МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования

«ПЕНЗЕНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Факультет информационных технологий и электроники
наименование факультета

Кафедра Нано – и микроэлектроника
наименование кафедры

Направление подготовки 11.03.04. «Электроника и наноэлектроника»
код и наименование

Профиль Микроэлектроника и твердотельная электроника
наименование профиля

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

ПензГУ 02. 11.03.04. 014 ПЗ
обозначение, присваиваемое кафедрой

на тему

Моделирование электронной структуры нанокристаллов на основе селенида кадмия и сульфида цинка
тема бакалаврской работы

Студент группы 19ПД1 (номер группы) — подпись, дата 15.06.23 — Пронькин А.В. (фамилия, иниц.)

Руководитель доцент (должность) — подпись, дата 15.06.23 — Игошина С.Е. (фамилия, иниц.)

ПГУ
наименование организации

Нормоконтролер ст. преподаватель (должность) — подпись, дата 19.06.23 — Рыжова Т.Н. (фамилия, иниц.)

Работа допущена к защите в ГЭК (протокол заседания кафедры от 15.06.23 № 11)

Заведующий кафедрой — подпись, дата 19.06.23 — Пронин И.А. (фамилия, иниц.)

Работа защищена с оценкой хор. (протокол ГЭК от 26.06 № 7)

Секретарь ГЭК — подпись, дата 26.06.23 — Вольсков А.А. (фамилия, иниц.)

РЕФЕРАТ

Пояснительная записка состоит из 70 страниц, 24 рисунков, 1 таблицы, списка использованных источников из 12 наименований и 3-х приложений.

Ключевые слова: нанокристалл, квантовая точка, селенид кадмия, моделирование электронной структуры, энергетический спектр.

Цель: показать, что геометрические размеры оболочки будут влиять на плотность распределения вероятности собственного состояния сферической квантовой точки.

Задачи:

1. Рассмотреть модели квантовых точек на основе селенида кадмия/сульфида цинка.

2. Сравнить плотность распределения вероятности электронных состояний в квантовой точке CdSe/ZnS.

3. Сравнить энергетический спектр квантовых точек в зависимости от размера ядра и оболочки.

4. Сделать выводы по проделанной работе.

Актуальность данной темы обусловлена влиянием размера оболочки квантовой точки при одном и том же характерном размере ядра на квантовые состояния электронов в оболочке и, скорее всего, на электрофизические и оптические свойства, что наряду с материалом и размером КТ может рассматриваться как эффективный фактор управления, а также использованием наноструктурированных материалов для создания устройств нано- и микроэлектроники нового поколения с заранее заданными параметрами.

Объект исследования: Квантовые точки на основе селенида кадмия/сульфида цинка (CdSe/ZnS).

Предмет исследования: структурные, электрофизические и физико-химические свойства квантовых точек ядро/оболочка.

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	4
1 Общие сведения о квантовых точках	5
1.1 Особенности энергетического спектра частиц пониженной размерности	5
1.2 Модели квантовых точек ядро/оболочка	14
1.3 Технология получения квантовых точек ядро/оболочка	17
2 Квантование энергетического спектра носителей заряда в квантовых точках	28
2.1Модель прямоугольной потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками	28
2.2 Модель цилиндрической квантовой ямы	31
2.3 Модель сферической потенциальной ямы	33
3 Теоретическое изучение квантовых состояний и энергетического спектра квантовых точек на основе селенида кадмия/сульфида цинка	35
3.1 Моделирование волновых функций электрона в КТ в модели «жестких» стенок	35
3.2 Теоретическое сравнение электронных состояний квантовых точек в зависимости от геометрических размеров оболочки	42
3.3 Анализ и сравнение энергетических спектров квантовых точек в зависимости от геометрических размеров ядра и оболочки	47
4 Анализ влияния освещенности научно-исследовательской лаборатории на работу инженера-исследователя	54
Заключение	66
Список использованных источников	67
Приложение А. Техническое задание на ВКР	69
Приложение Б Заявление и протокол проверки ВКР на оригинальность в системе «Антиплагиат.ВУЗ»	73
Приложение В. Презентация ВКР	75

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность данной темы заключается в том, что все научно-исследовательские компании по всему миру стараются найти применение наноструктурированным материалам для создания устройств нано- и микроэлектроники нового поколения с заранее заданными параметрами, это облегчает процессы наладки и настройки оборудования, так как необходимые параметры задаются и регулируются во время производства.

Цель: показать, что геометрические размеры оболочки будут влиять на плотность распределения вероятности собственного состояния сферической квантовой точки.

Задачи:

1. Рассмотреть модели квантовых точек на основе селенида кадмия/сульфида цинка.
2. Сравнить плотность распределения вероятности электронных состояний в квантовой точке CdSe/ZnS.
3. Сравнить энергетический спектр квантовых точек в зависимости от размера ядра и оболочки
4. Сделать выводы по проделанной работе.

					ПГУ 2. 11.03.04. 014 ПЗ		
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата			
Разраб.		Пронькин			ВВЕДЕНИЕ	Лит.	Лист 4 / Листов 70
Провер.		Игошина					
Н. Контр.		Рыжова				гр. 19ПД1	
Утверд.							

1 Общие сведения о квантовых точках

1.1 Особенности энергетического спектра частиц пониженной размерности

Квантовые точки (КТ) – изолированные нанообъекты, их свойства значительно отличаются от свойств материала такого же состава. Квантовая точка это не реальный объект, а математическая модель. Это связано с невозможностью формирования полностью обособленных структур, малые частицы объединяются с окружающей средой, находясь в жидкой или твердой матрицах. Коллоидные квантовые точки (ККТ) – полупроводниковые кристаллы, которые вырастают в растворе, покрыты слоем стабилизатора, препятствующего дальнейшей агрегации. Квантовые точки – наноматериал с необычайными спектральными характеристиками, имеет почти сферическую форму (рисунок 1), согласно измерениям с помощью просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения (*HRTEM*) [1].

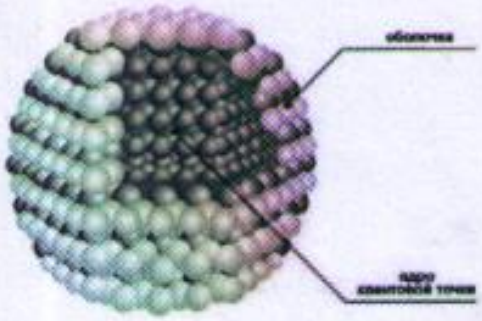


Рисунок 1 – Форма квантовой точки

Квантовые точки создал в 1981-м году Алексей Екимов в стеклянной матрице, а затем, в 1985-м году, Луи Е. Брус в коллоидных растворах. Термин «квантовая точка» предложил Марк Рид.

					ПГУ 2. 11.03.04. 014 ПЗ		
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата			
Разраб.		Пронькин			Общие сведения о квантовых точках	Лит.	Лист 5 / Листов 70
Провер.		Ивошина					
Н. Контр.		Рыкова		18.06		гр. 19ПД1	
Утверд.							

У квантовой точки дискретный энергетический спектр, длина промежутка между стационарными уровнями энергии носителя заряда зависит от размера квантовой точки. Благодаря чему электронные и оптические параметры КТ занимают положение между объёмным полупроводником и дискретной молекулой.

КТ находят применение в полевых транзисторах, различных фотоэлементах, лазерных диодах, *LED*. Можно сказать, что квантовая точка это полупроводник, у которого электрические свойства зависят от размера и формы. Если уменьшать размеры кристалла, то расстояние между энергетическими уровнями будет становиться больше. Если электрон спускается на один энергетический уровень ниже, испускается фотон; существует возможность регулировать размер КТ, следовательно, изменять энергию испускаемого фотона и цвет, испускаемый квантовой точкой. Одно из главных достоинств квантовых точек возможность контролировать её размеры, благодаря этому можно регулировать проводимость. Квантовые точки разных размеров могут быть собраны в многослойные нанопленки, представляющие собой фрагмент проводника или полупроводника (например, CdTe, CdS, CdSe, ZnSe, ZnS), носители заряда которого ограничены в пространстве по всем трем направлениям. Имея столь небольшие размеры, в них проявляются квантовые, дискретные, свойства электронов. Увеличение размеров частиц приводит к уменьшению ширины запрещенной зоны.

Быстрое и успешное развитие современной науки, в том числе и физики квантовых точек, происходит благодаря оптической спектроскопии. Данные, которые предоставляются в спектральных диапазонах: рентгеновского излучения, ультрафиолетового, видимого и инфракрасного, помогли созданию новых разделов физики твердого тела физике квантовых наноструктур.

Уникальные физические свойства полупроводниковых квантовых точек, обнаруженные и изученные преимущественно оптическими методами, стимулировали развитие технологии их изготовления. Благодаря нанотехнологии имеется возможность конструировать высококачественные низкоразмерные системы с необходимыми для работы параметрами.

Существует множество различных типов квантовых точек, но возможно выделить несколько основных, которые широко применяются в экспериментальных и прикладных исследованиях. Одним из наиболее распространенных типов являются нанокристаллы, которые могут быть выращены в жидкостях, стеклах и матрицах широкозонных диэлектриков (рисунок 2). Если квантовые точки выращиваются в жидкостях или стеклянных матрицах, они обычно имеют сферическую форму. Эффект трехмерного размерного квантования экситонов был впервые обнаружен при исследовании однофотонного поглощения в системе квантовых точек CuCl в силикатном стекле, которая представляла собой квантовые точки.

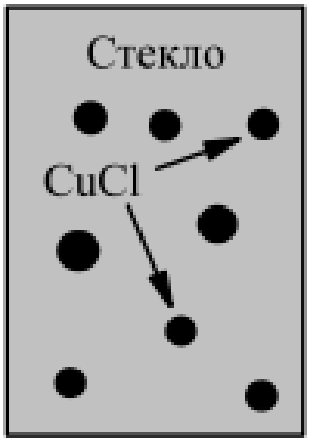


Рисунок 2 - Сферические квантовые точки в стеклянной матрице

Существует еще один важный тип квантовых точек - самоорганизованные квантовые точки. Методы Фольмера-Вебера и Странски-Крастанова используются для их производства через молекулярно-лучевую или газофазную эпитаксию. Особенностью таких квантовых точек является их образование под действием механических напряжений, возникающих в тонком слое полупроводника, нанесенного на поверхность материала с меньшей постоянной решетки. В результате рассогласования постоянных решеток и механических напряжений в слое возникают трехмерные потенциальные ямы, в которых локализуются носители заряда. Отличительной особенностью метода Странски – Крастанова является то, что квантовые точки, получаемые с его помощью,

связаны между собой посредством сверхтонкого смачивающего слоя, материал которого совпадает с материалом квантовых точек (рисунок 3).

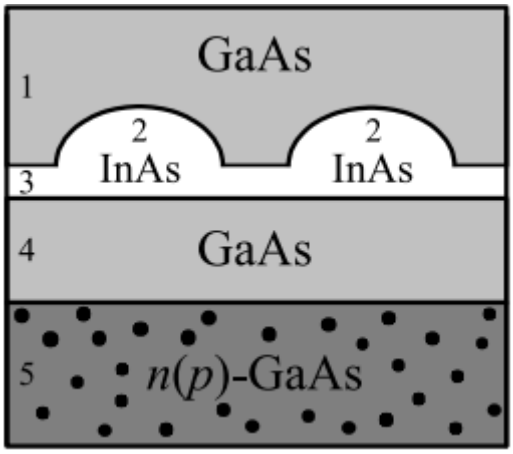


Рисунок 3 - Самоорганизованные квантовые точки, выращенные методом Странски – Крастанова

В настоящее время, особое внимание исследователей привлекают сложные квантовые структуры, так называемые системы квантовая точка-квантовая яма (*QDQW*). Первое достижение в системах *QDQW* было получено с использованием частиц CdS со встроенным слоем HgS в 1993 году[3].

Существует большой спрос на системы *QDQW*, которые обеспечивают многоцветное излучение света для покрытия более широкого спектра излучения в видимом диапазоне. Многоцветное излучение таких гетеронанокристаллов как *QDQW* (*hetero-NCS*) является натуральной системой цвета, что имеет важное значение для их использования в качестве люминофоров, излучающих белый свет, в системах твердотельного освещения. Такая многоцветная люминесценция позволяет генерировать белый свет с более высоким индексом цветопередачи, что является одним из важнейших требований, которые еще предстоит выполнить для будущего твердотельного освещения. Что касается уровня техники, генерация белого света с использованием моноцветных излучающих нанокристаллов достигается с использованием коллективной фотолюминесценции, которая создается комбинацией самых разных типов нанокристаллов. Гибридные устройства, основанные на одноцветных излучающих нанокристаллах, требуют тщательного проектирования параметров устройства для получения белого

света. Однако, с концептуальным прогрессом, многоцветные гетеронанокристаллы, способные излучать свет, предоставляют более удобный способ производства светодиодов, излучающих белый свет, благодаря простой гибридизации устройств, использующих единственный тип гетеронанокристаллов для обеспечения настраиваемого широкого излучения и генерации высококачественного белого света.

Некоторое время назад многоцветное излучение в видимом диапазоне было достигнуто в системах QDQW на основе CdSe-ZnS для генерации белого света [5]. В этих структурах ядро, изготовленное из CdSe, окружается барьерной оболочкой ZnS, а квантовая яма оболочки CdSe добавляется после этого барьера. Для определенных структур QDQW, излучение от ядра CdSe на более длинной длине волны и излучение оболочки CdSe на более короткой длине волны совместно способствуют генерации белого света. [6].

