выражение:

$$\frac{1}{R} \cdot \rho \cdot \frac{d}{d\rho} \cdot \left(\rho \frac{dR}{d\rho} \right) + \rho^2 \cdot (k^2 - \mu^2) - \lambda^2 = 0 \quad (3.14)$$

Выражение (3.14) умножим на $1/\rho$, получим третье дифференциальное уравнение:

$$\frac{1}{R} \cdot \frac{d}{d\rho} \cdot \left(\rho \frac{dR}{d\rho} \right) + \rho \cdot (k^2 - \mu^2) - \frac{\lambda^2}{\rho} = 0 \quad (3.15)$$

Введем замену $\rho = u / \sqrt{k^2 - \mu^2}$ в уравнение (3.15), которое преобразовано к виду:

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{1}{u} \frac{dR}{d\rho} + \left(1 - \frac{\lambda^2}{u^2} \right) R = 0 \quad (3.16)$$

Ограниченным в нуле решением уравнения является цилиндрическая функция Бесселя $J_\lambda(u)$. Используя условия $R(\rho_0)=0$, условия нормировки

$$\int_0^{\rho_0} R^2 \rho \cdot d\rho = 1, \quad (3.17)$$

а также введя постоянную $\zeta^2 = \rho_0^2(k^2 - \mu^2)$ получим следующее уравнение:

$$R_{n\lambda}(\rho) = \frac{\sqrt{2}}{\rho_0} \frac{J_\lambda(\zeta_{n\lambda} \rho / \rho_0)}{J_{\lambda+1}(\zeta_{n\lambda})}, \quad (3.18)$$

где $\zeta_{n\lambda}$ – n -й корень уравнения $J_\lambda(\zeta_{n\lambda})=0$.

Из (3.10) получим уравнение:

$$Z(z) = B \exp(i \cdot \mu \cdot z) = B \cos(\mu \cdot z) + \bar{B} \sin(\mu \cdot z) \quad (3.19)$$

При условии, что $Z(z=-h/2)=0$ и $Z(z=h/2)=0$ получим следующие уравнения:

$$B \cos(-\frac{\mu \cdot h}{2}) + \bar{B} \sin(-\frac{\mu \cdot h}{2}) = 0 \quad (3.20)$$

$$B \cos(\frac{\mu \cdot h}{2}) + \bar{B} \sin(\frac{\mu \cdot h}{2}) = 0 \quad (3.21)$$

Из уравнения (3.20) выразим переменную B и подставим в (3.21):

$$\begin{aligned} B &= -\frac{\bar{B} \sin(-x)}{\cos(-x)}, \quad x = \frac{\mu \cdot h}{2} \\ -\frac{\bar{B} \sin(-x) \cdot \cos(x)}{\cos(-x)} + \bar{B} \sin(x) &= 0 \end{aligned} \quad (3.22)$$

Решим уравнение (3.22), где $\cos(-x) \neq 0$:

$$\begin{aligned} -\bar{B} \sin(-x) \cdot \cos(x) + \bar{B} \sin(x) \cdot \cos(-x) &= 0 \\ x = \frac{\pi \cdot n}{2} \Rightarrow \mu &= \frac{\pi \cdot n}{h} \end{aligned}$$

(3.23) Подставим (3.23) в (3.19) получим корень уравнения:

$$Z(z) = \sqrt{\frac{2}{h}} \begin{cases} \sin(\frac{\pi \cdot m \cdot z}{h}), & m - \text{четное} \\ \cos(\frac{\pi \cdot m \cdot z}{h}), & m - \text{нечетное} \end{cases} \quad (3.24)$$

Из (3.13) получим уравнение:

$$\begin{aligned}
\Phi(\varphi) &= A \exp(i l \varphi) \\
- A l^2 \exp(i l \varphi) + A \lambda^2 \exp(i l \varphi) &= 0 \\
A \exp(i l \varphi) (-l^2 + \lambda^2) &= 0 \\
l &= \pm \lambda
\end{aligned} \tag{3.25}$$

Используя условие нормировки и уравнения (3.25) получим корень уравнения:

$$\begin{aligned}
\int_0^{2\pi} |A \exp(i l \varphi)|^2 d\varphi &= 1 \\
|A|^2 \int_0^{2\pi} (\exp(i l \varphi) \cdot \exp(-i l \varphi)) \cdot d\varphi &= 1 \\
|A|^2 \varphi \Big|_0^{2\pi} &= 1 \\
A &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \\
\Phi(\varphi) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(i l \varphi)
\end{aligned} \tag{3.26}$$

Используя уравнение (3.18), (3.24) и (3.26) для волновой функции и энергетического спектра носителей заряда в цилиндрической квантовой точке примет вид:

$$\psi_{nlm}(\rho, \varphi, z) = \sqrt{\frac{2}{\pi \hbar \rho_0^2}} \frac{J_l(\zeta_{nl} \rho / \rho_0)}{J_{l+1}(\zeta_{nl})} \exp(i l \varphi) \begin{cases} \sin(\pi m z / h), & m - \text{четное}, \\ \cos(\pi m z / h), & m - \text{нечетное} \end{cases} \tag{3.27}$$

$$E_{nlm} = \frac{\hbar^2}{2 \cdot m^*} \left(\frac{\zeta_{nl}^2}{\rho_0^2} + \frac{\pi^2 \cdot m^2}{h^2} \right), \tag{3.28}$$

где $\lambda = l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, $\mu = \pi m / h$, $m = 1, 2, 3, \dots$

3.2 Расчет энергетического спектра и волновых функции квантовых точек с цилиндрической симметрией в рамках модели со стенками конечной высоты

Далее рассмотрим цилиндрическую квантовую точку с конечным барьером. Потенциальная энергия носителей заряда в данном случае определяется выражением:

$$V(\rho) = \begin{cases} 0, & \rho \leq \rho_0 \\ V_0, & \rho_0 \leq \rho \leq \rho_0 + L \\ \infty, & \rho > \rho_0 + L \end{cases} \quad (3.29)$$

На рисунке 3.2 представлена модель квантовой точки ядро-оболочка.

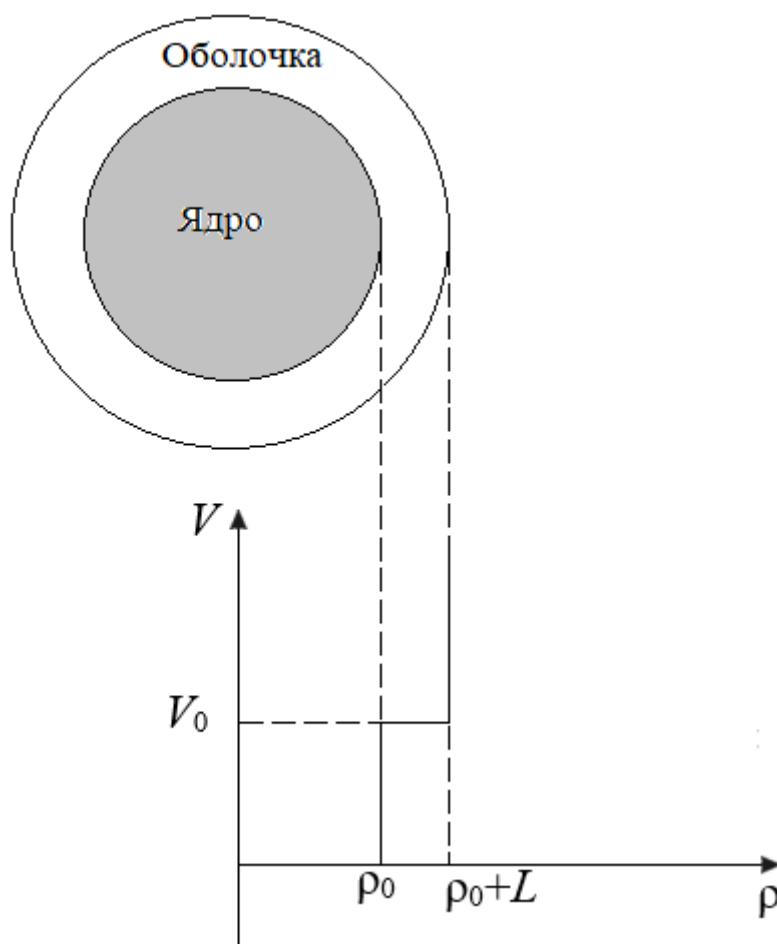


Рисунок 3.2 – Модель квантовой точки ядро-оболочка

Введем обозначение эффективных масс электронов внутри и вне квантовой точки соответственно m_d^* и m_m^* .