Суть генерации белого света в получении оптического излучения с непрерывным или дискретным спектром, ширина которого составляет не меньше одной октавы (т.е. частоты фурье-компонент в спектре излучения отличаются в два раза), с использованием импульсных лазеров пико- и фемтосекундной длительности.

На сегодняшний день условия многоцветного спонтанного излучения от одного типа гетеронанокристаллов до конца не изучены. Кроме того, эти многослойные гетеронанокристаллические системы (включая гетеронанокристаллы ZnS-оболочка/CdSe-ядро с многоцветным излучением) до настоящего времени теоретически не исследовались. До сих пор остаются без ответа фундаментальные вопросы для таких многоцветных систем *QDQW*-излучения: например, почему многоцветное излучение не может наблюдаться при определенных толщинах оболочек этих гетеронанокристаллов; каковы необходимые условия для многоцветного излучения от таких гетеронанокристаллов; как толщина их оболочек ZnS и CdSe влияет на качество изображения, как изменяются относительные два пика спектра излучения

относительно друг друга и локализованы ли электронные и дырочные волновые функции при *n*=1 и *n*=2 или делокализованы в этих гетеронанокристаллах.

Для изучения вопросов необходимо исследовать многоцветное спонтанное излучение гетеронанокристаллов типа квантовая точка – квантовая яма в материальной системе CdSe-ZnS. Для этой цели квантовомеханически анализируются многослойные гетеронанокристаллы, выполненные в общей форме луковицеобразных (CdSe) структур ZnS/CdSe/ZnS(ядро) оболочка/оболочка-оболочка. В данном исследовании рассматриваются электронные и оптические свойства многослойных гетеронанокристаллов в системе материалов CdSe-ZnS с использованием квантово-механического анализа. Особое внимание уделяется пространственной локализации экситонов в отдельных слоях (ядре и оболочке CdSe) и ее влиянию на многоцветную люминесценцию. Новой находкой является отличие локализации несущей от типа 1-подобной локализации до локализации, подобной типу 2, которое может быть достигнуто путем регулирования толщины оболочек CdSe и ZnS. Исследование позволяет объяснить экспериментальные измерения и может быть полезным в разработке материалов для генерации белого света. Следует учесть то, что 3-монослойный барьер для оболочки ZnS подходит для полного удержания носителей в обычных структурах оболочки (CdSe)ZnS (ядро), обнаруживаем, что носители в ядре CdSe и оболочке CdSe в многослойном гетеронанокристалле могут быть все еще связаны, несмотря на использование 3-монослойных оболочек ZnS в качестве барьера.

Квантовый размерный эффект – изменение кинетических и термодинамических свойств кристаллов, один из геометрических размеров становится практически соизмерим с длиной волны де Бройля электронов. Этот момент играет основную роль в оптоэлектронных свойствах квантовых точек. Электрон в нанокристалле ведет себя как в трехмерной потенциальной яме. Это связано с квантованием энергии носителей заряда. При переходе к наноразмерным частицам материала, сам размер наночастиц начинает влиять на конфигурацию электронно-дырочных пар. Получается, что в этом случае

энергетический спектр системы непосредственно определяется размером частицы. Благодаря этому можно регулировать ширину запрещенной зоны непосредственно варьированием размера частиц. Яркость свечения нанокристаллов оказывается столь высокой, что становится возможным детектировать их как единичные объекты с помощью флуоресцентного микроскопа.

Квантовые точки интересны тем, что обладают свойствами, позволяющими управлять характеристиками запрещенной зоны и люминесцентными параметрами: форма, размер, и состав наночастиц. Флуоресцентные диапазоны коллоидных квантовых точек различных материалов представлены на рисунке 4.

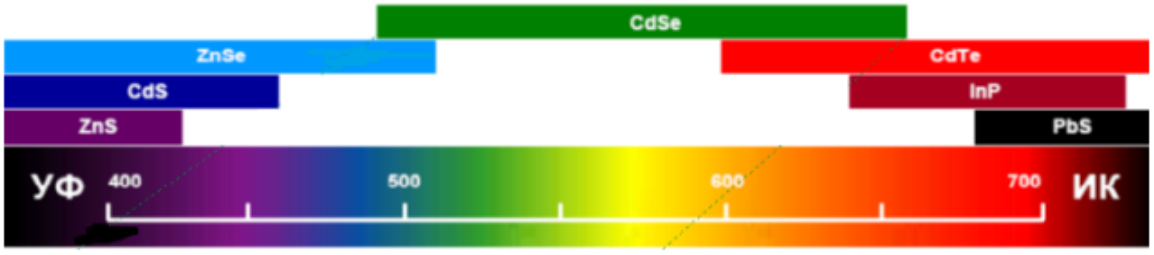


Рисунок 4 - Флуоресцентные диапазоны коллоидных квантовых точек различных материалов

Светоизлучающие наночастицы нашли применение в разнообразных технологиях благодаря зависимости их люминесценции от размера. Эта зависимость позволяет охватить обширную область электромагнитного спектра – от ближнего ультрафиолета до инфракрасного излучения. Наночастицы имеют потенциал для использования во многих областях, где требуются оптические свойства, изменяемые и перестраиваемые по длине волны. Например, в лазерах, солнечных батареях, фотоэлектрических преобразователях, светодиодах и осветительных панелях. Таким образом, светоизлучающие наночастицы представляют собой перспективный объект исследований и разработок в области оптики и электроники.

Такая многоцветная люминесценция позволяет генерировать белый свет с более высоким индексом цветопередачи, что является одним из критических требований, которые еще предстоит выполнить для будущего твердотельного освещения. Что касается современного уровня техники, генерация белого света с использованием моноцветных излучающих нанокристаллов достигается за счет использования коллективной фотолюминесценции, создаваемой комбинацией различных типов таких нанокристаллов, или люминесценции как комбинации этих нанокристаллов, так и интегрирующей светодиодной основы. Однако во всех этих реализациях устройств с использованием нанокристаллов с одноцветным излучением, параметры устройства (тип и концентрация, толщина и порядок слоев) должны быть тщательно спроектированы, чтобы получить белый свет.

Одним из наиболее часто применяемых оптических методов для исследования электронных и экситонных состояний размерного квантования в нанокристаллах является размерно-селективная фотолюминесценция или спектроскопия возбуждения фотолюминесценции.

На рисунке 5 можно увидеть зависимость энергии межзонных переходов от обратного квадрата радиуса квантовой точки

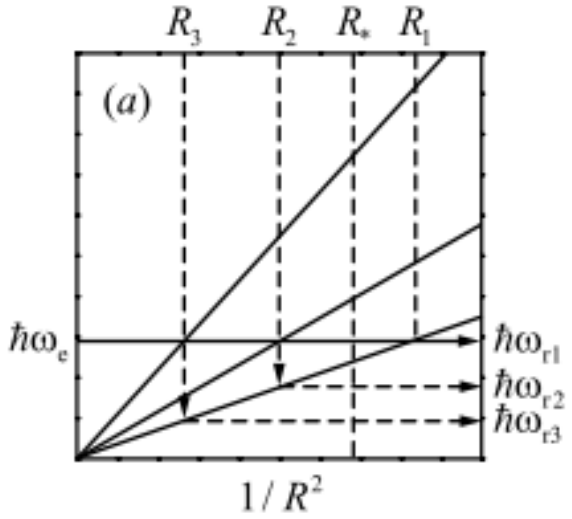


Рисунок 5 - Формирование сигнала квантовых точек

Вертикальная прямая на рисунке показывает систему межзонных переходов для нанокристалла с фиксированным радиусом $R*$. Горизонтальная

прямая на рисунке отображает набор этих квантовых точек разного размера из неоднородно уширенного ансамбля, благодаря энергии фотона $h\omega e$, в первое, второе и последующие состояния. Если квантовая точка возбуждается и попадает не в первое состояние, то после этого происходит быстрая релаксация, что приводит к тому, что нанокристалл находится в первом состоянии.

Таким образом, можно утверждать, что размерный эффект играет определяющую роль в оптических свойствах нанокристаллов. Размерная селективность возбуждения фотолюминесценции позволяет исследовать их электронную структуру и экситонную динамику. Эта информация может быть важна для практического применения нанокристаллов в различных областях науки и техники. После этого электроно-дырочные пары рекомбинируют с испусканием фотонов $h\omega ri$ (i = 1, 2, 3, ...), которые формируют спектр фотолюминесценции.

Одной из интересных особенностей квантовых точек является эффект размерного квантования, который проявляется в изменении энергетических спектров и волновых функций при уменьшении линейных размеров объекта. В результате появляются дискретные уровни размерного квантования, что делает квантовые точки уникальными и интересными объектами для исследования. Особенно интересен этот эффект для полупроводниковых квантовых точек простой формы, встроенных в диэлектрическую среду. Для подробного описания энергетического спектра и волновых функций низкоразмерных систем в научных работах часто используется метод эффективной массы, который был детально разработан для объемных твердых тел [4]. Этот подход основан на анализе массы и структуры системы, и часто дает возможность получать результаты, которые учитывают граничные условия и форму наноразмерных структурных элементов.

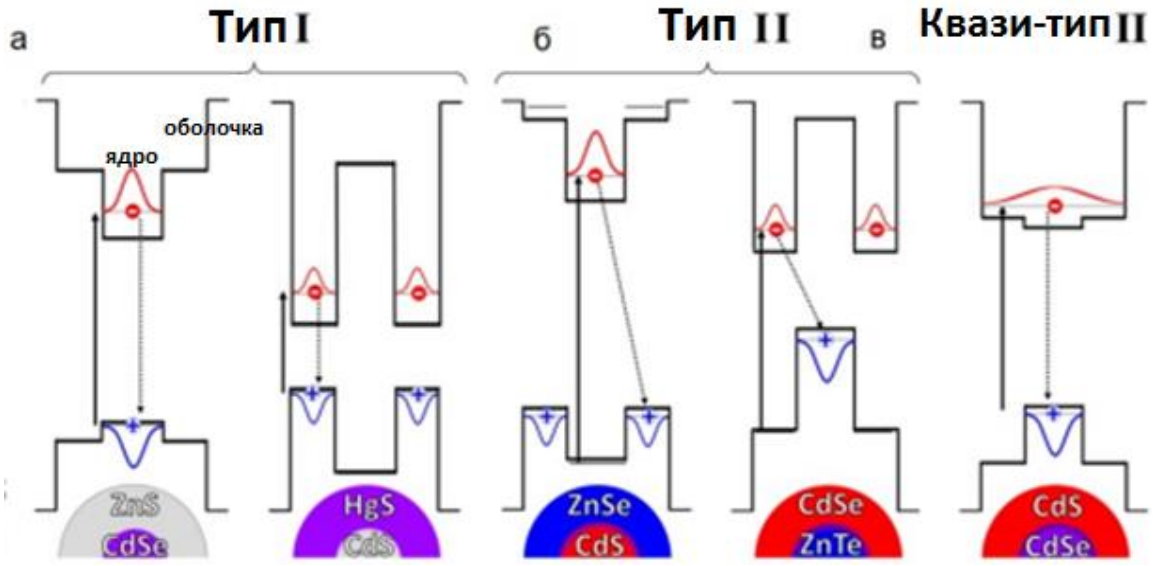
Основное свойство квантовых точек, высокая по сравнению с органическими флуорофорами фотостабильность. Они не выцветают в течение нескольких часов и даже дней, в то время фотообесцвечивание обычных люминофоров ограничено несколькими минутами.

Основным недостатком КТ является мерцание флуоресценции, временный переход в заряженное состояние. Длительность без этого эффекта для одиночной квантовой точки может достигать нескольких секунд.

Мерцание возможно уменьши за счет квантовых точек, но полностью избавиться от мерцания не получится.

1.2 Модели квантовых точек типа ядро/ оболочка

Различают три модели квантовых точек типа ядро/оболочка с разным типом локализации носителей заряда, определяемым положением уровней размерного квантования (рисунок 6). Первый и второй тип (рисунок 6а, 6б), характеризуются локализацией носителей заряда в одной части гетероструктуры или на разных сторонах гетерограницы. Квази-второй тип (рисунок 6 в) определяется делокализацией одного из носителей заряда по всему объему наночастицы и локализацей второго носителя заряда в области гетероперехода. Среди квантовых точек первого типа выделяют отдельный случай – инвертированные квантовые точки (Рисунок 6а), где возможна смена типа локализации носителей заряда в зависимости от толщины оболочки.



а) гетероструктурная квантовая точка первого типа и инвертированного первого типа, б) гетероструктурная квантовая точка второго типа,

в) гетероструктурная квантовая точка квази-второго типа

Рисунок 6 - Схематичное представление гетероструктурных квантовых точек

Волновая функция обозначена красным и синим цветом, процессы поглощения и испускания фотонов обозначены черными стрелками.

В распределении носителей заряда в наночастицах типа ядро-оболочка определяющую роль играют знак и величина рассогласования зон, а также размер наноструктуры. Это отличает их от объемных гетероструктур. В последних возможны гетеропереходы первого, второго, третьего и четвертого типа. Для синтеза наночастиц типа ядро-оболочка обычно используют материалы с похожими параметрами кристаллической решетки. Однако рассогласования параметров решетки ядра и оболочки неизбежно приводят к возникновению механических деформаций, которые распространяются на несколько периодов решетки.

Первый тип гетероструктур квантовых точек имеет оболочку с более широкой запрещенной зоной, чем ядро, с краями зон, симметричных друг другу. Следовательно, возбужденным электронам и дыркам легче находиться в материале с меньшей шириной запрещенной зоны, что приводит к тому, что спектры поглощения и фотолюминесценции квантовых точек первого типа зависят от размера и материала ядра. Полупроводниковая оболочка защищает ядро от различных воздействий окружающей среды, благодаря повышению устойчивости к окислению и фотостабильности. Одновременно с этим она пассивирует все оборванные связи на поверхности нанокристалла, при этом количество состояний в запрещенной зоне становится меньше, повышается интенсивность фотолюминесценции и квантовый выход. Изучению квантовых точек данного типа наибольшее внимание уделяется, в особенности CdSe/CdS и CdSe/ZnS. Спектр поглощения и фотолюминесценции квантовых точек 1 типа по сравнению с квантовыми точками такого же размера без оболочки сдвинут на 10-15 нм в красную область. Это связано с проникновением волновой функции электронов в неорганическую оболочку. Величина красного сдвига поглощения определяется различными факторами, такими как величина рассогласования зон материалов оболочки и ядра, то есть высота потенциального барьера, а также количество слоев оболочки.

Квантовые точки инвертированного первого типа, в которых ширина запрещенной зоны оболочки меньше, чем ширина запрещенной зоны ядра и края зон симметричны относительно друг друга, также вызывают большой интерес у исследователей. Самыми изученными квантовыми точками данного типа являются ZnSe/CdSe, CdS/CdSe и CdS/HgS. Рисунок 7 схематически демонстрирует смену типа пространственной локализации носителей заряда для квантовых точек ZnSe/CdSe и их спектры поглощения.

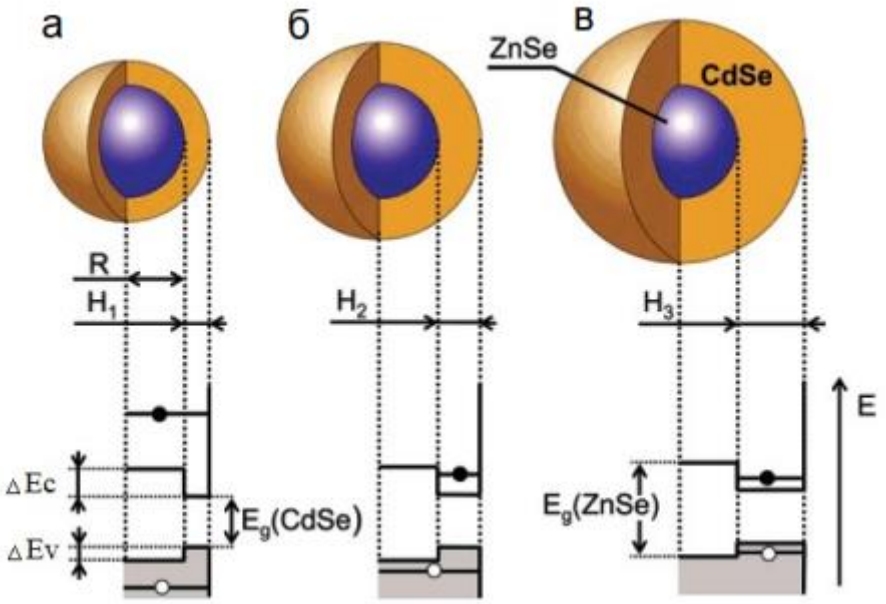


Рисунок 7 - Схематичное представление типа пространственной локализации носителей заряда с различной толщиной оболочки

Анализируя различные типы квантовых точек, мы можем выделить квази-второй тип, у которого ширина запрещенной зоны оболочки сравнима с шириной запрещенной зоны ядра. Однако, в отличие от второго типа, у квази-второго типа существенно сдвинуты края зоны проводимости относительно друг друга (рисунок 7 б), при этом края валентной зоны могут оставаться несдвинутыми или наоборот.

В квази-втором типе квантовых точек (рисунок 7 в) множество носителей заряда разделены между ядром и оболочкой, что приводит к малому интегралу перекрытия волновых функций электрона и дырки. Такое разделение носителей зарядов приводит к увеличению времени жизни фотовозбужденных носителей

заряда до нескольких десятков или даже сотен наносекунд, что, в свою очередь, снижает вероятность излучательной рекомбинации.

Наночастицы, которые являются квантовыми точками квази-второго типа, включают CdTe/CdSe, CdSe/CdTe, CdS/ZnSe, ZnTe/CdSe, ZnTe/ZnSe. Эти нанокристаллы имеют энергетический барьер для электронов на границе гетероструктур, который может быть порядка десятых электроновольт, но при малейшей деформации энергетический барьер может стать равным нулю, делокализуя тем самым носитель заряда по всему объему наночастицы. Примеры квантовых точек квази-второго типа включают CdSe/CdS и PbSe/CdSe. В зависимости от размера ядра и толщины оболочек, CdSe/CdS квантовые точки могут быть квантовыми точками I типа, так и квази-II типа. Если увеличивать толщину оболочки спектры поглощения и фотолюминесценции этих наночастиц сдвигаются в область низких энергий, что происходит в результате делокализации электрона.

1.3 Технология получения квантовых точек ядро/оболочка

Чтобы получить квантовые точки можно воспользоваться множеством химических и физико-химических способов синтеза, где отдельные атомы или ионы соединяются в кластеры или наночастицы. В основном используют три основных способа получения квантовых точек: мосгидридная газофазовая эпитаксия, метод электронно-лучевой эпитаксии, метод коллоидного синтеза [4]. Самые известные методы химические, такие как – жидкофазные, высокотемпературный синтез в органических растворителях, коллоидный синтез в водной среде, сольвотермальные методы синтеза. синтез в обратный мицеллах. Они позволяют получать растворы коллоидных наночастиц, что существенно упрощает их последующее применение.

Синтез монодисперсных полупроводниковых КТ общего состава CdE (где E один из материалов: S, Se, Te) построен на использовании пиролиза органометаллических реагентов, при котором их впрыскивают в горячий координирующий растворитель. Данный метод позволяет получить гомогенную и быструю "взрывную" нуклеацию, что приводит к появлению

большого количества однородных зародышей кристаллизации и контролируемому формированию макроскопических количеств нанокристаллов. После этого происходит медленный рост и высокотемпературный отжиг в растворителе, который контролирует рост кристалла и уменьшает количество дефектов на поверхности. Для повышения однородности размеров кристаллов используют метод размерно-селективного осаждения, который позволяет получать узкораспределенные кристаллы КТ.

Коллоидные частицы, находящиеся в растворе, могут вступать во взаимодействие с гранями кристалла, изменяя его форму и размер. Из этого следует, что рост кристалла зависит не только от условий окружающей среды, но и от свойств самого кристалла и его поверхности. Коллоидная теория также объясняет явление окисления металлов и коррозии, которые протекают за счет взаимодействия растворенных частиц с поверхностью материала. Важно отметить, что процесс Оствальда является неизбежным при синтезе коллоидных частиц, особенно при использовании растворов, содержащих множество частиц разных размеров и форм. Однако, существуют различные методы, которые могут помочь улучшить дисперсию размеров частиц и получить более однородный продукт, например, выбор оптимальных условий синтеза, добавление стабилизаторов, оптимизация процессов выделения и очистки продукта. Также, в последнее время активно развиваются методы синтеза наночастиц с помощью фемтосекундных лазеров, которые позволяют получать монодисперсные наночастицы без применения химических реакций. Для взрывной нуклеации необходимо создавать высокую степень пересыщения. Преимуществом данного метода является возможность контроля процесса роста квантовых точек, а так же возможность получать атомоподобные шарообразные структуры [6]. Так же метод коллоидной химии позволяет получать нанокристаллы с минимальными внутренними упругими напряжениями и наличием меньшего числа дефектов, обладает низкой стоимостью производства, имеет узкое распределение по размерам (на уровне 5-8 %) и возможность последующего выделения и очистки квантовых точек. К

недостаткам данного метода следует отнести то, что квантовые точки получаются разных размеров, что дает уширение в размерах и спектрах образцов, но в условиях современной химии возможно получение квантовых точек, отличающихся по размеру всего лишь на несколько процентов.

В настоящее время большое внимание уделяется физике низкоразмерных полупроводниковых структур. Этому способствовал быстрый прогресс в технологии изготовления в нанометровом масштабе. Среди них квантовые точки представляют особый интерес. В последние годы широко изучалось влияние квантового ограничения на электроны и дырки в полупроводниковых КТ. Наиболее поразительными свойствами полупроводниковых квантовых точек является значительное изменение оптических свойств в зависимости от размера квантовой точки. Например, ширина запрещенной зоны на компакт-дисках может быть настроена в диапазоне от 4,5 до 2,5 эВ, поскольку размер варьируется от молекулярного режима до макроскопического кристалла[7].

Теперь возможно изготавливать различные полупроводниковые квантовые точки, состоящие из полупроводниковых материалов II-VI, III-V и IV группы. Недавно создана замечательная нано-кристаллическая гетероструктура под названием квантовая точка *QDQW*, структура была синтезирована из двух различных полупроводниковых материалов. Недавно были подробно описаны методы мокрого химического синтеза, его характеристика и некоторые линейные и нелинейные оптические свойства *QDQW*. Было доказано, что линейное поглощение *QDQW* значительно отличается от линейного поглощения композитных материалов.

Целями синтеза квантовых точек нового типа являются получение многослойных структур, дающих квантовую яму с несколькими квантовыми точками, и использование материалов, отличных от CdS и HgS. Важно знать физические свойства этих сложных многослойных структур.

Ученые также разработали рекурсивный метод для вычисления электронной структуры *QDQW*. Они предполагали, что электрон находится в бесконечно глубокой потенциальной яме и энергию перехода 1*s*-1*s*, не

учитывающие кулоновское взаимодействие между электроном и дыркой. Они обнаружили тенденцию к увеличению амплитуды волновой функции в центре, когда к сердцевине добавляется материал оболочки с меньшей шириной запрещенной зоны, сохраняя при этом постоянный радиус.

Химические методы синтеза КТ более просты и доступны, а также позволяют получать наночастицы с более широким диапазоном размеров и форм. Наиболее распространенные из них – это методы редукции из соответствующих солей или комплексов металлов (например, с использованием натрийборогидрида или гидрида алюминия), а также методы гидротермального или золь-гель синтеза. Однако, химический метод синтеза КТ может оставлять на поверхности наночастиц остатки реагентов или связанных ионов, что может оказывать влияние на свойства и поведение наночастиц в растворах [8].

Высокотемпературный синтез в органических растворителях является одним из наиболее широко используемых методов получения наночастиц, также применяется коллоидный синтез в водной среде, синтез в обратный мицеллах. Из-за большого разнообразия методов синтеза наночастиц, выбор определенного метода зависит от требуемой размерности, свойств и стабильности наночастиц, а также от требований к конечным приложениям.

Высокотемпературный синтез в органических растворителях применяется для получения полупроводниковых КТ (в частности, сульфида кадмия CdS). Один из методов, основанный на пиролизе органометаллических реагентов, заключается в быстром внесении реагента в горячий координирующий растворитель, что обеспечивает гомогенную и нуклеацию быстрого появления большого числа однородных зародышей кристаллизации. Этот метод также позволяет контролировать образование макроскопических количеств нанокристаллов. После этого следует медленный высокотемпературный отжиг в координирующем растворителе, который приводит к формированию однородной кристаллической структуры ядра КТ и поверхности с небольшим количеством дефектов.

Ещё один способ получения квантовых точек синтез в водной среде. Данный метод синтеза квантовых точек не требует высоких температур и полученные наночастицы могут быть растворены в водных средах, что позволяет использовать их без дополнительной модификации. Квантовые точки, созданные в водной среде, имеют разнообразное распределение по размеру и низкий квантовый выход люминесценции, а также широкие полосы люминесценции дефектной природы. Хотя это является особенностью, а не недостатком, так как широкие спектры люминесценции могут быть полезными, например, для создания белых светодиодов. В целом, синтез полупроводниковых квантовых точек в водной среде может быть разделен на три стадии [7]. Во время первого этапа реакции образуются зародыши частиц, которые обычно имеют слабую или отсутствующую люминесценцию, а также широкое распределение по размерам и невыраженный спектр поглощения. Для получения требуемого размера частиц, зародыши выращиваются путем кипячения с обратным холодильником, микроволнового облучения или УФ-облучения, что приводит к улучшенным характеристикам частиц. При необходимости, на последней стадии возможна селекция по размеру и получение наборов КТ с узким распределением по размеру, стадии роста представлены на рисунке 8

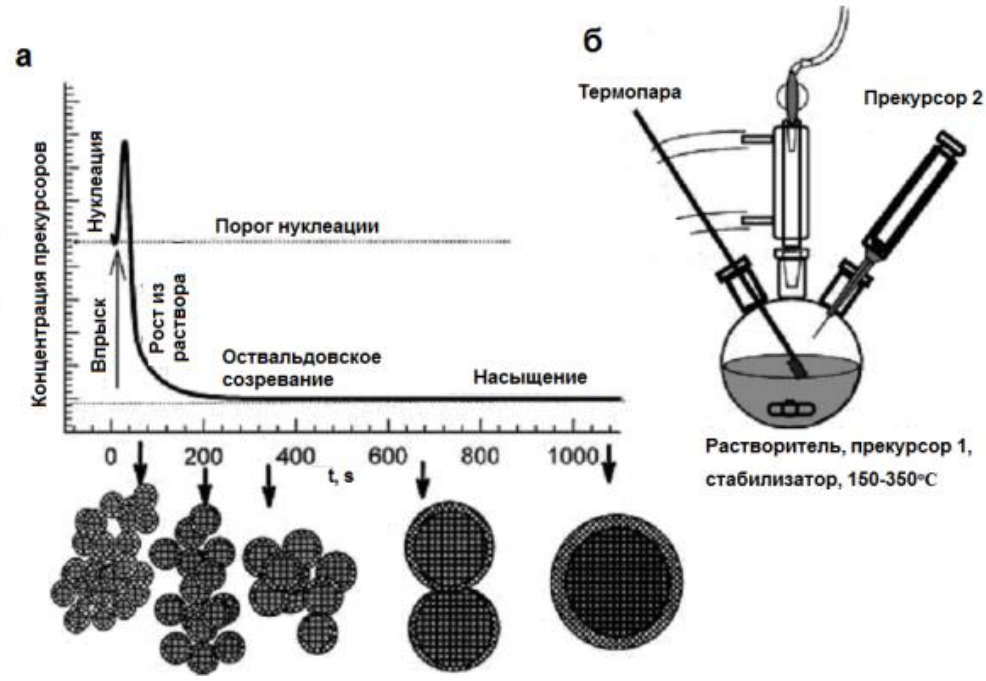


Рисунок 8 – Стадии роста наночастиц при высокотемпературном коллоидном синтезе

Для того чтобы улучшить монодисперсность полученных кристаллов, применяют специальное размерно-селективное осаждение. Этот метод дал возможность получить узкое распределение размеров кристаллов, с отклонением диаметра менее пяти процентов. При исследовании кристаллов были обнаружены узкие пики спектров поглощения и узкая, сильная зон-зонная люминесценция, что свидетельствует о высоком качестве частиц и малом количестве дефектов поверхности.