Уравнение Шредингера внутри квантовой точки примет вид:

$$\left(-\frac{\hbar}{2 \cdot m_d^*} \cdot \nabla^2 + V\right) \cdot \psi = E \psi \quad (3.30)$$

Уравнение Шредингера вне квантовой точки примет вид:

$$\left(-\frac{\hbar}{2 \cdot m_m^*} \cdot \nabla^2 + V\right) \cdot \psi = E \psi \quad (3.31)$$

Для разделение переменных в цилиндрических координатах введем замена $R(\rho)\Phi(\varphi)Z(z) = \psi(\rho, \varphi, z)$, используя формулу (3.15) запишем уравнение внутри квантовой точки:

$$\frac{d}{d\rho} \cdot \left(\rho \frac{dR}{d\rho}\right) + \left[\frac{-\lambda^2}{\rho} + \rho(k_d^2 - \mu^2)\right]R = 0, \quad (3.32)$$

уравнение вне квантовой точки:

$$\frac{d}{d\rho} \cdot \left(\rho \frac{dR}{d\rho}\right) + \left[\frac{-\lambda^2}{\rho} + \rho(k_m^2 - \mu^2)\right]R = 0, \quad (3.33)$$

где

$$k_d^2 = \frac{2 \cdot m_d^* \cdot E}{\hbar^2} \quad (3.34)$$

$$k_m^2 = \frac{2 \cdot m_m^* \cdot E}{\hbar^2}$$

Решением уравнений (3.32) и (3.33) является:

$$R(\rho) = \begin{cases} C_1^d \cdot J_\nu(\lambda\rho) + C_2^d \cdot J_{-\nu}(\lambda\rho), & 0 < \rho \leq \rho_0 \\ C_1^m \cdot J_\nu(\lambda\rho) + C_2^m \cdot J_{-\nu}(\lambda\rho), & \rho_0 \leq \rho \leq \rho_0 + L \\ 0 & \rho > \rho_0 \end{cases}, \quad (3.35)$$

где

$$J_\nu(\lambda\rho) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k (\lambda\rho)^{2k+\nu}}{2^k k! (1+\nu)(2+\nu)\dots(k+\nu)} \quad (3.36)$$

Исходя из условия нормировки получим:

$$\int_0^{\rho_0} (C_1^d \cdot J_\nu(\lambda\rho) + C_2^d \cdot J_{-\nu}(\lambda\rho))^2 \cdot \rho \cdot d\rho + \int_{\rho_0}^{\rho_0+L} (C_1^m \cdot J_\nu(\lambda\rho) + C_2^m \cdot J_{-\nu}(\lambda\rho))^2 \cdot \rho \cdot d\rho = 1 \quad (3.37)$$

Далее получим систему однородных уравнений:

$$\left(\frac{m_d^*}{m_m^*}\right)^\alpha (C_1^d \cdot J_\nu(\lambda R) + C_2^d \cdot J_{-\nu}(\lambda R)) = C_1^m \cdot J_\nu(\lambda R) + C_2^m \cdot J_{-\nu}(\lambda R),$$

$$\left(\frac{m_d^*}{m_m^*}\right)^{\alpha+1} (C_1^d \frac{dJ_\nu(\lambda \rho_0)}{d\rho_0} + C_2^d \frac{dJ_{-\nu}(\lambda \rho_0)}{d\rho_0}) \Big|_{\rho_0=R} = (C_1^m \frac{dJ_\nu(\lambda \rho_0)}{d\rho_0} + C_2^m \frac{dJ_{-\nu}(\lambda \rho_0)}{d\rho_0}) \Big|_{\rho_0=R}$$
(3.38)

где $\alpha=0$.

Функции $\Phi(\varphi)$ и $Z(z)$ имеют вид аналогичный выражением:

$$Z(z) = \sqrt{\frac{2}{h}} \begin{cases} \sin(\frac{\pi \cdot m \cdot z}{h}), & m - \text{четное} \\ \cos(\frac{\pi \cdot m \cdot z}{h}), & m - \text{нечетное} \end{cases} \quad (3.39)$$

$$\Phi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(il\varphi) \quad (3.40)$$

Волновая функция примет вид:

$$\psi(\rho, \varphi, z) = \begin{cases} C_1^d \cdot J_\nu(\lambda \rho_0) + C_2^d \cdot J_{-\nu}(\lambda \rho_0), & 0 < \rho \leq \rho_0 \\ C_1^m \cdot J_\nu(\lambda \rho_0) + C_2^m \cdot J_{-\nu}(\lambda \rho_0) & \rho_0 \leq \rho \leq \rho_0 + L \\ 0 & \rho > \rho_0 \end{cases} \quad (3.41)$$

$$\cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(il\varphi) \cdot \sqrt{\frac{2}{h}} \begin{cases} \sin(\frac{\pi \cdot m \cdot z}{h}), & m - \text{четное} \\ \cos(\frac{\pi \cdot m \cdot z}{h}), & m - \text{нечетное} \end{cases}$$

На рисунке 3.3 представлена модель квантовой точки ядро-оболочка сложной геометрии.

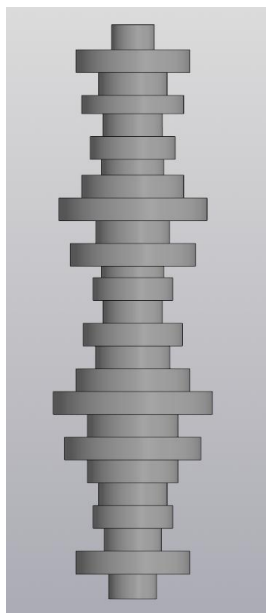
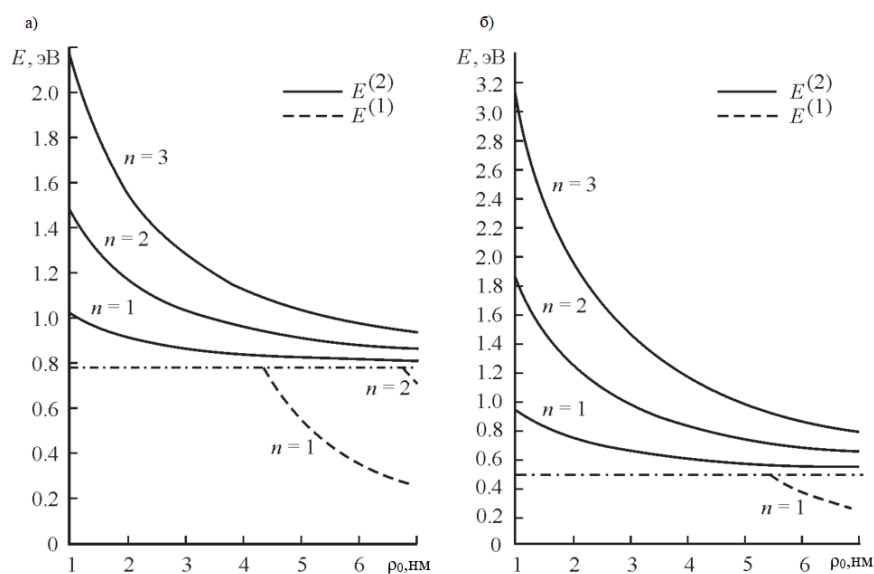


Рисунок 3.3 – Модель квантовой точки ядро-оболочка сложной геометрии

На рисунке 3.4 Энергетический спектр электронов в наноструктурах сложной геометрии.



а)CdSe; б)ZnO-CuO

Рисунок 3.4 – Энергетический спектр электронов в наноструктурах сложной геометрии

Таким образом, был проведен анализ энергетического спектра носителей заряда в квантовой точке с цилиндрической симметрией и неоднородной поверхностью.

4 Анализ воздействия освещенности на работу инженера-исследователя

Освещение в рабочем пространстве играет ключевую роль в работе инженера-исследователя. Правильно организованное освещение не только способствует комфортному восприятию информации и уменьшению усталости глаз, но и значительно повышает производительность труда.

Естественное освещение является предпочтительным в рабочем помещении, так как оно способствует более комфортным условиям для работы. Однако не всегда возможно обеспечить достаточный уровень естественного света, особенно в помещениях с ограниченным количеством окон. В таких случаях необходимо использовать искусственное освещение, которое должно быть рассчитано на равномерное освещение всего рабочего пространства

Недостаточное освещение или, наоборот, слишком яркий свет могут привести к ухудшению зрительного восприятия информации. Инженер-исследователь проводит много времени за чтением документации, анализом данных и работой с мелкими деталями. Поэтому важно, чтобы освещение было достаточно ярким, но при этом не создавало бликов на экранах мониторов и не вызывало дискомфорта для глаз.

Для обеспечения комфортных условий работы инженера-исследователя необходимо учитывать несколько аспектов:

- равномерное освещение рабочего места без теней и бликов;
- использование светильников с регулируемой яркостью для адаптации к различным задачам;
- предпочтение натуральному свету и расположение рабочего места так, чтобы избежать бликов на мониторе;
- регулярные перерывы и отдых глаз при работе за компьютером.

Освещенность играет важную роль в работе инженера-исследователя, влияя как на зрительное восприятие информации, так и на общую производительность труда. Создание оптимальных условий освещенности в рабочем помещении способствует улучшению концентрации, снижению утомляемости глаз и повышению эффективности работы. Поэтому следует уделить должное внимание

организации освещения, чтобы обеспечить комфортное и продуктивное трудовое окружение для инженера-исследователя.

Инженер, занимающийся нанотехнологиями, в основном работает с различным техническим и научным оборудованием, проводит исследования и контролирует параметры наноструктур.

Для оптимизации труда важно обеспечить правильное и равномерное освещение в помещении. Оформление помещения цветом — один из способов повысить производительность. Правильный выбор цветов создает необходимый световой фон при использовании правильных источников света. Рабочее место инженера-исследователя представляет собой научно-исследовательскую лабораторию с линолеумным полом, белым потолком и светло-зелеными стенами. Площадь комнаты для одного сотрудника, независимо от выполняемых задач, должна быть не менее 4,5 квадратных метров, с соблюдением требований по освещению (ГОСТ 12.1.004-83), температуре (ГОСТ 12.1.005-88), чистоте воздуха (ГОСТ 12.1.005-88), шумоизоляции (ГОСТ 12.1.003-83) и другим параметрам.

Инженер-исследователь проводит свое научное исследование на рабочем месте, которое представляет собой столы прямоугольной формы с размером 1500x700 мм, на котором располагается специальное оборудование.

В ходе исследования структур и электрофизических характеристик квантовых точек с цилиндрической симметрией используется специализированное рабочее место, оснащенное персональным компьютером, включающим в себя:

- системный блок;
- жидкокристаллический-монитор;
- клавиатура;
- компьютерная мышь.

При выполнении задач инженер-исследователь может столкнуться с различными вредными воздействиями, такими как:

- недостаточное освещение в рабочей зоне;
- повышенная или пониженная температура и влажность воздуха;
- повышенное содержание пыли в воздухе;

- высокий уровень шума;
- риск возгорания;
- интенсивное электромагнитное излучение;
- статическое электричество;
- воздействие электрического тока;
- перенапряжение глаз;
- умственное напряжение;
- негативное воздействие на психику.