Также КТ получают благодаря методу синтеза в обратных мицеллах, мицеллы выступают в роли наноразмерных реакторов, в которых происходит смешение и взаимодействие реагентов. Техники мицеллярного синтеза позволяют управлять размером наночастиц, обеспечивают их узкое распределение по размерам. Обратные мицеллы это наноразмерные капли воды, стабилизированные в неполярной среде (масле, изооктане, бензоле и др.). Контроль параметров капель (состава и размера) обеспечивает контроль размера и формы получаемых нанокристаллов. Данным методом были получены заключенные в сферу оксида кремния КТ CdS:Mn/ZnS, для чего к КТ CdS: Mn/ZnS (полученным в обратных мицеллах) добавляли *TEOS*

(тетраэтилортосиликат) и подвергали щелочному гидролизу. Данные частицы показали высокую фотостабильность и квантовый выход люминесценции. Кроме того, синтез в обратных мицеллах был успешно использован для получения квантовых точек CdS, CdSe, PbS, ZnS, HgS [7].

При изготовлении структур с CdSe-точками, слой точек обычно покрывают тонким защитным слоем кремния для устранения процессов окисления точек. Ясно, что наличие такого слоя приводит к дополнительному каналу диффузии атомов кремния в точки и тем самым модифицирует напряжения в них. Отсюда следует важность изучения влияния параметров нанесения защитного слоя на состав и напряжения в одиночном слое CdSe - точек. Первые эксперименты с использованием дифракции рентгеновских лучей и фотолюминесцентной техники показали наличие такого влияния и необходимость дальнейших исследований одиночных слоев CdSe - точек с достаточно большим (до 70 %) содержанием кремния. Как отмечено выше, спектроскопия комбинационного рассеяния открывает уникальные возможности для получения информации о химическом составе и напряжениях в CdSe - точках, однако регистрация спектров комбинационного рассеяния одиночных слоев CdSe точек с высоким содержанием кремния представляет собой непростую задачу. Во-первых, сигналы рассеяния от одного слоя точек существенно слабее, чем для многослойных структур, поскольку в процессе рассеяния участвует малое число точек.

В виде оболочки неорганического ядра квантовых точек может быть полупроводник другого типа. Создание наночастиц типа ядро/оболочка позволяет не только уменьшить вклад поверхностных состояний в синтезируемых нанокристаллах, но и изменять оптические свойства квантовых точек. В отличие от оболочки из органического стабилизатора, полупроводниковый пассивирующий слой вносит вклад в электронно-дырочные состояния квантовых точек. Основное различие между использованием в качестве оболочек полупроводников с различной шириной

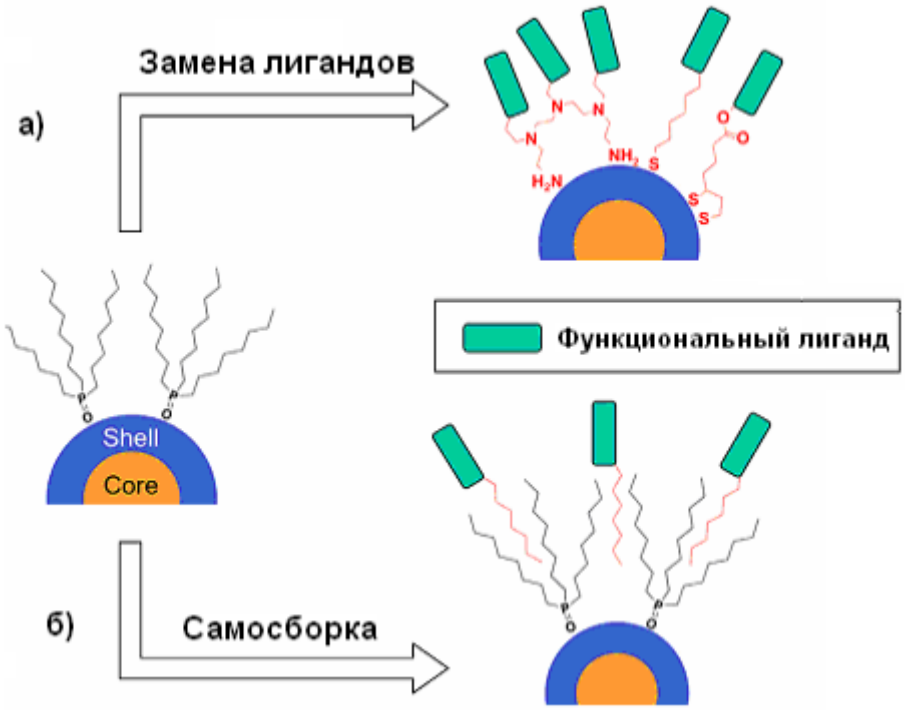
запрещенной зоны заключается в изменении положения валентной зоны и зоны проводимости.

Тонкие пленки CdSe получают методами вакуумного испарения, ионного распыления, пульверизации с последующим пиролизом, анодирования, электролитического осаждения и осаждения из раствора. Структурные и электрические свойства пленок зависят от метода получения и параметров процесса осаждения.

Первоначально полупроводниковые кристаллы были разработаны для проведения теоретических исследований квантовых эффектов. Тем не менее, благодаря новым методам получения кристаллов с высоким качеством, таким как узкое распределение по размерам (около 5%) и хорошей люминесценции путем излучения (>1%), нашли применение во многих областях науки и техники.

Модификация поверхности наночастиц путем использования различных органических лигандов привела к созданию нового класса соединений - гибридных наносистем (ГНС). ГНС состоят из коллоидных квантовых точек и органических лигандов. Коллоидные квантовые точки представляют собой гибридные структуры, так как имеют оболочку из органического лиганда стабилизатора. Однако, в контексте гибридных систем, говорят о функциональных лигандах, способных реагировать на внешнее воздействие. Введение функциональных лигандов в оболочку КТ может приводить к появлению переноса электрона или энергии между компонентами системы. ГНС нашли применение в качестве сенсоров и биомаркеров, так как могут отслеживать изменения в окружающей среде и предоставлять информацию о наличии определенных биологических молекул. В целом, модификация поверхности наночастиц различными органическими лигандами представляет собой перспективный подход к созданию новых материалов с уникальными свойствами и потенциалом для использования в различных областях науки и технологии. [8].

В большинстве случаев полупроводниковые нанокристаллы получают в неполярных или амфифильных растворителях, а стабилизирующая оболочка наночастиц состоит, как правило, из триоктилфосфиноксида (TOPO), алкиламинов, алкантиолов и жирных карбоновых кислот. Существует два основных способа последующей функционализации квантовых точек (рисунок 9) этот метод обмена лигандов оболочки КТ (замены оболочки - монослоя стабилизатора на поверхности, «*capexchange*») и метод самосборки вторичного покрывающего слоя, инкапсуляция КТ.



а) функционализации квантовых точек методом обмена, б) функционализации квантовых точек метод самосборки вторичного покрывающего слоя (инкапсуляции КТ)

Рисунок 9 – Способы функционализации квантовых точек

Создание современных оптоволоконных телекоммуникаций привело к потребности в эффективных полупроводниковых лазерах и оптических усилителях, работающих в спектральном диапазоне минимальных потерь в сигнальных волноводах (1.25–1.65 мкм). Квантовые ямы InGaAs/GaAs, используемые для создания лазеров, генерирующих свет в диапазоне длин волн от 1230 нм до 1260 нм, имеют ограниченные возможности в функционировании

при высоких токах порога, низкой температуре и неидеальной температурной стабильности, что не соответствует требованиям высокоскоростных телекоммуникационных устройств. Однако прогресс в создании многослойных структур самоорганизующихся квантовых точек соединений A3B5, характеризующихся однородностью по размеру и форме, а также повышенной поверхностной плотностью, привел к созданию полупроводниковых лазеров с их активной средой. Такие лазеры обеспечивают более высокую эффективность, работа при более высоких токах порога и более широкий диапазон температурной стабильности, что позволяет удовлетворять требованиям высокоскоростных телекоммуникационных устройств. Теперь возможно использовать спектральную область 1,0-1,7 мкм для создания лазеров с традиционной конструкцией и лазеров с вертикальным резонатором, которые могут генерировать излучение в диапазоне 1,3 мкм с высокой выходной мощностью и очень низкими пороговыми токами. Кроме того, был создан широкополосный лазер на квантовых точках, работающий на длине волны 1,5 мкм при комнатной температуре с плотностью тока всего лишь 70 А/см^2 на один слой квантовых точек. Также можно использовать оптические усилители на основе квантовых точек для обработки сигналов со скоростью свыше 40 Гбит/с. Благодаря разнообразному расширению электронных переходов в квантовых точках, возникает возможность увеличения области для изменения длины волны генерации. Данные лазеры, использующие квантовые точки InAs и подложки InP, позволяют получать генерацию в более длинноволновом диапазоне (1.7-2.3 мкм), что является важным для применений в молекулярной спектроскопии и контроле газовых атмосфер. При использовании квантовых точек на основе InAsSb на подложке InP, удалось получить непрерывную генерацию при комнатной температуре на длинах волн около 2 мкм. Данный направление сейчас находится в стадии активного развития, и некоторые полупроводниковые лазеры с активной средой на основе квантовых точек стали доступны для коммерческого использования.

Самой развивающейся областью применения полупроводниковых квантовых точек является использование коллоидных квантовых точек (полупроводниковых нанокристаллов в органических и водных растворах) в качестве люминесцентных меток для визуализации структуры биологических объектов разного типа и для чувствительного детектирования биохимических реакций, которые крайне важны в молекулярной и клеточной биологии, медицинской диагностике и терапии. Люминесцентная метка представляет собой люминофор, связанный с молекулой-линковщиком, которая может селективно связываться с детектируемой биоструктурой (мишенью). Метки должны быть растворимыми в воде, иметь большой коэффициент поглощения, обладать высоким квантовым выходом люминесценции в узкой спектральной полосе. Последнее особенно важно для регистрации многоцветных изображений, когда различные мишени в клетке помечены разными метками. В качестве люминофоров меток обычно используются органические красители. Их недостатками являются низкая устойчивость к фотообесцвечиванию, не позволяющая проводить долговременные измерения, необходимость использования нескольких источников света для возбуждения различных красителей, а также большая ширина и асимметрия полос люминесценции, затрудняющие анализ многоцветных изображений.

2 Квантование энергетического спектра носителей заряда в квантовых точках

2.1Модель прямоугольной потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками

Самые простые по форме волновые функции и энергетический спектр имеет квантовая точка в форме прямоугольного параллелепипеда с непроницаемыми границами. Предположим, что потенциальная яма, моделирующая такую точку, занимает область пространства

$$QD = \begin{bmatrix} 0 \le & x \le & L_x \\ 0 \le & y \le & L_y \\ 0 \le & z \le & L_z \end{bmatrix}, \quad (1)$$

где Ly - длина ребра параллелепипеда в u-м направлении. Тогда потенциал $V(r)$ можно представить в виде

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r \in QD, \\ x, & r \notin QD. \end{cases} \quad (2)$$

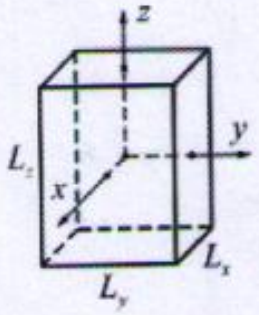


Рисунок 12 - Модель прямоугольной потенциальной ямы

Одним из перспективных применений полупроводниковых квантовых точек является использование коллоидных полупроводниковых нанокристаллов в качестве люминесцентных меток, которые могут быть использованы для

визуализации структуры биологических объектов и детектирования биохимических реакций с высокой чувствительностью. Метки должны быть растворимыми в воде, обладать большим коэффициентом поглощения и высоким квантовым выходом люминесценции в узкой спектральной полосе для регистрации многоцветных изображений. Недостатками обычных органических красителей являются низкая устойчивость к фотообесцвечиванию, необходимость использования нескольких источников света для возбуждения различных красителей и большая ширина полос люминесценции, что затрудняет анализ многоцветных изображений. С использованием нанокристаллов на основе соединений A2B6 и A3B5 было достигнуто резкое увеличение квантового выхода меток до 85 % при комнатной температуре, покрывая нанокристаллы тонкой оболочкой из другого материала с большей шириной запрещенной зоны. Такие кристаллы называются «квантовые точки ядро–оболочка». В контроле диаметра квантовых точек, имеющих размеры от 1.5 нм и выше, используется методика изменения времени реакции. Эта процедура проходит при температуре около 300 ◦C и может длиться от нескольких минут до нескольких часов. Также возможно отбирать нужное количество продукта через разные временные интервалы после начала реакции. Этот метод позволяет получать набор квантовых точек, обладающих одним составом, но разными размерами.

У квантовых точек CdSe/ZnS положение полосы излучения может находиться в диапазоне от 433 до 650 нм (от 2,862 до 1,906 эВ). Ширина полосы составляет около 30 мэВ [8]. При использовании других материалов диапазон перестройки спектральных полос излучения нанокристаллов может быть значительно расширен, как показано на рисунке 10.

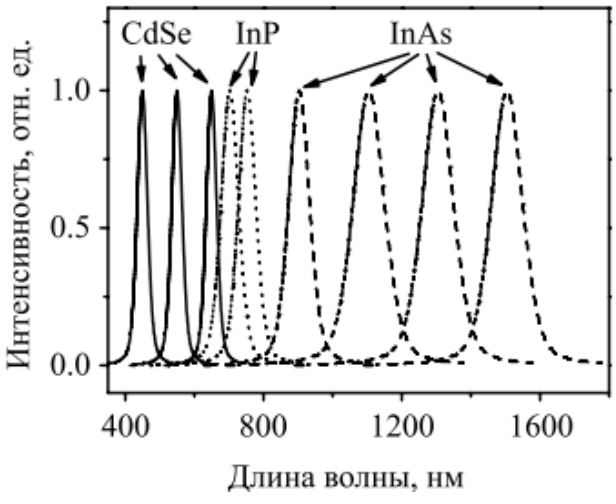


Рисунок 10 - Диапазон люминесценции полупроводниковых нанокристаллов различного состава и разных размер

На рисунке изображено сравнение спектров люминесценции нанокристаллов CdSe/ZnS и молекул родамина 6Ж. Еще одно преимущество нанокристаллов по сравнению с органическими люминофорами заключается в том, что нанокристаллы одинакового состава имеют широкую полосу поглощения с высоким коэффициентом экстинкции (до 10^6 $см^{-1}моль^{-1}$), соответствующую переходам в более высокие энергетические состояния. Их положение практически не зависит от размера квантовых точек. Поэтому, в отличие от красителей, нанокристаллы разных размеров могут быть эффективно возбуждены излучением одного лазерного источника. Самым большим преимуществом, является то, что нанокристаллы обладают превосходной фотостабильностью. Как показано на рисунке 11, нанокристаллы не выцветают в течение нескольких часов или даже дней, тогда как время фотодеградации, характерное для обычных люминофоров, ограничивается несколькими минутами.

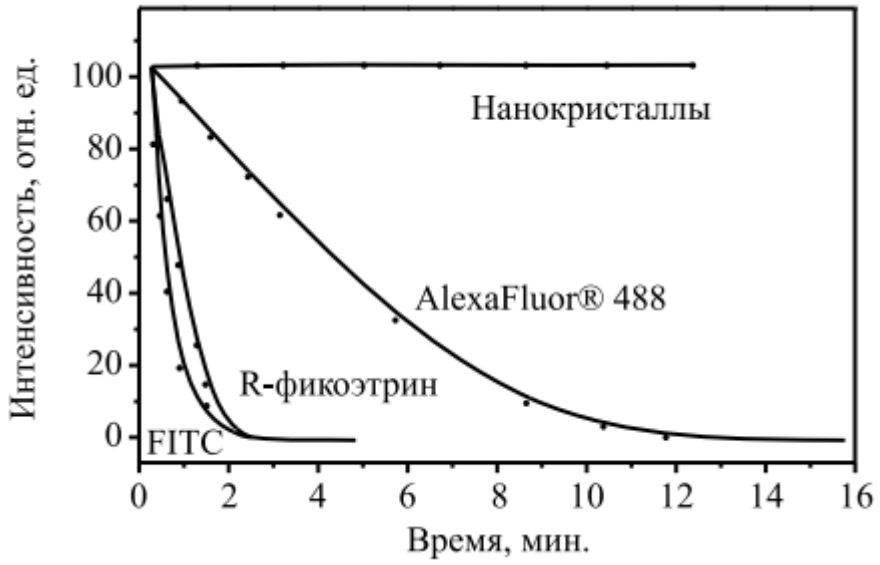


Рисунок 11 - Фотоиндуцированная деградация люминесценции меток на основе нанокристаллов CdSe/ZnS и стандартных молекулярных люминофоров при облучении ртутной лампы

Верхний слоя таких КТ, покрыт гидрофобными молекулами, использованными при синтезе, и поэтому растворима только в органических растворителях. Поскольку живые организмы (белки, ДНК, пептиды)

существуют только в водных растворах, были разработаны методы, позволяющие сделать поверхность нанокристаллов водорастворимой с положительно или отрицательно заряженной поверхностью.

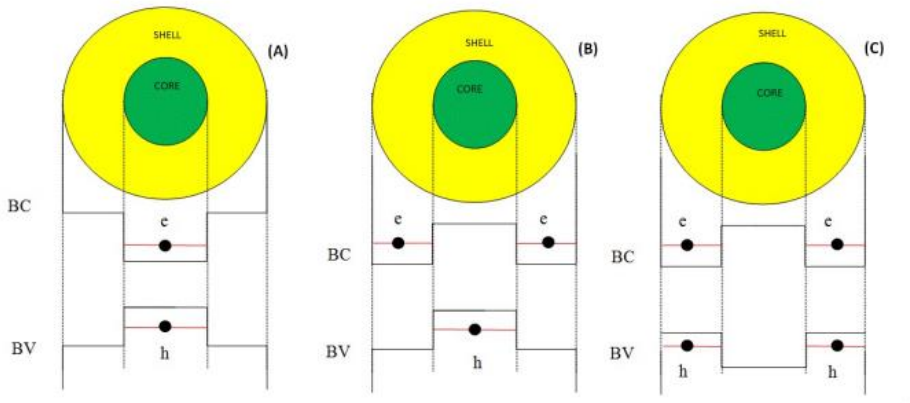
2.2 Модель цилиндрической квантовой ямы

Цилиндрические квантовые точки используют в качестве модели для саморастущих полупроводниковых нанокристаллов. Нанокристаллы, полученные этим методом, имеют призматическую форму с приблизительно круглым основанием. Как и в случае прямоугольно-параллельных квантовых точек, волновая функция и энергетический спектр цилиндрических квантовых точек могут быть определены аналитически только в предположении, что потенциальный барьер для носителей заряда бесконечно высок.

Влияние размера наноточки и положения донора на энергию связи более выражено для точек меньшего размера. Специалисты исследовали энергию основного состояния экситонов внутри микросферических кристаллитов с потенциальной стенкой конечной высоты в зависимости от радиуса частицы в режиме сильного ограничения. Они продемонстрировали, что квантовую точку нельзя смоделировать, используя потенциал бесконечной высоты барьера в режиме сильного ограничения. Другие формы квантовых точек также широко изучались в основном цилиндрические КТ, линзовые КТ и пирамидальные КТ. Влияние внешнего электрического поля на энергию заряда в основном состоянии носители внутри квантовой точки также изучались несколькими авторами. Они применили подход невырожденного и вырожденного возмущения для расчета корреляционных энергий основного и трех низковозбужденных состояний водородной примеси внутри сферической параболоподобной квантовой точки в зависимости от силы удержания и интенсивности приложенного электрического поля. С помощью спектроскопии микрофотолюминесценции проблема экситона в одиночной квантовой точке InGaN была рассмотрена Робинсоном [9]. Он обнаружил, что квантово-ограниченный эффект Штарка вызывает сдвиг энергии экситона более чем на 5 мэВ, сопровождающийся уменьшением силы экситонного осциллятора. Сдвиг

имеет как линейные, так и квадратичные члены в зависимости от приложенного поля. В работе был применен вариационный подход к исследованию поведения экситона, заключенного в одиночный квантовый диск ZnO, под действием бокового электрического поля. Они показали, что электрическое поле уменьшает энергию связи экситона. В последнее десятилетие полупроводниковые квантовые точки типа ядро/оболочка привлекли внимание ряда исследователей благодаря своим улучшенным свойствам.

В соответствии с максимумом валентной зоны и минимумом зоны проводимости в одном и том же материале можно выделить три категории полупроводниковых квантовых точек «ядро/оболочка»: тип I, тип II и обратный тип I. На рисунке 12 представлен обзор основных категорий квантовых точек «ядро/оболочка». Из-за профиля проводимости и валентной зоны квантовых точек типа II «ядро/оболочка» перекрытие волновых функций электронов и дырок уменьшается. Как результат, один носитель в основном ограничен ядром, а другой – в основном, ограничен оболочкой[5].



(A)-полупроводник 1 типа, (B)-полупроводник2 типа(C)-полупроводник обратного типа

Рисунок 12 - Категории полупроводниковых квантовых точек типа «ядро/оболочка»

В этом случае эмиссия меньше, чем ширина запрещенной зоны любого полупроводника. В результате цвет излучения смещается в сторону спектральных диапазонов.

2.3 Модель сферической потенциальной ямы

Чтобы получить квантовую точку сферической формы нужно воспользоваться моделированием симметричной потенциальной ямы. Зависимость потенциала от расстояния и от центра точки определяется условиями конкретной задачи и является частично произвольным. Предположим, что потенциальный колодец $V(r)$ имеет бесконечно высокие стенки. Это предположение оправдано, если, например, полупроводниковая квантовая точка находится в диэлектрике или жидкости. Также предположим, что квантовые точки считаются сферами радиуса r.

Ознакомимся более подробно с квантовой точкой, которая выглядит как симметричная потенциальная яма глубиной V и радиусом R с центром в начале координат. В этом случае потенциальная энергия носителя заряда выражается как функция:

$$V(r) = \begin{cases} 0, r \le R \\ V, r \ge R \end{cases} \tag{3}$$

Рассмотрим уравнение Шредингера внутри квантовой точки, в сферических координатах:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)-\frac{I}{r^2}\right)\psi(r,\upsilon,\varphi) = E\psi(r,\upsilon,\varphi) \tag{4}$$

,

где

$$I^2 = -\frac{1}{\sin\upsilon}\frac{\upsilon}{\partial\upsilon}\left(\sin\upsilon\frac{\upsilon}{d\upsilon}\right)+\frac{1}{\sin^2\upsilon}\frac{\partial^2}{d\varphi^2} \tag{5}$$

квадрат оператора углового момента, функциями которого являются сферические гармоники $Y_{lm}(\theta,\varphi)$,

$$I^2 Y_{lm}(\upsilon,\varphi) = l(l+1)Y_{lm}(\upsilon,\varphi) \tag{6}$$

$$Y_{lm}(\upsilon,\varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}}P_{lm}(\cos\upsilon)e^{im\varphi} \tag{7}$$

$$l = 1,2,3,\ldots$$

$$m = -l,-l+1,\ldots,l-1,l$$

$P_l^m(\cos\theta)$ - полиномы Лежандра.

По мере уменьшения размера КТ увеличивается запрещенная зона это приводит к возрастанию энергии оптического перехода. Согласно первому приближению, эффективная ширина полосы пропускания КТ увеличивается по мере уменьшения размера частиц, как в R^{-2}. Это и есть "синий сдвиг", основное проявление эффекта квантового размера в полупроводниках, при котором край полосы поглощения и пик испускания смещаются. Когда электрон возбуждается, поглощая фотон соответствующей энергии, он переключается между уровнями размерного квантования, этот процесс называется экситонным переходом.

3 Теоретическое изучение квантовых состояний и энергетического спектра квантовых точек на основе селенида кадмия/сульфида цинка

3.1 Моделирование волновых функций электрона в КТ в модели «жестких» стенок

Самой развивающейся техногией применения квантовых точек на сегодняшний день является применение колоидных квантовых точек применяют их в качестве флуоресцентных меток для визуализации структуры различных типов организмов и чувствительного обнаружения биохимических реакций, важных для молекулярной и клеточной биологии, медицинской диагностики и терапии. Флуоресцентные метки представляют собой люминофоры, прикрепленные к связывающей молекуле, которая может избирательно связываться с биологической структурой (мишенью), подлежащей обнаружению. Метка должна быть водорастворимой, иметь высокий коэффициент поглощения и высокий квантовый выход излучения в узкой спектральной полосе. Последнее особенно важно при многоцветной регистрации изображений, когда разные мишени внутри клетки маркируются разными метками. В качестве флуорофоров для меток часто используются органические красители. Их недостатками являются низкая светостойкость, что препятствует проведению длительных измерений, необходимость использования нескольких источников света для возбуждения различных красителей, а также широкая и асимметричная ширина полосы излучения, что затрудняет анализ многоцветных изображений..

Селенид кадмия представляет собой неорганическое соединение, твердое вещество красно-черного цвета и является полупроводником. Существуют три кристаллические формы CdSe: вюрцит (гексагональный), каменная соль (кубический), сфалерит (кубический). Валентная зона массивного кристалла CdSe состоит в основном из *p*-орбиталей селена, а зона проводимости - из орбиталей кадмия. Массивный материал CdSe существует в двух структурах: кубической и вюрцитовой. Элементарная ячейка Cd и Se представляет собой гексагональную упаковку. Другая форма - кубическая структура, где элементарная ячейка имеет кубический гранецентрированный центр. Структура сфалерита CdSe нестабильна и при умеренном нагревании переходит в форму вюрцита рисунок 13.