В соответствии с требованиями ГОСТ 12.1.005-88 температура воздуха в помещении может колебаться от 30 до 31°C при относительной влажности 85% или быть на уровне 40°C при влажности 40%, при условии, что скорость ветра не превышает 0,2 м/с. Исследования в научно-исследовательской лаборатории показали оптимальные параметры микроклимата:

- температура воздуха от 18 до 25°C;
- влажность не более 60%;
- скорость ветра 0,1 м/с.

Уровень шума в рабочей зоне не превышает 60 дБА, составляя 45 дБА, что соответствует нормам ГОСТ 12.1.012-90.

На рабочем месте установлен монитор ASUS 23,8 дюймов с частотой обновления 75 Гц и разрешением 1920x1080, соответствующий стандарту ТСО-99, что гарантирует низкий уровень электромагнитного излучения, а также соблюдение режима труда и отдыха.

При выполнении исследовательской работы в помещении необходимо обеспечить безопасность от электричества, соответствующую стандартам ГОСТ 12.1.030.-81. С точки зрения возможного воздействия электрического тока на здоровье человека, помещение, где проводились исследования, считается безопасным и относится к категории помещений с низким уровнем опасности. Это объясняется отсутствием риска поражения током человека благодаря заземленным металлическим конструкциям, соединенным с корпусом электрооборудования, а также наличием ток непроводящего покрытия на полу и отсутствием проводящей пыли, которая могла бы стать проводником.

Питание оборудования осуществляется от сети переменного тока с напряжением 220 В и частотой 50 Гц, где нейтраль заземлена. Все устройства находятся в закрытых корпусах и относятся к приборам с напряжением до 1000 В согласно ПУЭ 1.1.13. Для исключения возможности поражения оператора электроустановки током при контакте с корпусом устройства через проводящие предметы, в оборудовании предусмотрена защитная заземленная система согласно ПУЭ 1.7.55.

Подключение персонального компьютера к сети переменного тока с напряжением 220 В осуществляется через термобезопасную вилку, третий вывод которой заземляется согласно ГОСТ 12.1.030-81.

Во время исследовательской деятельности, использовании персонального компьютера, проведении ремонтных и профилактических работ необходимо соблюдать следующие правила безопасности:

- работа на оборудовании без качественного заземления запрещена;
- работа на оборудовании без предварительного изучения правил его эксплуатации запрещена;
- запрещается производить ремонт оборудования или вскрытие его корпуса при включенном питании;
- запрещается оставлять включенное оборудование без присмотра;
- запрещается коммутировать выводы на оборудовании во включенном состоянии.

Неправильное обращение с оборудованием или игнорирование правил пожарной безопасности может привести к возникновению огня, что в свою очередь может нанести вред здоровью людей и привести к серьезным материальным потерям. Одной из потенциальных причин возгорания при проведении исследовательских работ в данной области является неисправность системного блока ПК или блока питания ЖК-монитора, а именно короткое замыкание контактов печатных плат из-за выхода из строя отдельных электронных компонентов из-за недостаточной системы охлаждения. Кроме того, следует выделить и другие факторы, способствующие возгоранию в помещении:

- неисправная или некачественная электропроводка сети в помещении;
- неправильная эксплуатация оборудования;
- нарушение правил пожарной безопасности;
- человеческий фактор: невнимательность, неаккуратность и т.д.

В целях предотвращения возникновения пожара предусмотрены согласно ГОСТ 12.1.004-91 следующие меры:

- электрощитки с автоматами для быстрого отключения электропитания;
- огнетушители ОХП-10 и ОХПВ-10;
- запасные выходы для быстрой эвакуации;
- помещения должны быть обеспечены пожарной сигнализацией;
- должен осуществляться контроль помещений в независимости от их назначения;
- проводится инструктаж по технике пожарной безопасности.

Для освещения помещения используют:

- естественное освещение создаваемым непосредственно солнцем и диффузным светом небесного излучения;
- искусственным, осуществляемым электрическими лампами накаливания и газоразрядными источниками света – люминесцентными лампами, ртутными лампами высокого давления, металлогалогенными лампами общего назначения, натриевыми, ксеноновыми и др.;
- совмещенным, обеспечивающим необходимый уровень освещенности одновременно за счет искусственного и естественного света.

При организации производственного освещения необходимо учитывать:

- равномерность распределения яркости на рабочей поверхности;
- цветовое оформление поверхностей;
- отсутствие резких теней;
- отсутствие слепящей или отраженной блескости;
- поддержание пульсации источников света в допустимых пределах;
- спектральный состав светового потока;
- безопасность, долговечность и удобство эксплуатации в том числе в аварийных ситуациях взрыва и пожара

Нормируемая минимальная освещенность рабочего места (E) определяется уравнением:

$$E = \frac{F \cdot m \cdot e \cdot p \cdot Y}{1000 \cdot K_3 \cdot h}, \quad (4.1)$$

где F – световой поток светильника, лм;

m – коэффициент, учитывающий отраженную составляющую света и действие удаленных светильников (1,05 – 1,2);

$e = e_1 + e_2 + \dots + e_i$ – условная освещенность, которая создавалась бы i -м светильником при установке в нем лампы 1000 лк;

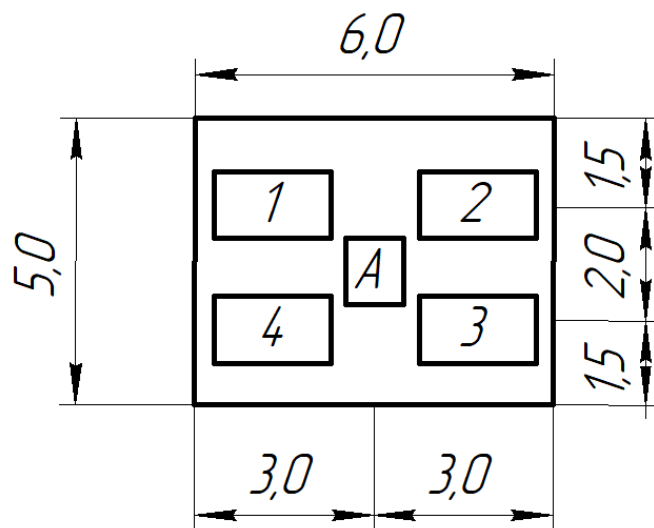
p – расстояние от плоскости, в которой расположена контрольная точка, до проекции светильника, м;

$Y = Y_1 + Y_2 + \dots + Y_i$ – коэффициент, учитывающий переход от горизонтальной плоскости к вертикальной;

K_3 – коэффициент запаса, учитывающий запыление светильников и износ источников света (1,5-2);

h – высота подвеса светильников над расчётной поверхностью, м.

Научно-исследовательская лаборатория представляет собой помещение длиной 15 м, шириной 5 м и высотой 3,5 м, установлено 4 светильника типа ОД с прямым косинусным светораспределением. В каждом из светильников установлено 2 люминесцентные лампы ЛБ-80 (световой поток 5200 лм). На рисунке 4.1 представлено расположение светильников в помещении.



A – контрольная точка; 1-4 светильники

Рисунок 4.1 – Расположение светильников в научно-исследовательской лаборатории

Так как в каждом из светильников установлены 2 люминесцентные лампы ЛБ-80, имеющие световой поток 5200 лм, то $F = 2 \cdot 5200 \text{ лм} = 10400 \text{ лм}$.

Для люминесцентных ламп коэффициент, учитывающий отраженную составляющую света и действие удаленных светильников $m = 1.1$.

Поскольку научно-исследовательская лаборатория относится к помещениям с малым выделением пыли, то коэффициент запаса светильников люминесцентных ламп $K_3 = 1,5$

Так как плоскость нормирования освещенности находится на высоте 0,8 м от пола, то высота подвеса светильников над рабочей поверхностью:

$$h = 3,5 \text{ м} - 0,8 \text{ м} = 2,7 \text{ м}$$

Условная освещенность, которая создавалась бы i -м светильником при установке в нем лампы 1000 лк может быть определена по уравнению:

$$e_i = \frac{I_\alpha \cdot \cos^3 \alpha_i}{h^2},$$

(4.2) где I_α – сила света по направлению к точке:

α_i – угол между нормалью к поверхности, которой принадлежит точка и лучом падающего света, определяемый выражением:

$$\alpha_i = \arctg\left(\frac{d_i}{h}\right), \quad (4.3)$$

где d_i – расстояние от контрольной точки A до проекции светильника.

$$d_1 = d_2 = d_3 = d_4 = \sqrt{1,5^2 + 1^2} = 1,8 \text{ м} \quad (4.4)$$

Подставим значения (4.4) в формулу (4.3) получим:

$$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = \alpha_4 = \arctg\left(\frac{1,8}{2,7}\right) = 34^\circ \quad (4.5)$$

Подставим значения в формулу (4.2) получим:

$$e_1 = e_2 = e_3 = e_4 = \frac{225 \cdot \kappa \partial \cdot \cos^3 34}{(2,7 \text{ м})^2} = 17,8 \text{ лк} \quad (4.6)$$

Исходя из условной освещенности, которая создавалась бы i -м светильником, определим:

$$e_1 = e_1 + e_2 + e_3 + e_4 = 71,2 \text{ лк} \quad (4.7)$$

Рассчитаем Y_i , по формуле:

$$Y_i = \cos \theta + \frac{d_i}{h} \sin \theta, \quad (4.8)$$

где θ – угол наклона вертикальной плоскости, равный 90° ;

Подставим значения в формулу (4.8) получим:

$$Y_1 = Y_2 = Y_3 = Y_4 = 2,68 \quad (4.9)$$

С учетом всего выше изложенного, рассчитаем освещенность рабочего места инженера исследователя по выражению (4.1):

$$E = \frac{10400 \cdot 1,1 \cdot 71,2 \cdot 1 \cdot 2,68}{1000 \cdot 1,5 \cdot 2,7} = 539 \text{ лк} \quad (4.10)$$

Таким образом результат расчёта освещенности рабочего места инженера-исследователя $E = 539 \text{ лк}$ удовлетворяют СНиП 23-05-95, следовательно, система освещения удовлетворяет требованиям безопасности труда и удобства работы.