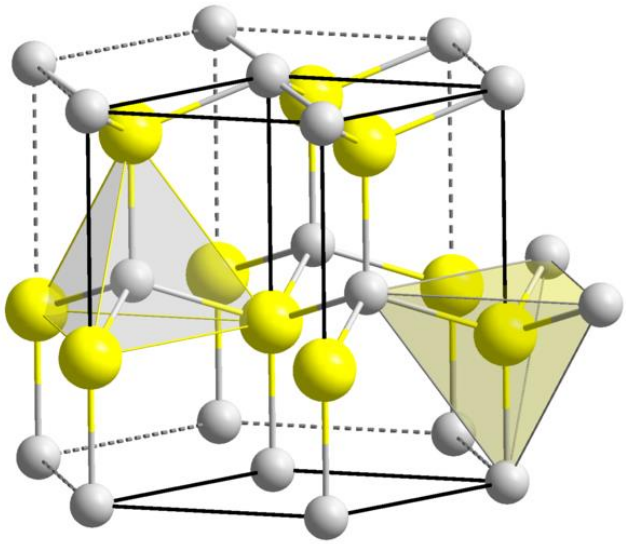


Рисунок 13 – Структура ячейки селенида кадмия

Этот тип полупроводников считается лучшим в технологии оптических устройств, оптических запоминающих устройств с высокой плотностью прозрачных проводников, лазерных устройств, фотоприемников, фотоэлектрических датчиков.

Производство селенида кадмия осуществляется двумя способами. Получение объемного кристаллического CdSe осуществляется методом вертикального зонного плавления при высоком давлении или вертикальной зонной плавкой при высоком давлении. Селенид кадмия также может производиться в форме наночастиц. Было разработано несколько методов

производства наночастиц CdSe: задержанное осаждение в растворе, синтез в структурированных средах, высокотемпературный пиролиз, сонохимические и радиолитические методы - это лишь некоторые из них. Наночастицы, полученные из CdSe, размером менее 10 нм обладают свойством, известным как квантовое ограничение. Квантовое ограничение возникает, когда электроны в материале ограничены очень маленьким объемом. Квантовое ограничение зависит от размера, что означает, что свойства наночастиц CdSe настраиваются в зависимости от их размера.

Исследуем квантовые свойства системы типа ядро/оболочка на основе CdSe/ZnS. Рассмотрим многослойный гетеронанокристалл, изготовленный по типу структуры(CdSe) ZnS, CdSe, ZnS (ядро) оболочки, как схематично показано на рисунке 14.

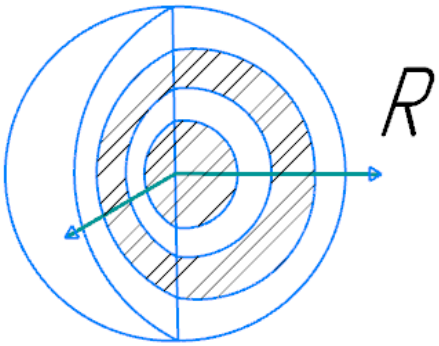


Рисунок 14 - Схема луковицеобразной (CdSe) гетеронанокристаллической структуры

На рисунке 15 показана энергетическая диаграмма гетеронанокристаллической структуры на основе CdSe/ZnS.

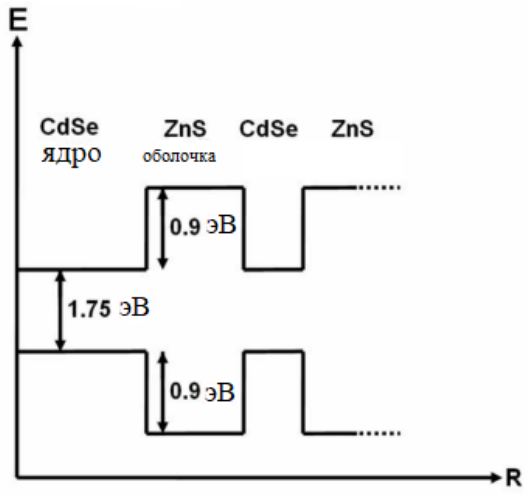


Рисунок 15 – Энергетическая диаграмма гетеронанокристаллической структуры на основе CdSe/ZnS

Используя квантово-механический анализ были изучены электронные (волновые функции и экситоны), также оптические (пики фотолюминесценции и относительные интенсивности колебаний). Используя теоретические результаты, описывающие экспериментальные данные, были определены условия для многоцветной спонтанной эмиссии из одного многослойного гетерокристалла в системе материалов CdSe/ZnS: (CdSe)ZnS, доказано, что для гетерокристаллов CdSe и ZnS различная пространственная локализация экситонов в отдельных слоях (ядро CdSe и оболочка ZnS) является ключом к многоцветной люминесценции, что является основой для генерации белого света из одного гетерокристалла.

Контролируя сочетание толщины оболочек CdSe и ZnS, они обнаружили, что локализация носителей может быть неожиданно изменена с локализации первого типа, когда электроны и дырки находятся преимущественно в одном и том же слое гетероструктуры, на локализацию второго типа, когда электроны и дырки находятся преимущественно в разных слоях гетероструктуры. Нанокристаллы, такие как квантовые точки ядро/оболочка (CdSe)ZnS, обычно имеют почти сферическую, слегка вытянутую форму, согласно проведенным исследованиям с помощью применения просвечивающей электронной микроскопии с максимальным разрешением, это система (*HRTEM*) [5].

Рассматрим сферически симметричную гетеро/нанокристаллическую структуру и получают волновую функцию, выраженную уравнением. (8) в сферических координатах (r,θ,ϕ). В уравнении:

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) \tag{8}$$

R_{nl}-радиальная часть волновой функции, $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ - сферические гармоники, n основное квантовое числом, l и m - числа углового момента. Поэтому, если собственная энергия гетерокристалла (*Enl)* выше потенциала q-слоя, то для *Enl>Vq* радиальная волновая функция *Rnl(r)*, соответствующая энергетическому состоянию *Enl*, является линейной комбинацией глобальных функций Бесселя и Неймана. С другой стороны, для *Enl<Vq* решение *Rnl(r)* является линейной комбинацией функций Ханкеля.

Приближение эффективной массы используется в теоретическом анализе и является широко распространенным методом в квантовомеханическом анализе. Ранее было показано, что приближение эффективной массы хорошо работает для небольших однослойных квантовых структур [8]. Приближение эффективной массы было использовано для многих сферических нанокристаллических гетероструктур. Используя приближение эффективной массы, были определены энергетические уровни (собственные значения) и волновые функции (собственные функции) гетерокристалла CdSe-ZnS. Соответствующие решения волновой функции должны удовлетворять условию непрерывности на всех границах слоев гетеронанокристалла (граничным условиям), как в уравнениях. (9) и (10).

$$R_{nl,q}(r)\big|_{r=r_q} = R_{nl,q+1}(r)\big|_{r=r_q} \tag{9}$$

$$\frac{1}{m_q^*} * \frac{dR_{nl,q}(r)}{dr}\Big|_{r=r_q} = \frac{1}{m^*_{q+1}} * \frac{dR_{nl,q+1}(r)}{dr}\Big|_{r=r_q} \tag{10}$$

В (CdSe)ZnS/CdSe/ZnS (ядро)оболочка/оболочка гетеро *NC* имеется четыре слоя и три границы: Поскольку *Rnl (r)* постоянен при $r = 0$ и равен нулю при $r \to \infty$, в базисной функции имеется шесть неизвестных коэффициентов, и шесть уравнений, полученных из уравнений 2 и 3, применяются к трем

границам. Шесть уравнений, полученных из уравнений 2 и 3, применяются к границе трех.

Чтобы получить нетривиальное решение, определитель этих коэффициентов должен быть равен 0 и *Dl =Dl(Enl)*=0. Если ограничиться *S*-симметричным случаем (нулевой импульс), волновая функция *Rn,l = 0(r)* зависит от радиальной части $l = 0$ и $m = 0$, что означает, что волновая функция зависит только от *r*. Используя условие нормировки, затем определяются все коэффициенты базисных функций.

После нахождения энергетических уровней и волновых функций вычисляем энергию связи экситона, обусловленную кулоновским $\bar{\varepsilon}_r$ взаимодействием между электронной и дырочной парой, используя теорию возмущений первого порядка. Энергия связи приведена в уравнении (11), где индексы *e* и *h* относятся к электрону и дырке соответственно, ε - высокочастотная диэлектрическая проницаемость. После расширения $1/|re\text{-}rh|$ члена в уравнении (11) в виде сферических гармоник и интегрирования по угловым координатам энергия связи записывается как в уравнении (12), где – средняя диэлектрическая проницаемость.

$$Ec = -\int\int dr_e dr_h \frac{\psi^* e(re)\psi^* h(rh)\psi e(re)\psi h(rh)}{|re - rh|\,\varepsilon(re, rh)} \tag{11}$$

$$Ec = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon 0}\int\int dr_c dr_h rc^2 rh^2 \frac{\mathrm{Re}(re)|^2 \cdot |Rh(rh)|^2|}{\max(re, rh)\varepsilon r \cdot (\bar{re}, rh)} \tag{12}$$

Параметры материала квантовых точек, использованных в квантово-механическом анализе, перечислены в таблице 1. Видно, что при добавлении монослоя CdSe (или ZnS с теми же свойствами) вокруг существующих сферических точек, расширение полученных точек происходит во всех трех направлениях *(x, y* и *z*). Однако гетероструктура (CdSe)ZnS/CdSe/ZnS представляет собой вюрцитовую структуру с одинаковыми постоянными решетки в направлениях x и y и разными постоянными решетки в направлении *z*. Поэтому среднее значение констант решетки в плоскости xy и в направлении *z* рассчитывается как *z*. В результате используется 1 монослой (МС) CdSe

толщиной 0,56 нм и 1 МС ZnS толщиной 0,49 нм, данные в таблице 1. Для расчетов авторы используют ядро CdSe, равное 2,75 нм, а затем добавить альтернативные слои оболочек ZnS и CdSe, каждый с изменяющейся толщиной от 1 до 3 монослоев вокруг этого ядра CdSe. Чтобы найти ограниченные решения, авторы дополняют луковичную структуру бесконечно толстым барьером из ZnS. Сравнение характеристик двух материалов можно посмотреть в таблице 1.

Таблица 1 – Сравнение характеристик материалов CdSe и ZnS.

Материал	*me* *	*mh* *	монослой толщина (нм)	Разрыв полосы (эВ)
CdSe	0.13	0.45	0.56	-
ZnS	0.28	0.49	0.49	1,75 (относительно CdSe)

Рассмотрим сферическую *QDQW*, которая состоит из нескольких слоев, один материал с меньшей шириной запрещенной зоны зажат другим с большей шириной запрещенной зоны. Собственные состояния экситона в структурах *QDQW* могут быть расширены в терминах некоррелированных парных состояний, построенных из одиночных частичных состояний для электрона и дырки в *QDQW*. Собственные состояния электрона и дырки получены диагонализированным методом. Были предположения, что сферическая *QDQW* помещена в большую сферу с радиусом *Rmax*. Полный базисный набор волновых функций строится на основе сферической функции Бесселя. Этот метод удобно применять к таким сложным структурам при наличии внешнего поля.

Если взять электронный радиус Бора и Ридберга

$$a_e^* = \frac{\hbar^2 \varepsilon 0}{m0e^2}, \quad (13)$$

Гамильтониан экситона в структуре *QDQW* может быть записан как

$$H = H_0 + V_{e-h} \tag{14}$$

$$H = P_e \frac{1}{m_e^*(r)} P_e + P_h \frac{1}{m_h^*(r)} P_h + V_e(r) + V_h(r) \tag{15}$$

$$V_{e-h} = -\frac{2}{\varepsilon(r_e, r_h) r_{eh}} H_0 + V_{e-h} \tag{16}$$

где *e(h)* относится к электроне, $e(r_e, r_h)$ диэлектрическая проницаемость материалов, $m_e(m_h)$ эффективная масса электрона в единицах массы свободного электрона $m0$. $V_{e\text{-}h}$- член кулоновского взаимодействия между электроном и дыркой, $V_e(V_h)$ ограниченный потенциал электрона и дырки в *QDQW*.

3.2 Теоретическое сравнение электронных состояний квантовых точек в зависимости от геометрических размеров оболочки.

Квантовые точки, имеющие строение «ядро/оболочка», состоят из двух полупроводниковых материалов и обладают большей эффективностью, чем соответствующие им отдельные наночастицы. Чтобы выявить оптимальные подходы к созданию эффективных полупроводниковых структур, экспериментальные исследования необходимо дополнять результатами теоретического моделирования.

Исходя из проведенного моделирования электронных состояний в квантовых точках, в качестве критерия оценки точности проведенных расчетов было использовано значение ширины запрещенной зоны, экспериментальное значение которой составляет в различных литературных источниках от 1.75 до 1.83 эВ, были получены квантовые точки CdSe/ZnS с разным числом монослоев в ядре и оболочке (3:7, 5:5, 7:3). Проведена оптимизация геометрии, моделирование диаграмм распределения электронной плотности и рассчитаны значения ширины запрещенной зоны. Установлено понижение ширины запрещенной зоны при увеличении толщины оболочки.