Исходя из вышесказанного, можно заключить, что условия в помещении, где проводилось научное исследование о структурах и электрофизических свойствах квантовых точек с цилиндрической симметрией, соответствуют требованиям нормативных документов (ГОСТ 12.1.003-83 и СНиП 23-05-95) для

данного типа помещений. Помещение, в котором проводилось исследование, относится к категории помещений с низким уровнем опасности для человека, поскольку риск получения электрического удара оператором оборудования минимален. Энергопитание всех используемых приборов осуществляется от сети переменного тока с напряжением 220 В и частотой 50 Гц, с заземленной нейтралью.

Согласно ПУЭ 1.7.55 на оборудовании предусмотрено заземление, покрытие пола является токонепроводящим. Для избежания несчастных случаев перед началом работы проводится проверка приборов на исправность.

Чтобы не допустить нанесения вреда человеку и помещению от пожара в нем, согласно ГОСТ 12.1.004-91, предусмотрены меры противопожарной безопасности:

- рубильники прямого доступа для быстрого отключения установки от сети;
- огнетушители ОХП-10 и ОХПВ-10;
- оборудованы запасные выходы для быстрой эвакуации в случае пожара.

Перед началом работы с каждым участником исследования проводится инструктаж по технике безопасности.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате работы был проведен анализ перспективных методик синтеза квантовых точек ядро-оболочки цилиндрической симметрии и интерфейсных эффектов в наноструктурах сложной геометрии. Были исследованы нанопроволки из селенида кадмия, оксида цинка, оксида меди и наноккомпозиты на их основе.

Проведен анализ условия наблюдения квантово-размерных эффектов в наноструктурах сложной геометрии. Показано, что рассматриваемые в данной работе квантовые точки с цилиндрической симметрией проявляют свои квантово-размерные эффекты в таких нанобъектах как нанопроволки, нановискеры, нанотрубки. Установлено, что такие наноматериалы позволяют улучшить параметры и характеристики электронных приборов и добиться таких состояний структур, которые получить в объемных объектах не является возможным.

Проведен анализ энергетического спектра носителей заряда в квантовой точке с цилиндрической симметрией. Рассчитаны энергетические спектры и волновые функции квантовых точек с цилиндрической симметрией в рамках модели с бесконечно высокими стенками и со стенками конечной высоты. Показано, что неоднородная поверхность наноматериалов может как затруднять, так и облегчать наблюдение квантово размерных эффектов в квантовых точках с цилиндрической симметрией при температурах близких комнатных.

Рассчитано воздействие освещенности на работу инженера-исследователя.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Deng Z, Cao L, Tang F, Zou B. *J Phys Chem. A New Route to Zinc-Blende CdSe Nanocrystals: Mechanism and Synthesis* 2005; 109:16671.
2. Jiayin Yuan, Markus Drechsler, Youyong Xu, Mingfu Zhang, Axel H.E. Müller. *Cadmium selenide nanowires within core-shell cylindrical polymer brushes: Synthesis, characterization and the double-loading process.* *Polymer* – 2008.
3. Clay RT, Cohen RE. *Supramol Sci. Synthesis of metal nanoclusters within microphase-separated diblock copolymers: sodium carboxylate vs carboxylic acid functionalization* 1998; 5:41.
4. Zhang M, Breiner T, Mori H, Müller AHE. *Polymer. Amphiphilic cylindrical brushes with poly(acrylic acid) core and poly(n-butyl acrylate) shell and narrow length distribution* 2003; 44:1449.
5. Zhang M, Teissier P, Krekhova M, Cabuil V, Müller AHE. *Prog Colloid Polym Sci. Polychelates of amphiphilic cylindrical core-shell polymer brushes with iron cations* 2004; 126:35.
6. Johnson JC, Choi H-J, Knutsen KP, Schaller RD, Yang P, Saykally RJ. *Nat Mater. Single gallium nitride nanowire lasers* 2002; 1:106.
7. Lieber CM. *MRS Bull. Nanoscale Science and Technology: Building a Big Future from Small Things* 2003; 28:486.
8. Johnson JC, Choi H-J, Knutsen KP, Schaller RD, Yang P, Saykally RJ. *Nat Mater. Single gallium nitride nanowire lasers* 2002; 1:106.
9. M. R. Singh, G. Brasseem, S. Yastrebov, *Nanotechnology. Optical quantum yield in plasmonic nanowaveguide* 2021, 32, 135207.
10. M. R. Singh, G. Brasseem, S. Yastrebov, *Ann. Phys. Enhancement of Radiative and Nonradiative Emission in Random Lasing Plasmonic Nanofibers* 2021, 533, 2000558.
11. N.-Y. Kim, S.-H. Hong, J.-W. Kang, N. Myoung, S.-Y. Yim, S. Jung, K. Lee, C. W. Tu, S.-J. Park, *RSC Adv. Localized surface plasmon-enhanced green quantum dot light-emitting diodes using gold nanoparticles* 2015, 5, 19624.

- 12.K. L. Kelly, E. Coronado, L. L. Zhao, G. C. Schatz, *J. Phys. Chem. The Optical Properties of Metal Nanoparticles: The Influence of Size, Shape, and Dielectric Environment* 2003, 107, 668.
- 13.T. Thurn-Albrecht, J. Schotter, G. A. Kästle, N. Emley, T. Shibauchi, L. Krusin-Elbaum, K. Guarini, C. T. Black, M. T. Tuominen, T. P. Russell, *Science. Ultrahigh-Density Nanowire Arrays Grown in Self-Assembled Diblock Copolymer Templates* 2000, 290, 2126.
- 14.H. Naiki, S. Masuo, S. Machida, A. Itaya, *J. Phys. Chem. Single-Photon Emission Behavior of Isolated CdSe/ZnS Quantum Dots Interacting with the Localized Surface Plasmon Resonance of Silver Nanoparticles* 2011, 115, 23299.
- 15.Y. Wang, T. Yang, M. T. Tuominen, M. Achermann, *Phys. Rev. Lett. Radiative Rate Enhancements in Ensembles of Hybrid Metal-Semiconductor Nanostructures* 2009, 102, 163001.
16. E. Cohen-Hoshen, G. W. Bryant, I. Pinkas, J. Sperling, I. Bar-Joseph, *NanoLett. Exciton-Plasmon Interactions in Quantum Dot–Gold Nanoparticle Structures* 2012, 12, 4260.
- 17.E. V. Shevchenko, M. Ringler, A. Schwemer, D. V. Talapin, T. A. Klar, A. L. Rogach, J. Feldmann, A. P. Alivisatos, *J. Am. Chem. Soc. Self-Assembled Binary Superlattices of CdSe and Au Nanocrystals and Their Fluorescence Properties* 2008, 130, 3274.
- 18.Sajan Singh, Avinash Raulo, Ajeet Singh, Mona Mittal, Andriy Horechyy, René Hübner, Petr Formanek, Rajiv K. Srivastava, Sameer Sapra, Andreas Fery, and Bhanu Nandan *Enhanced Photoluminescence of Gold Nanoparticle-Quantum Dot Hybrids Confined in Hairy Polymer Nanofibers* – 2021.
- 19.P. Zhang, I. Protsenko, V. Sandoghdar, X.-W. Chen, *ACS Photonics. A Single-Emitter Gain Medium for Bright Coherent Radiation from a Plasmonic Nanoresonator* 2017, 4, 2738.
- 20.A. Horechyy, B. Nandan, N. E. Zafeiropoulos, P. Formanek, U. Oertel, N. C. Bigall, A. Eychmüller, M. Stamm, *Adv. Funct. Mater. A Step-Wise Approach for Dual Nanoparticle Patterning via Block Copolymer Self-Assembly* 2013, 23, 483.

21. S. Singh, A. Singh, M. Mittal, R. Srivastava, S. Sapra, B. Nandan, *Phys. Chem. Chem. Phys.* Fluorescence resonance energy transfer in multifunctional nanofibers designed via block copolymer self-assembly 2019, 21, 16137.
22. Y.-H. Chan, J. Chen, S. E. Wark, S. L. Skiles, D. H. Son, J. D. Batteas, *ACS Nano. Using Patterned Arrays of Metal Nanoparticles to Probe Plasmon Enhanced Luminescence of CdSe Quantum Dots* 2009, 3, 1735.
23. Y. Yang, W. Wang, J. Li, J. Mu, H. Rong, *J. Phys. Chem.* Manipulating the Solubility of Gold Nanoparticles Reversibly and Preparation of Water-Soluble Sphere Nanostructure through Micellar-like Solubilization 2006, 110, 16867.
24. M. Bugakov, N. Boiko, P. Samokhvalov, X. Zhu, M. Möller, V. Shibaev, *J. Mater. Chem.* Liquid crystalline block copolymers as adaptive agents for compatibility between CdSe/ZnS quantum dots and low-molecular-weight liquid crystals 2019, 7, 4326.
25. A. P. Ashwell, M. A. Ratner, G. C. Schatz, *In Advances in Quantum Chemistry*, Elsevier, 2017, pp. 117–145.
26. E. Oh, M.-Y. Hong, D. Lee, S.-H. Nam, H. C. Yoon, H.-S. Kim, *J. Am. Chem. Soc.* Inhibition Assay of Biomolecules based on Fluorescence Resonance Energy Transfer (FRET) between Quantum Dots and Gold Nanoparticles 2005, 127, 3270.
27. G. B. Piland, Z. Huang, M. Lee Tang, C. J. Bardeen, *J. Phys. Chem.* Dynamics of Energy Transfer from CdSe Nanocrystals to Triplet States of Anthracene Ligand Molecules 2016, 120, 5883.
28. M.-H. Jung, M. G. Kang, *J. Mater. Chem.* Enhanced photo-conversion efficiency of CdSe–ZnS core–shell quantum dots with Au nanoparticles on TiO₂ electrodes 2011, 21, 2694.
29. *Nanocrystal quantum dots* / editor Victor I. Klimov. – 2nd ed. p. cm. Rev. ed. of: *Semiconductor and metal nanocrystals* / edited by Victor I. Klimov. c2004.
30. Serpone, N.; Lawless, D.; Disdier, J.; Herrmann, J.-M. (1994) *Spectroscopic, Photoconductivity, and Photocatalytic Studies of TiO₂ Colloids: Naked and with the Lattice Doped with Cr³⁺, Fe³⁺, and V⁵⁺ Cations* *Langmuir* 10, 643.

31. Jaramillo, T.F.; Baeck, S.-H.; Kleiman-Shwarscstein, A.; Choi, K.-S.; Stucky, G.D.; McFarland, E.W. *Automated Electrochemical Synthesis and Photoelectrochemical Characterization of $Zn_{1-x}Co_xO$ Thin Films for Solar Hydrogen Production* (2005) *J. Comb. Chem.* 7, 264.
32. Liu, W.K.; Salley, G.M.; Gamelin, D.R. (2005) *J. Phys. Chem. B. Spectroscopy of Photovoltaic and Photoconductive Nanocrystalline Co^{2+} -Doped ZnO Electrodes* 109, 14486.
33. Osterloh, F.E. *Inorganic Materials as Catalysts for Photochemical Splitting of Water* *Chem. Mater.* 2008, 20, 35.
34. Beaulac, R.; Archer, P.I.; Ochsenbein, S.T.; Gamelin, D.R. *Mn^{2+} -Doped CdSe Quantum Dots: New Inorganic Materials for Spin-Electronics and Spin-Photonics* (2008) *Adv. Funct. Mater.* 18, 3873.
35. Yang, H.; Santra, S.; Holloway, P.H. *J. Nanosci. Syntheses and Applications of Mn-Doped II-VI Semiconductor Nanocrystals* *Nanotechnol.* 2005. 5, 1364.
36. Kanemitsu, Y.; Ishizumi, A. *J. Lumin. Luminescence properties of impurity-doped semiconductor nanoparticles* 2006, 119–120, 161.
37. Yang, H.; Holloway, P.H.; Ratna, B.B. *Photoluminescent and electroluminescent properties of Mn-doped ZnS nanocrystals* (2003) *J. Appl. Phys.* 93, 586.
38. Norris, D.J.; Efros, A.L.; Erwin, S.C. *Doped Nanocrystals* (2008) *Science* 319, 1776.
39. Сигаев А. П., Игошина С. Е., Карманов А. А. О возможности наблюдения квантово-размерных эффектов в тонких пленках широкозонных полупроводниковых металлооксидов // «Молодой ученый» Научный журнал № 21 (101) / 2015.
40. Федоров А. В., Рухленко И. Д., Баранов А. В., Кручинин С. Ю. *Оптические свойства полупроводниковых квантовых точек.* – СПб.: Наука, 2011. – 188 с.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

(обязательное)

Задание на выпускную квалификационную работу

«Утверждаю»
Заведующий кафедрой НиМЭ
Пронин И.А.
(фамилия, имя, отчество)
22 » мая 2022 г.

ЗАДАНИЕ

на выпускную квалификационную работу магистра

1. Студент гр. 22ПДм1 факультета информационных технологий и электроники
Направление подготовки 11.04.04. «Электроника и микроэлектроника»
Магистерская программа «Нано- и микроэлектроника»
Никитина Юлия Вячеславовна
(фамилия, инициалы)

2. Руководитель Карманов Андрей Андреевич
(фамилия, инициалы)

3. Тема выпускной работы Исследование квантово-размерных и интерфейсных эффектов в наноструктурах сложной геометрии

Тема утверждена приказом ПГУ № 1059/о от « 30 » ноября 2022 г.

4. Техническое задание на выпускную работу (разработать, исследовать (назначение объекта разработки, исследования), исходные данные, граничные условия разрабатываемого или исследуемого объекта, условия эксплуатации и т.д.)

Проанализировать перспективные методики синтеза квантовых точек ядро-оболочки с цилиндрической симметрии, представленных в журналах, индексированных в базах данных Web of Science и Scopus.

Провести анализ наноструктур сложной геометрии как объект наблюдения квантово-размерных эффектов

Рассчитать энергетический спектр носителей заряда в квантовой точке с цилиндрической симметрией.

Проанализировать воздействие освещенности на работу инженера-исследователя.

5. Объем и содержание основной части выпускной работы

5.1. Пояснительная записка (перечень вопросов, подлежащих разработке, обоснований, описаний, расчетов и т.д.)

1 Анализ перспективных методик синтеза квантовых точек ядро-оболочки цилиндрической симметрии

1.1 Синтез и характеристика нанонитей селенида кадмия со структурой ядро-оболочка, где в качестве оболочки используется цилиндрическая полимерная щетка

1.2 Исследование усиленной фотолюминесценции гибридов наночастиц золота и квантовых точек, заключенных в мохнатые полимерные нановолокна

1.3 Поперечное сечение фотоионизации и энергия связи одиночной примеси в полый цилиндрической квантовой точке ядро-оболочка

2 Наноструктуры сложной геометрии как объект наблюдения квантово-размерных эффектов

2.1 Анализ особенностей морфологии и параметров зонной структуры экспериментальных образцов наноструктур сложной геометрии на основе CuO-ZnO

2.2 Анализ условий наблюдений квантовых размерных эффектов в наноструктурах сложной геометрии	
3 Анализ энергетического спектра носителей заряда в квантовой точке в цилиндрической симметрии	
3.1 Расчет энергетического спектра и волновых функции квантовых точек с цилиндрической симметрией в рамках модели с бесконечно высокими стенками	
3.2 Расчет энергетического спектра и волновых функции квантовых точек с цилиндрической симметрией в рамках модели со стенками конечной высоты	
4 Анализ воздействия освещенности на работу инженера-исследователя	
5.2. Иллюстративная часть (перечень и название слайдов презентации)	
1. Титульный лист	Слайд 1
2. Цели и задачи работы	Слайд 2
3. Актуальность исследования	Слайд 3
4. Анализ особенностей морфологии и параметров зонной структуры экспериментальных образцов наноструктур сложной геометрии на основе CuO-ZnO	Слайд 4
5. Синтез нанонитей селенида кадмия со структурой «ядро-оболочка», где в качестве оболочки используется цилиндрическая полимерная щетка (<i>brush</i>)	Слайд 5
6. Анализ условий наблюдений квантовых размерных эффектов в квантовых точках «ядро-оболочка» сложной геометрии	Слайд 6-9
7. Энергетический спектр и волновые функции квантовых точек ядро-оболочка с цилиндрической симметрией	Слайд 10-13
8. Заключение	Слайд 14

6. Консультанты и содержание дополнительных разделов	
6.1.	
Консультант	

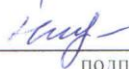
7. Календарный план по выполнению выпускной работы магистра

Наименование этапов работы	Объем работы	Срок выполнения	Подпись руководителя, консультанта
Анализ перспективных методик синтеза квантовых точек ядро-оболочки цилиндрической симметрии	20%	22.05	
Наноструктуры сложной геометрии как объект наблюдения квантово-размерных эффектов	20%	25.05	
Анализ энергетического спектра носителей заряда в квантовой точке в цилиндрической симметрии	30%	28.05	
Анализ воздействия освещенности на работу инженера-исследователя	20%	30.05	
Оформление пояснительной записки ВКР	5%	31.05	
Оформление графической части ВКР	5%	01.06	

Дата выдачи задания «22» мая 2024 г.

Руководитель выпускной работы  подпись

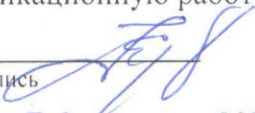
Карманов А.А.
фамилия, инициалы

Задание к исполнению принял  подпись

Никитина Ю.В.
фамилия, инициалы

« 22 » мая 2024 г.

Выпускную квалификационную работу к защите допустить

Декан факультета  подпись

Кревчик В.Д.
фамилия, инициалы

« 10 » 06 2024 г.

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

(обязательное)

Заявление для проверки ВКР на оригинальность

ПРИЛОЖЕНИЕ В
(обязательное)
Протокол проверки ВКР на оригинальность

Протокол

проверки на оригинальность в системе «Антиплагиат.ВУЗ» выпускной квалификационной работы на тему «Исследование квантово-размерных и интерфейсных эффектов в наноструктурах сложной геометрии»

студентки 2 курса Никитиной Юлии Вячеславовны

направления подготовки/специальности 11.04.04 Электроника и микроэлектроника,
магистерской программы «Нано- и микроэлектроника»

Руководитель ВКР Карманов А.А.

Отчет о проверке

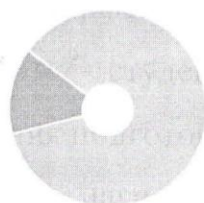
Автор: Никитина Юлия Вячеславовна

Название документа: Исследование квантово-размерных и интерфейсных эффектов в наноструктурах сложной геометрии

Проверяющий: Губиряцкий Александр Олегович

Организация: Пензенский Государственный университет

РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОВЕРКИ



Совпадения

85.9%

Самодублирование

14.1%

Цитирование

0%

Текстовое пересечение

0%

о

«Совпадения», «Цитирование», «Самодублирование», «Оригинальность» являются отдельными показателями, отображающими в процентах в форме дают 100%, что соответствует проверенному тексту документа.