Расчёт волновых функций электрона в КТ проводим в модели «жестких» стенок. Стационарное уравнение Шредингера в приближении эффективной массы имеет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m(r)}\nabla^2\psi + U(r)\psi = E\psi \tag{17}$$

Потенциал $U(r)$ и эффективная масса электрона $m(r)$ внутри квантовой точки имеют вид:

$$U(r) = \begin{cases} 0 & r \le R_0 \\ -U_0 & R_0 < r \le R_0 + L \\ \infty & r > R_0 + L \end{cases} \tag{18}$$

$$m(r) = \begin{cases} m_1^* & R \le R_0 \\ m_2^* & R_0 < r \le R_0 + L \end{cases} \tag{19}$$

где U_0 – высота потенциального барьера, m_1^*, m_2^* - эффективные масса электрона внутри ядра и оболочки, R_0 – радиус ядра, L – толщина оболочки.

В силу сферической симметрии уравнение (1) допускает разделение переменных:

$$\psi_{lm}^{i}(r,\theta,\varphi) = R_l^i(r)Y_{lm}(\theta,\varphi), \tag{20}$$

где $R_l^i(r)$ - радиальная часть волновой функции в соответствующих областях (i= 1 – ядро, i= 2 – оболочка); $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ - сферические гармоники, l= 0,1,2…; m = 0,±1, ±2,…, ±l – орбитальное и магнитное квантовые числа.

Для радиальной части волновой функции уравнение Шредингера принимает вид:

1) внутри ядра КТ

$$\frac{\partial^2 R_l^1(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial R_l^1(r)}{\partial r} + (k_1^2 - \frac{l(l+1)}{r^2})R_l^1(r) = 0 \tag{21}$$

2) внутри оболочки КТ

$$\frac{\partial^2 R_l^2(r)}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial R_l^2(r)}{\partial r} + (k_2^2 - \frac{l(l+1)}{r^2})R_l^2(r) = 0, \tag{22}$$

где $k_1^2 = \frac{2m_1^*}{\hbar^2}(E+U_0)$, $k_2^2 = \frac{2m_2^*}{\hbar^2}E$ - квадрат волнового числа.

Решение уравнений (1) и (2) имеет вид:

$$R_l^i(r) = \begin{cases} C_1 j_l(k_1 r)Y_{lm}(\theta,\varphi), & r \le R_0 \\ C_2 j_l(k_2 r)Y_{lm}(\theta,\varphi), & R_0 < r \le R_0 + L \end{cases}, \tag{23}$$

где C_1, C_2 – нормировочные коэффициенты, определяемые из условия равенства волновых функций на границе раздела ядро/оболочка, а также нормировки на дискретный спектр:

$$C_1 j_l(k_1 R_0) = C_2 j_l(k_2 R_0) \tag{24}$$

$$m_2 C_1 \frac{dj_l(k_1 r)}{dr}\Big|_{r=R_0} = m_1 C_2 \frac{dj_l(k_2 r)}{dr}\Big|_{r=R_0} \tag{25}$$

$$\int_0^{R_0+L} R^2(r) r^2 dr = \int_0^{R_0+L} C_1^2 j_l^2(k_1 r) r^2 dr + \int_{R_0}^{R_0+L} C_2^2 j_l^2(k_2 r) r^2 dr = 1 \tag{26}$$

Таким образом, волновая функция электрона для квантовой точки «ядро/оболочка» типа II примет вид:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = \begin{cases} C_1 j_l(k_1 r) Y_{lm}(\theta,\varphi), & r \le R_0 \\ C_1 \dfrac{j_l(k_1 R_0)}{j_l(k_2 R_0)} j_l(k_2 r) Y_{lm}(\theta,\varphi), & R_0 < r \le R_0 + L, \\ 0 \quad r > R_0 + L \end{cases} \tag{27}$$

где нормировочная константа определяется выражением:

$$C_1 = \frac{j_l(k_2 R_0)\sqrt{2}}{\sqrt{R_0^3 j_l^2(k_2 R_0) a_l + j_l^2(k_1 R_0)\{(R_0+L)^3 b_l - R_0^3 c_l\}}} \tag{28}$$

$$a_l = j_l^2(k_1 R_0) - j_{l+1}(k_1 R_0) j_{l-1}(k_1 R_0) \tag{29}$$

$$b_l = j_l^2(k_2(R_0+L)) - j_{l+1}(k_2(R_0+L)) j_{l-1}(k_2(R_0+L)) \tag{30}$$

$$c_l = j_l^2(k_2 R_0) - j_{l+1}(k_2 R_0) j_{l-1}(k_2 R_0) \tag{31}$$

В результате моделирования квантовых состояний получены вероятности электронных состояний в зависимости от размеров оболочки. На рисунке 16 показана плотность распределения вероятности электронных состояний в квантовой точке CdSe/ZnS с толщиной оболочки L=1нм.

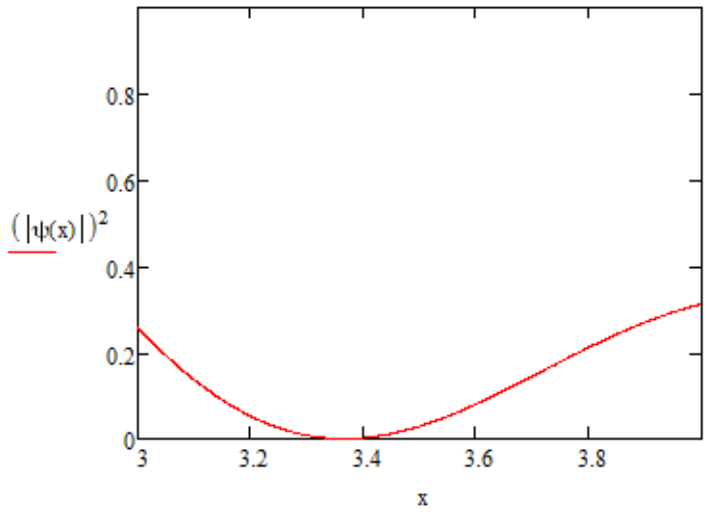


Рисунок 16 - Плотность распределения вероятности электронных состояний в квантовой точке CdSe/ZnS , толщина оболочки *L*=1нм.

На рисунке 17 показана плотность распределения вероятности электронных состояний в квантовой точке CdSe/ZnS с толщиной оболочки *L*=2 нм.

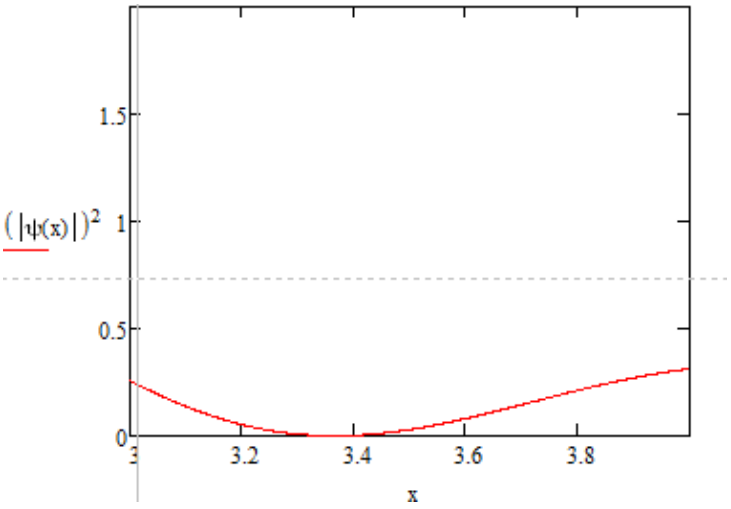


Рисунок 17 - Плотность распределения вероятности электронных состояний в квантовой точке CdSe/ZnS, толщина оболочки *L*=2 нм

На рисунке 18 показана плотность распределения вероятности электронных состояний в квантовой точке CdSe/ZnS с толщиной оболочки *L*=3 нм.

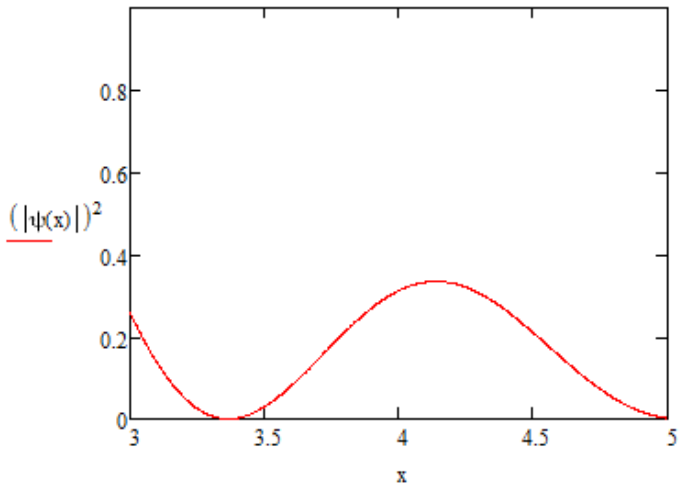


Рисунок 18 - Плотность распределения вероятности электронных состояний в квантовой точке CdSe/ZnS, толщина оболочки *L*=3нм

Плотность распределения электронных состояний в квантовой точке CdSe/ZnS при ширине запрещенной зоны *E*=0,32 эВ.

Таким образом, размер оболочки заметно влияет на плотность распределения электронов. При толщине оболочки *L*=1 нм плотность распределения электронов максимальна вблизи края оболочки, при толщине *L*=2 нм картина распределения меняется только из-за незначительного уменьшения значений плотности вероятности. Кардинально картина меняется при толщине оболочки *L*=3 нм, т.к. максимум распределения плотности вероятности оказывается в области 4-4,5 нм (рисунок 19).

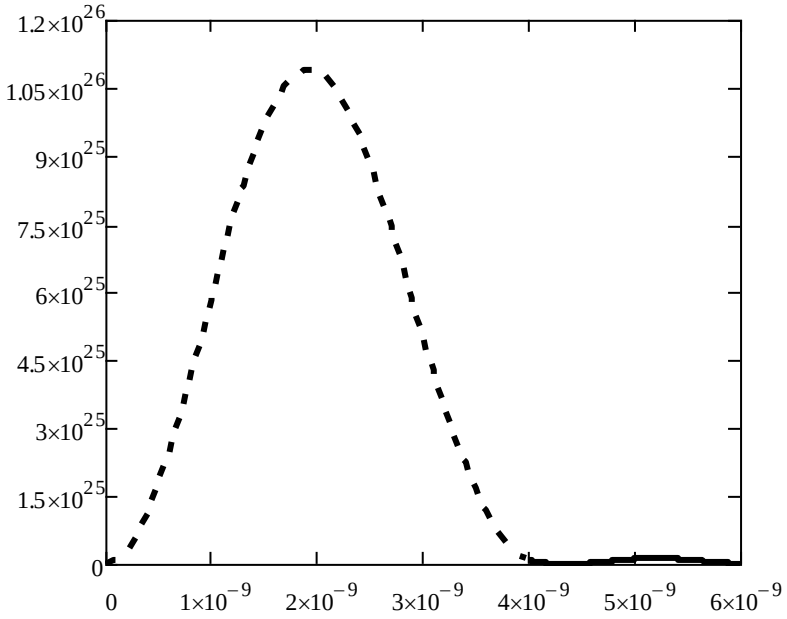


Рисунок 19 - Плотность распределения электронных состояний в квантовой точке CdSe/ZnS

На рисунке показан график распределения плотности электронных состояний в квантовой точке в квантовой точке CdSe/ZnS. Видно, что картина соответствует распределению электронов в квантовой точке типа ядро/оболочка типа I. Это объясняется тем, что максимальное распределение электронной плотности находится в ядре, а возбужденным электронам и дыркам энергетически выгодно находиться в полупроводниках с малыми зазорами. Расчеты, проведенные в данной работе, подтверждают предположение о том, что спектры поглощения и фотолюминесценции квантовых точек первого типа определяются размером и материалом ядра.

3.3 Анализ и сравнение энергетических спектров квантовых точек в зависимости от геометрических размеров ядра и оболочки.

Оптические методы являются наиболее универсальными при исследовании полупроводниковых квантовых точек. Это связано с тем, что оптические методы могут быть использованы для анализа наноструктурных состояний.

Это связано с тем, что наноструктурные состояния могут быть резонансно возбуждены и селективно прозондированы. В некоторых случаях

для изучения квантовых точек можно применять только оптические методы. Это относится к нанокристаллам, выращенным в диэлектрических матрицах или внедренным в жидкости или полимеры. Линейные и нелинейные оптические методы дают возможность изучать широкий спектр параметров, эффектов и процессов в стационарных и нестационарных режимах квантовых точек. В результате можно получить информацию об энергетической структуре фундаментальных возбуждений, таких как энергетические спектры электронных и колебательных систем, взаимодействие между фундаментальными возбуждениями и с внешними полями, перенормировка энергетического спектра и образование коллективных возбуждений, динамика фундаментальных возбуждений и релаксационные процессы. Кроме того, оптические методы могут быть использованы для оценки и мониторинга качества квантовых точек, т.е. их химического состава и размера, качества интерфейса и наличия дефектов. [10].

Взаимодействие электромагнитного излучения с электронами и дырками приводит к меж- и внутризонным переходам электронной подсистемы квантовой точки, в результате которых поглощаются или испускаются фотоны. Такими переходами обусловлено большинство оптических процессов, включая поглощение и рассеяние света, а также люминесценцию. Важной особенностью электроно-фотонного взаимодействия при внутризонных переходах является зависимость его матричных элементов от размера квантовой точки. Для режима сильного конфайнмента эта зависимость проста, матричный элемент пропорционален противоположному значению размера квантовой точки. Можно сделать вывод, что эта закономерность справедлива для квантовых точек любой формы.