- **Совпадения** — фрагменты проверенного текста, полностью или частично совпадающие с найденными источниками, за исключением фрагментов, которые относятся к цитированию или самодублированию. Показатель «Совпадения» — это доля фрагментов проверенного текста, отнесенных к совпадениям, в общем объеме текста.
- **Самодублирование** — фрагменты проверенного текста, совпадающие с фрагментами, расположенными в другом месте документа, авторскими правками, другими источниками проверенного документа. Показатель «Самодублирование» — это доля фрагментов текста, отнесенных к самодублированию, в общем объеме текста.
- **Цитирование** — фрагменты проверенного текста, которые являются цитатами из других источников, которые, помимо отсылки к источнику, цитируются полностью или частично. Показатель «Цитирование» — это доля фрагментов проверенного текста, отнесенных к цитированию, в общем объеме текста.
- **Текстовое пересечение** — фрагменты проверенного текста, совпадающие с фрагментами, расположенными в другом месте документа, авторскими правками, другими источниками проверенного документа. Показатель «Текстовое пересечение» — это доля фрагментов проверенного текста, отнесенных к текстовому пересечению, в общем объеме текста.
- **Оригинальный текст** — фрагменты проверенного текста, не обнаруженные ни в одном из источников, отнесенные к оригинальному тексту. Показатель «Оригинальность» — это доля фрагментов проверенного текста, отнесенных к оригинальному тексту, в общем объеме текста.

Обращаем внимание, что система находит текстовые совпадения проверенного документа с проиндексированными источниками. При этом система является вспомогательным инструментом, определяющим корректность и достоверность совпадений или цитирований, а также авторства текстовых фрагментов проверенного документа остается в компетенции проверяющего.

ИНФОРМАЦИЯ О ДОКУМЕНТЕ

Номер документа: 164

Тип документа: Магистерская диссертация

Дата проверки: 04.06.2024 11:33:11

Дата корректировки: 04.06.2024 11:37:24

Количество страниц: 59

Символов в тексте: 64855

Слов в тексте: 8033

Число предложений: 571

Руководитель ВКР

« 04 » 06 2024 год

Кар
подпись

Карманов А.А.
фамилия, инициалы

СПРАВКА

Пензенский государственный университет

о результатах проверки текстового документа
на наличие заимствований

ПРОВЕРКА ВЫПОЛНЕНА В СИСТЕМЕ АНТИПЛАГИАТ.ВУЗ

Автор работы: Никитина Юлия Вячеславовна
Самоцитирование
рассчитано для: Никитина Юлия Вячеславовна
Название работы: Исследование квантово-размерных и интерфейсных эффектов в наноструктурах сложной геометрии
Тип работы: Магистерская диссертация
Подразделение: Кафедра "Нано- и микроэлектроника"

РЕЗУЛЬТАТЫ

■ ОТЧЕТ О ПРОВЕРКЕ КОРРЕКТИРОВАЛСЯ: НИЖЕ ПРЕДСТАВЛЕНЫ РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОВЕРКИ ДО КОРРЕКТИРОВКИ

СОВПАДЕНИЯ		14.1%	СОВПАДЕНИЯ		14.1%
ОРИГИНАЛЬНОСТЬ		85.9%	ОРИГИНАЛЬНОСТЬ		85.9%
ЦИТИРОВАНИЯ		0%	ЦИТИРОВАНИЯ		0%
САМОЦИТИРОВАНИЯ		0%	САМОЦИТИРОВАНИЯ		0%

ДАТА ПОСЛЕДНЕЙ ПРОВЕРКИ: 04.06.2024

ДАТА И ВРЕМЯ КОРРЕКТИРОВКИ: 04.06.2024 11:37

Структура документа: Проверенные разделы: титульный лист с.1, содержание с.2, основная часть с.3-59
Модули поиска: Интернет Плюс*; Переводные заимствования*; Диссертации НББ; Цитирование; Перефразирования по Интернету (EN); Патенты СССР, РФ, СНГ; Коллекция НБУ; IEEE; Библиография; Перефразирования по коллекции IEEE; Шаблонные фразы; Перефразированные заимствования по коллекции Интернет в английском сегменте; СМИ России и СНГ; ИПС Адилет; Публикации РГБ; СПС ГАРАНТ: нормативно-правовая документация; Публикации eLIBRARY; Сводная коллекция ЭБС; Перефразированные заимствования по коллекции Интернет в русском сегменте; Медицина; СПС ГАРАНТ: аналитика; Перефразирования по Интернету; Перефразирования по СПС ГАРАНТ: аналитика; Переводные заимствования по коллекции Интернет в английском сегменте; Переводные заимствования IEEE; Переводные заимствования

Работу проверил: Головяшкин Алексей Николаевич

ФИО проверяющего

Дата подписи: 04.06.2024


Подпись проверяющего



Чтобы убедиться
в подлинности справки, используйте QR-код,
который содержит ссылку на отчет.

Ответ на вопрос, является ли обнаруженное заимствование
корректным, система оставляет на усмотрение проверяющего.
Предоставленная информация не подлежит использованию
в коммерческих целях.

Приложение Г
(обязательное)
Презентация к ВКР

Исследование квантово-размерных и интерфейсных эффектов в наноструктурах сложной геометрии

Выполнил студент группы 22ПДм1: Никитина Ю.В.

Научный руководитель ВКР: к.ф.-м.н., доцент каф. НнМЭ Карманов А.А.

Цели и задачи работы

Целью работы является исследование квантово-размерных и интерфейсных эффектов в наноструктурах сложной геометрии.

Для выполнения указанной цели необходимо выполнить следующие задачи:

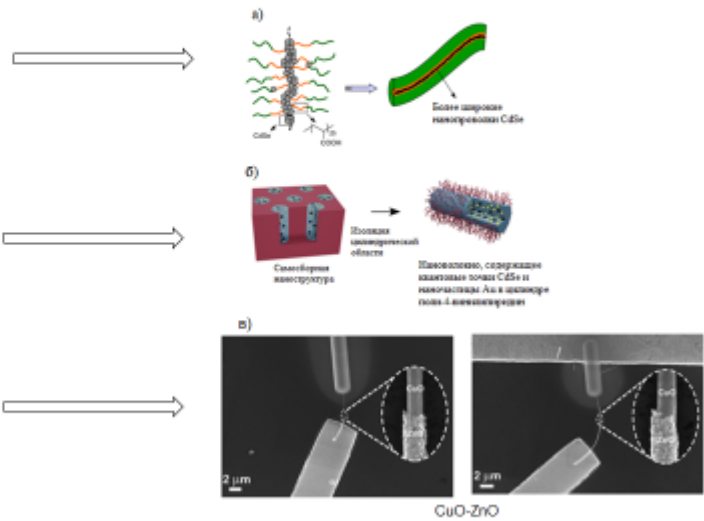
1. Проанализировать перспективные методики синтеза квантовых точек «ядро-оболочки» сложной геометрии.
2. Провести анализ особенностей морфологии и параметров зонной структуры экспериментальных образцов наноструктур сложной геометрии на основе CuO-ZnO.
3. Проанализировать условия наблюдений квантовых размерных эффектов в наноструктурах сложной геометрии, на примере CdSe и ZnO-CuO.
4. Рассчитать энергетические спектры и волновые функции электронов в квантовых точках с цилиндрической симметрией в рамках модели с бесконечно высокими стенками и со стенками конечной высоты.

Актуальность исследования

Современные исследования показывают, что все больше и больше работ посвящаются синтезу наноструктур сложной геометрии. В некоторых случаях оболочка может быть типа щетки (*brush*).

Значительный интерес также представляют нановолокна блок-сополимер, содержащие наночастицы Au и квантовые точки CdSe в ядре нановолокон

В последние годы наметился прогресс в создании квантовых точек ядро-оболочка с неоднородным интерфейсом.



3

Анализ особенностей морфологии и параметров зонной структуры экспериментальных образцов наноструктур сложной геометрии на основе CuO-ZnO

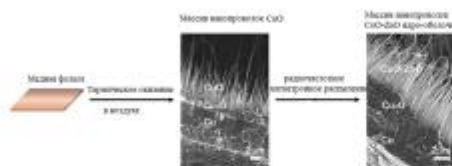


Рисунок 1 – Синтез нановолокон CuO-ZnO

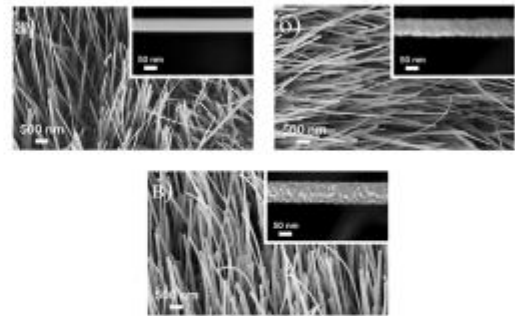


Рисунок 2 – Изображение полевого эмиссионного сканирующего электронного микроскопа (ПЭСЭМ)

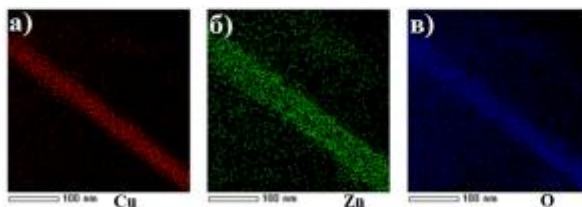
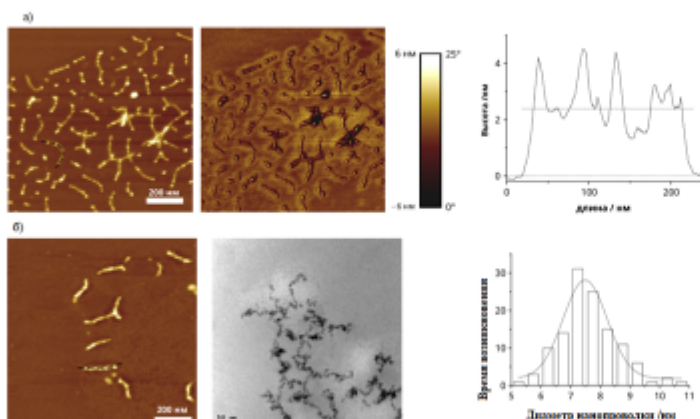


Рисунок 3 – Карты распределения элементов Cu, Zn, O

Синтез нанонитей селенида кадмия со структурой «ядро-оболочка», где в качестве оболочки используется цилиндрическая полимерная щетка (*brush*)



АСМ изображение (слева – высота; справа – фаза) и профиль высоты одной щетки, отмеченной черной пунктирной линией

АСМ и ПЭМ изображение гибрида «ядро-оболочка» цилиндрической полимерной щетки и нанопроволоки CdSe, а также гистограмма распределения их по размеру

Jinyu Yuan, Marius Drechler, Yongqiang Xu, Mingfei Zhang, Axel H.E. Müller.
Cadmium selenide nanowires within core-shell cylindrical polymer brushes: Synthesis, characterization and the double-loading process. *Polymer* – 2008.

5

Анализ условий наблюдений квантовых размерных эффектов в квантовых точках «ядро-оболочка» сложной геометрии

Для CdSe : $\lambda \approx \frac{h}{\sqrt{3 \cdot m_e^* \cdot k \cdot T}} = 17,3 \text{ нм}$

$\Delta E = \frac{\hbar \cdot e}{m_e^* \cdot \mu} = 0,015 \text{ эВ}$

Для ZnO: $\lambda \approx \frac{h}{\sqrt{3 \cdot m_e^* \cdot k \cdot T}} = 14,3 \text{ нм}$

$\Delta E = \frac{\hbar \cdot e}{m_e^* \cdot \mu} = 0,034 \text{ эВ}$

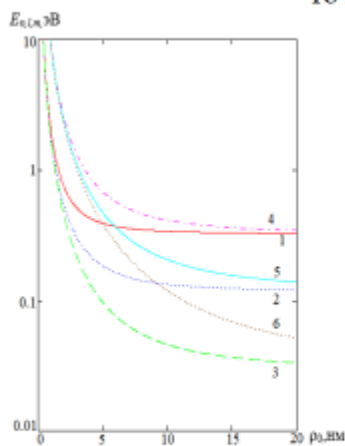
Для CuO: $\lambda \approx \frac{h}{\sqrt{3 \cdot m_e^* \cdot k \cdot T}} = 9,86 \text{ нм}$

$\Delta E = \frac{\hbar \cdot e}{m_e^* \cdot \mu} = 0,01 \text{ эВ}$

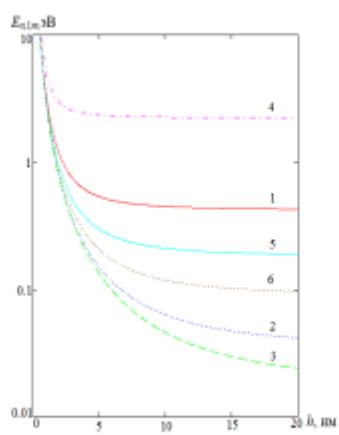
где $h=6,63 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$ – постоянная Планка,
 $\hbar=1,055 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$ – приведенная Планка,
 $m_e^*=0,13m_e$ – эффективная масса носителей заряда для CdSe, $m_e^*=0,19m_e$ – эффективная масса носителей заряда для ZnO, $m_e^*=0,4m_e$ – эффективная масса носителей заряда для CuO (где $m_e=9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг}$ – масса покоя электрона),
 μ – подвижность носителей заряда (для CdSe=600см²/В·с, для ZnO=180см²/В·с, для CuO=280см²/В·с),
 $k=1,38 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/К}$ – постоянная Больцмана,
 $e=1,6 \cdot 10^{-19} \text{ Кл}$ – заряд электрона,
 T – температура.

6

Анализ условий наблюдений квантовых размерных эффектов в квантовых точках «ядро-оболочка» сложной геометрии



1 – $n=1$, $h=3$ нм; 2 – $n=1$, $h=5$ нм;
3 – $n=1$, $h=10$ нм; 4 – $n=2$, $h=3$ нм;
5 – $n=2$, $h=5$ нм; 6 – $n=2$, $h=10$ нм
Рисунок 1 – Зависимость энергетического спектра от радиуса основания квантовой точки ρ_0 для селенида кадмия



1 – $n=1$, $\rho_0=2$ нм; 2 – $n=1$, $\rho_0=7$ нм;
3 – $n=1$, $\rho_0=10$ нм; 4 – $n=2$, $\rho_0=2$ нм;
5 – $n=2$, $\rho_0=7$ нм; 6 – $n=2$, $\rho_0=10$ нм
Рисунок 2 – Зависимость энергетического спектра от высоты основания квантовой точки h для селенида кадмия

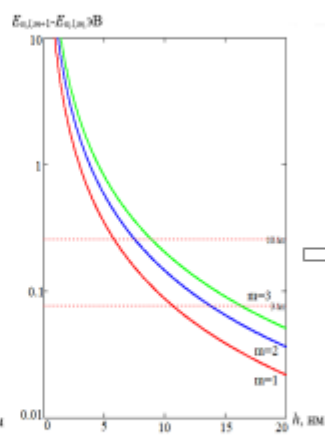
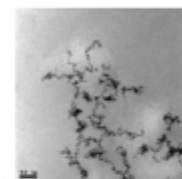
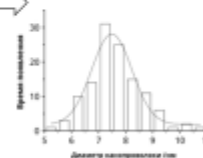


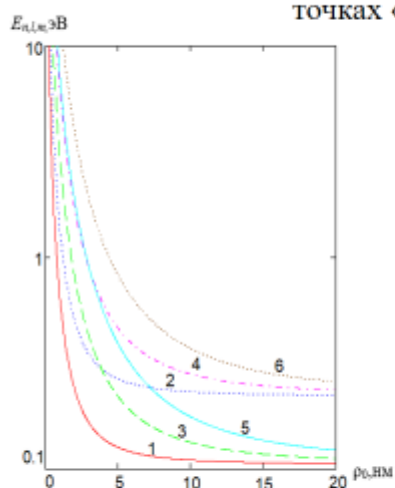
Рисунок 3 – Расстояние между соседними энергетическими уровнями как функция от h ($\rho_0=2$ нм, $l=0$, $n=1$) для селенида кадмия

Для CdSe

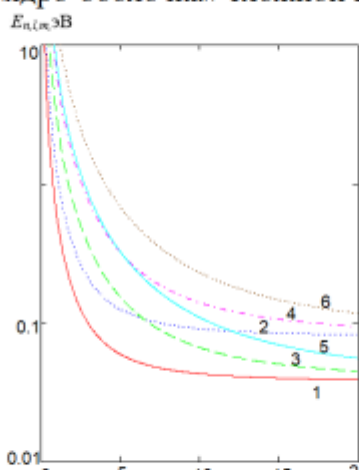


7

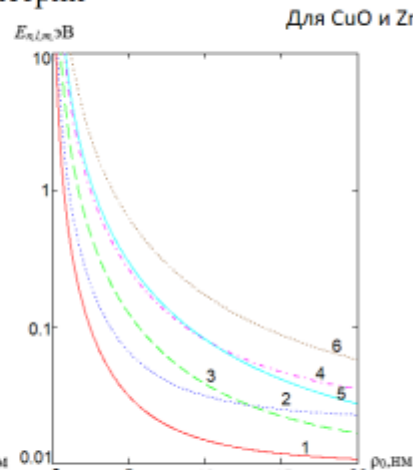
Анализ условий наблюдений квантовых размерных эффектов в квантовых точках «ядро-оболочка» сложной геометрии



1 – CuO $n=1$; 2 – ZnO $n=1$; 3 – CuO $n=2$;
4 – ZnO $n=2$; 5 – CuO $n=3$; 6 – ZnO $n=3$
Рисунок 1 – Зависимость энергетического спектра от радиуса основания квантовой точки ρ_0 оксида цинка и оксида меди при $h=3$ нм



1 – CuO $n=1$; 2 – ZnO $n=1$; 3 – CuO $n=2$;
4 – ZnO $n=2$; 5 – CuO $n=3$; 6 – ZnO $n=3$
Рисунок 2 – Зависимость энергетического спектра от радиуса основания квантовой точки ρ_0 оксида цинка и оксида меди при $h=5$ нм

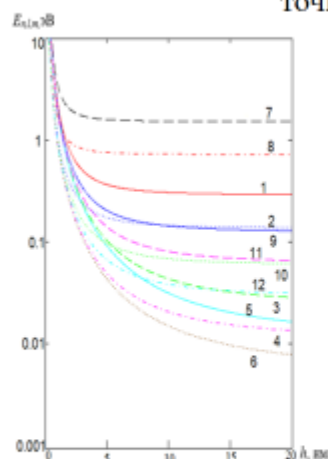


1 – CuO $n=1$; 2 – ZnO $n=1$; 3 – CuO $n=2$;
4 – ZnO $n=2$; 5 – CuO $n=3$; 6 – ZnO $n=3$
Рисунок 3 – Зависимость энергетического спектра от радиуса основания квантовой точки ρ_0 оксида цинка и оксида меди при $h=10$ нм

Для CuO и ZnO

8

Анализ условий наблюдений квантовых размерных эффектов в квантовых точках «ядро-оболочка» сложной геометрии



1 – ZnO $n=1$, $\rho_0=2$ нм; 2 – CuO $n=1$, $\rho_0=2$ нм; 3 – ZnO $n=1$, $\rho_0=7$ нм; 4 – CuO $n=1$, $\rho_0=7$ нм; 5 – ZnO $n=1$, $\rho_0=10$ нм; 6 – CuO $n=1$, $\rho_0=10$ нм; 7 – ZnO $n=2$, $\rho_0=2$ нм; 8 – CuO $n=2$, $\rho_0=2$ нм; 9 – ZnO $n=2$, $\rho_0=7$ нм; 10 – CuO $n=2$, $\rho_0=7$ нм; 11 – ZnO $n=2$, $\rho_0=10$ нм; 12 – CuO $n=2$, $\rho_0=10$ нм
Рисунок 1 – Зависимость энергетического спектра от высоты основания квантовой точки h для оксида цинка и оксида меди

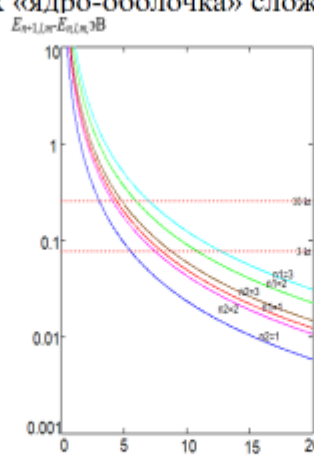


Рисунок 2 – Расстояние между соседними энергетическими уровнями как функция от ρ_0 ($n=0$ нм, $n=1$) для оксида цинка (n_1) и меди (n_2)

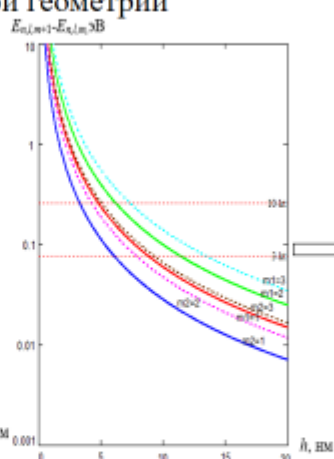
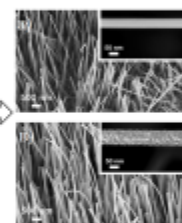


Рисунок 3 – Расстояние между соседними энергетическими уровнями как функция от h ($\rho_0=2$ нм, $n=0$, $n=1$) для оксида цинка (n_1) и оксида меди (n_2)

Для CuO и ZnO



Энергетический спектр и волновые функции квантовых точек «ядро-оболочка» с цилиндрической симметрией

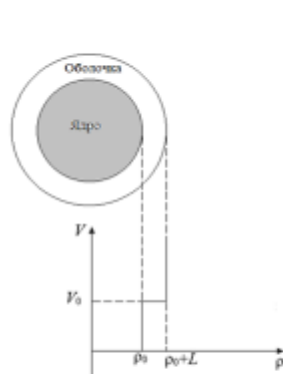


Рисунок 1 – Модель квантовой точки «ядро-оболочка» вид сверху

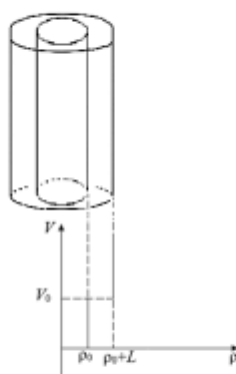


Рисунок 2 – Модель квантовой точки «ядро-оболочка» вид сбоку



Рисунок 3 – Модель квантовой точки «ядро-оболочка» сложной геометрии

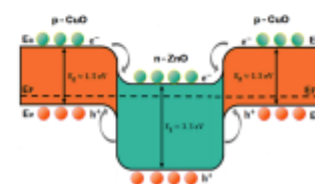


Рисунок 4 – Энергетическая зонная диаграмма

Энергетический спектр и волновые функции квантовых точек «ядро-оболочка» с цилиндрической симметрией

$$V(\rho) = \begin{cases} 0, & \rho \leq \rho_0 \\ V_0, & \rho_0 \leq \rho \leq \rho_0 + L \\ \infty, & \rho > \rho_0 + L \end{cases}$$

Внутри ядра квантовой точки:

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m_d^*} \cdot \left[\frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial}{\partial \rho} \cdot \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \cdot \psi_1(\rho, \varphi, z) = E \psi_1(\rho, \varphi, z)$$

Внутри оболочки квантовой точки:

$$-\frac{\hbar^2}{2 \cdot m_m^*} \cdot \left[\frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial}{\partial \rho} \cdot \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \cdot \psi_2(\rho, \varphi, z) = E \psi_2(\rho, \varphi, z)$$

где V_0 – высота потенциального барьера,
 ρ_0 – внутренний радиус цилиндра,
 $\rho_0 + L$ – внешний радиус цилиндра,
 ψ_1 – волновая функция внутри квантовой точки,
 ψ_2 – волновая функция вне квантовой точки,
 $\hbar$ – приведенная постоянная Планка,
 m_d^* – эффективных масс электронов внутри квантовой точки,
 m_m^* – эффективных масс электронов вне квантовой точки

11

Энергетический спектр и волновые функции квантовых точек «ядро-оболочка» с цилиндрической симметрией

$$\psi(\rho, \varphi, z) = \begin{cases} C_1^d \cdot J_\alpha(\lambda \rho_0) + C_2^d \cdot J_{-\alpha}(\lambda \rho_0), & 0 < \rho \leq \rho_0 \\ C_1^m \cdot J_\alpha(\lambda \rho_0) + C_2^m \cdot J_{-\alpha}(\lambda \rho_0), & \rho_0 \leq \rho \leq \rho_0 + L \\ 0, & \rho > \rho_0 + L \end{cases} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(i\varphi) \cdot \sqrt{\frac{2}{h}} \begin{cases} \sin\left(\frac{\pi \cdot m \cdot z}{h}\right), & m - \text{четное} \\ \cos\left(\frac{\pi \cdot m \cdot z}{h}\right), & m - \text{нечетное} \end{cases}$$

Волновая функция квантовых точек с цилиндрической симметрией

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_0^{\rho_0} (C_1^d \cdot J_\alpha(\lambda \rho_0) + C_2^d \cdot J_{-\alpha}(\lambda \rho_0))^2 \cdot \rho \cdot d\rho + \int_{\rho_0}^{\rho_0+L} (C_1^m \cdot J_\alpha(\lambda \rho_0) + C_2^m \cdot J_{-\alpha}(\lambda \rho_0))^2 \cdot \rho \cdot d\rho = 1 \quad \text{Условие нормировки волновой функции} \\ \left(\frac{m_d^*}{m_m^*} \right)^{\alpha} (C_1^d \cdot J_\alpha(\lambda \rho_0) + C_2^d \cdot J_{-\alpha}(\lambda \rho_0)) = C_1^m \cdot J_\alpha(\lambda \rho_0) + C_2^m \cdot J_{-\alpha}(\lambda \rho_0), \\ \left(\frac{m_d^*}{m_m^*} \right)^{\alpha+1/2} \left(C_1^d \frac{dJ_\alpha(\lambda \rho)}{d\rho} + C_2^d \frac{dJ_{-\alpha}(\lambda \rho)}{d\rho} \right) \Big|_{\rho=\rho_0} = \left(C_1^m \frac{dJ_\alpha(\lambda \rho)}{d\rho} + C_2^m \frac{dJ_{-\alpha}(\lambda \rho)}{d\rho} \right) \Big|_{\rho=\rho_0} \end{array} \right.$$

Энергетический спектр квантовых точек с цилиндрической симметрией

где L – толщина оболочки, J_α – цилиндрическая функция Бесселя, C_1 и C_2 – нормировочные коэффициенты, ρ – радиус вектора, ρ_0 – внутренний радиус цилиндра, $\rho_0 + L$ – внешний радиус цилиндра, m_d^* – эффективных масс электронов внутри квантовой точки, m_m^* – эффективных масс электронов вне квантовой точки, h – высота квантовой точки, $\lambda = l - 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, $\alpha = 0, m = 1, 2, 3, \dots$

12

Энергетический спектр и волновые функции квантовых точек «ядро-оболочка» с цилиндрической симметрией

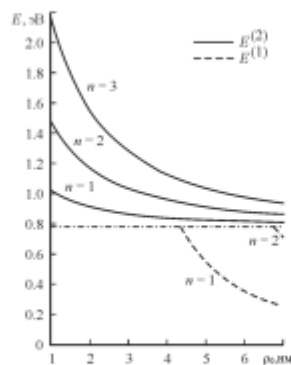


Рисунок 1 – Энергетический спектр электронов в наноструктурах сложной геометрии CdSe

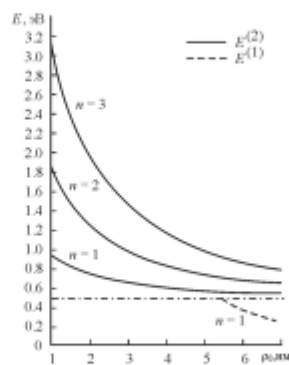


Рисунок 2 – Энергетический спектр электронов в наноструктурах сложной геометрии ZnO-CuO

13

Заключение

- В результате работы был проведен анализ перспективных методик синтеза квантовых точек ядро-оболочки цилиндрической симметрии и интерфейсных эффектов в наноструктурах сложной геометрии. Были исследованы нанопроволки из селенида кадмия, оксида цинка, оксида меди и нанокомпозиты на их основе.
- Проведен анализ условия наблюдения квантово-размерных эффектов в наноструктурах сложной геометрии. Показано, что рассматриваемые в данной работе квантовые точки с цилиндрической симметрией проявляют свои квантово-размерные эффекты в таких нанообъектах как нанопроволки, нановискеры, нанотрубки. Установлено, что такие наноматериалы позволяют улучшить параметры и характеристики электронных приборов и добиться таких состояний структур, которые получить в объемных объектах не является возможным.
- Проведен анализ энергетического спектра носителей заряда в квантовой точке с цилиндрической симметрией. Рассчитаны энергетические спектры и волновые функции квантовых точек с цилиндрической симметрией в рамках модели с бесконечно высокими стенками и со стенками конечной высоты. Показано, что неоднородная поверхность наноматериалов может как затруднять, так и облегчать наблюдение квантово размерных эффектов в квантовых точках с цилиндрической симметрией при температурах близких комнатных.

14