На рисунке 20 показано распределение вероятностей электрона $|\psi_{e,200}(r)|^2$ и дырки, где $|\psi_{h,200}(r)|^2$ (нормированное значение плотности вероятности) для первых возбужденных состояний при n=2. Здесь (CdSe) гетеронанокристаллы ZnS/CdSe/ZnS анализируются в зависимости от толщины их внутренних оболочек ZnS и CdSe, варьирующейся от 1 мл до 3 мл, в то

время как радиус ядра CdSe остается неподвижной, а сама внешняя оболочка ZnS принимается бесконечно широкой. Наблюдается, что в этом энергетическом состоянии *n*=2, изменяя толщину слоя оболочки, можно регулировать распределение носителей между локализованным режимом типа 1 (больше электронов и дырок в одном слое) и типа 2 (больше электронов и дырок в разных слоях). В случаях, когда 1 нм - размер оболочки ZnS и 1 нм – размер оболочки CdSe (обозначенных как 1-1 в обозначениях на рисунке 20), 1 нм - оболочка ZnS и 2 нм - оболочка CdSe (1-2), 1 нм - оболочка ZnS и 3 нм - оболочка CdSe (1-3) и 2 нм - оболочка ZnS и 1 нм - оболочка CdSe (2-1), как электрон, так и дырка, в основном, находятся в ядре CdSe, причем максимумы их распределения перекрываются в центре ядра, показывая тип-1-подобную локализацию. Однако для случаев оболочек размером 2 нм ZnS и 3 нм CdSe (2-3) и 3 нм ZnS и 1 нм CdSe (3-1) максимумы распределения электрона и дырки четко разделены, при этом один тип носителя в основном находится в ядре CdSe, в то время как другой находится в основном в оболочке, показывая локализацию, подобную типу 2. В случае (3-3), как электрон, так и дырка в основном находятся в оболочке CdSe, которая снова показывает локализацию носителей, подобную типу 1. Здесь стоит отметить, что электрон и дырка локализуются в оболочке CdSe, а не в ядре CdSe в конечных случаях локализации, подобных типу 1. В результате, изменяя толщину оболочек ZnS и CdSe, мы наблюдаем, что можно настроить локализацию носителей с режима квантовых точек типа 1 на режим квантовых точек типа 2 и наоборот [11].

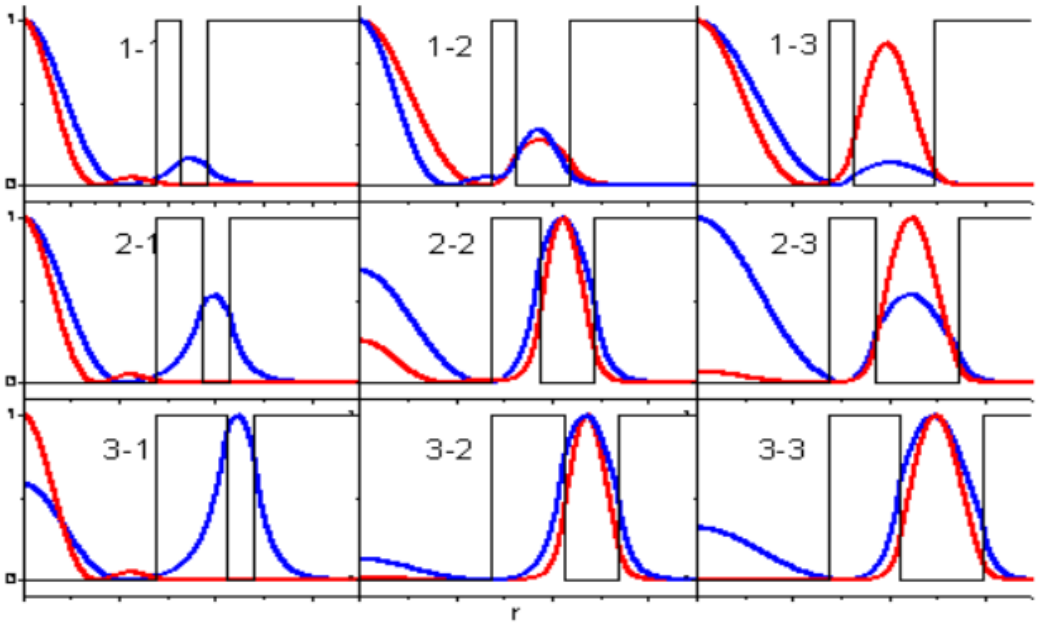
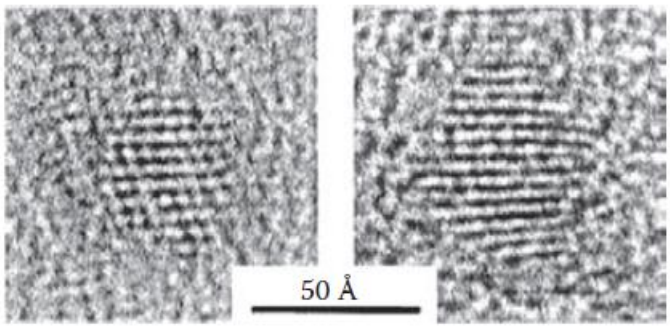


Рисунок 20 - Распределение плотности вероятности электрона и дырки в квантовой точке CdSe/ ZnS

Другой тип полупроводника может быть использован в качестве оболочки для неорганического ядра квантовых точек. Создание наночастиц с оболочкой ядра не только уменьшает вклад поверхностного состояния синтезированного нанокристалла, но и изменяет оптические свойства квантовых точек. В отличие от органической стабилизирующей оболочки, полупроводниковый пассивирующий слой вносит вклад в электронно-дырочное состояние квантовых точек. Основное различие при использовании в качестве оболочки полупроводников с различной шириной полосы пропускания заключается в том, что положение валентной полосы и полосы проводимости меняется [10].

Тонкие пленки CdSe получают методами вакуумного испарения, ионного распыления, пульверизации с последующим пиролизом, анодирования, электролитического осаждения и осаждения из раствора. Структурные и электрические свойства пленок зависят от метода получения и параметров процесса осаждения. На рисунке 21 [11] можно увидеть изображение (*a*) частиц сердцевины CdSe диаметром 3,4 нм и (*b*) (CdSe) Частицы оболочки CdS (ядра), полученные из ядра в (*a*) путем покрытия оболочкой ZnS толщиной 0,9 нм.

Там, где границы решетки очевидны, они охватывают весь нанокристалл, указывая на рост эпитаксиальной оболочки (сердцевины).



a - CdSe (слева), b - CdSe/ZnS (справа)

Рисунок 21 – Изображение квантовой точки

Наноразмерные полупроводниковые гетероструктуры вызывают большой интерес не только за счет изменения размера и формы отдельных компонентов, но и за счет использования комбинации свойств обоих полупроводников для достижения новых функциональных возможностей, что делает их применимыми далеко за пределами ограничений, налагаемых отдельными наночастицами. В современной коллоидной технологии нанокристаллы ядро-оболочка, многокомпонентные гетероструктуры и полупроводниковые гетероструктуры обычно классифицируются как тип I или тип II в соответствии с относительным расположением электронов проводимости. [12].

Для начала рассмотрели квантовую точку, образованную соединением квантовых точек CdS и ZnSe одинаковых размеров. На основе экспериментальных результатов были использованы кластеры CdS в вюрцитной (гексагональной) фазе и кластеры ZnSe в цинковой плоскости (кубической) фазе. При моделировании кластер CdS состоит из 45 атомов Cd и 51 атома S, а кластер ZnSe - из 44 атомов Zn и 46 атомов Se. Диаметр обоих кластеров составляет примерно 1,6 нм. Гетероструктура образована полярной (0001) гранью кластера CdS и полярной (111) гранью кластера ZnSe в структуре вюрцита, как показано на рисунке 22, где терминальная грань Cd кластера CdS соединена с терминальной гранью Se кластера ZnSe..

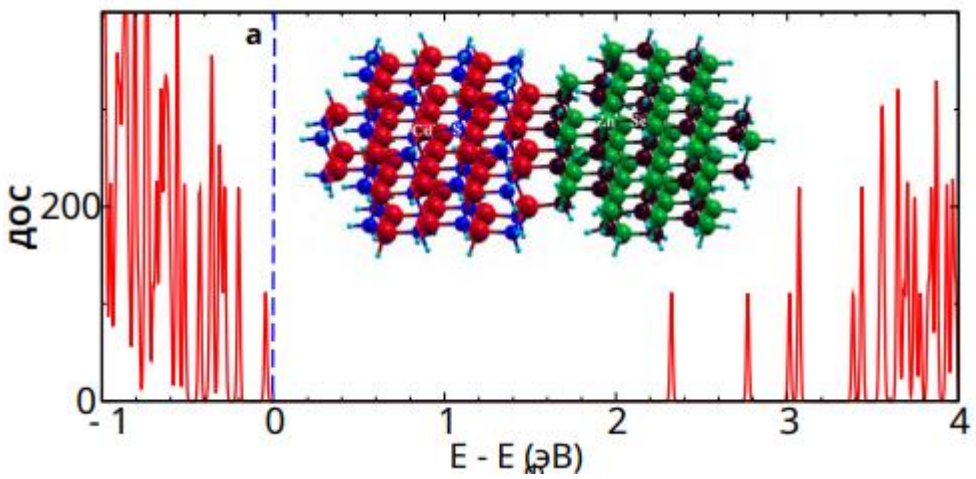


Рисунок 22 – Плотность состояний для связанных квантовых точек CdS/ZnSe аналогичного размера

На рисунке 22 показана структура связанных квантовых точек, где красные, синие, зеленые, темно-синие и светло-синие сферы представляют атомы Cd, S, Zn, Se и фиктивный пассиватор, соответственно. Пассиватор - это вещества, которые пассивируют металлические поверхности. Общая плотность состояний, соответствующая связанной квантовой точке CdS/ZnSe, показана на рисунке 22. Предполагается, что промежуток между самой высокой занятой молекулярной орбиталью и самой низкой незанятой молекулярной орбиталью для связанной квантовой точки равен 2,3 эВ. Это меньше, чем запрещенная зона для обоих его компонентов, для кластера CdS (≈ 2,65 эВ) и кластера ZnSe (≈3,10 эВ). Тенденция изменения рассчитанных компонентных зазоров согласуется с экспериментальной шириной запрещенной зоны объемных полупроводников CdS (2,42 эВ) и ZnSe (2,70 эВ). Рассчитанный зазор для одиночных точек больше, чем экспериментальное значение для объемного полупроводника из-за квантового ограничения.

Эффективный зазор гетероструктуры, меньший, чем у любого из компонентов, указывает на то, что выравнивание полос на границе раздела может быть II типа.

Разрешенная энергия плотности заряда для квантовой точки CdS/ZnSe, показана на рисунке 23.

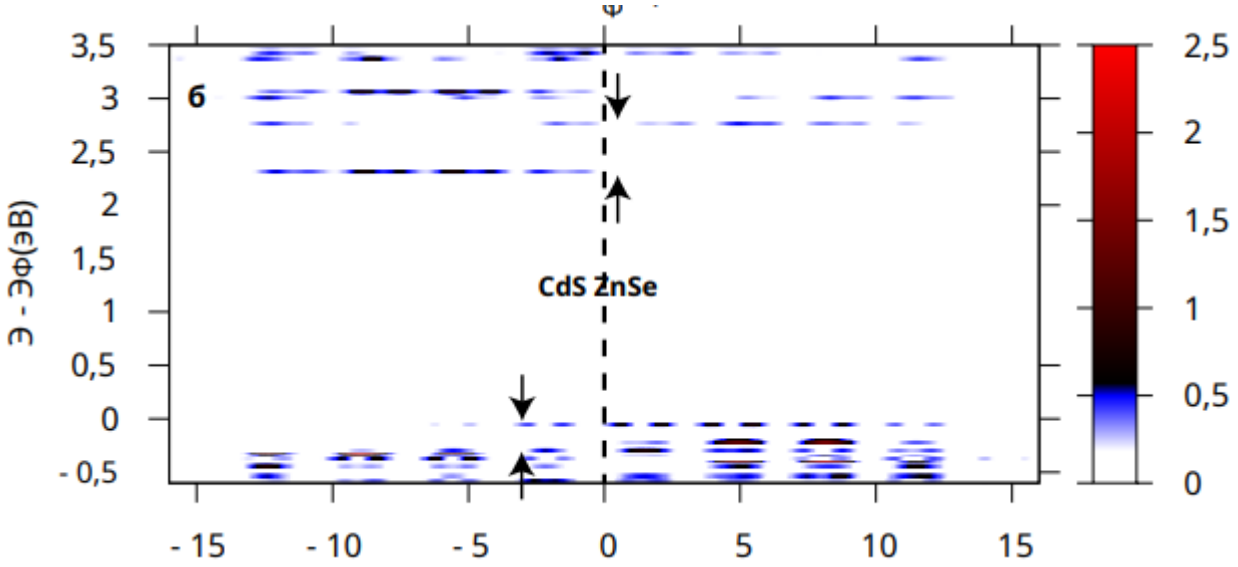


Рисунок 23 – Разрешенные значения энергии для квантовой точки CdS/ZnSe

Из рисунка видно, что самое высокое занятое состояние в основном ограничено частью ZnSe, соединенного с квантовой точкой короткой областью, расширяющейся до области CdS.

С другой стороны, самое низкое незанятое состояние относится к области CdS. Кроме того, этот рисунок дает четкое представление о локализации всех состояний в интересующем нас энергетическом диапазоне.

4 Анализ влияния освещенности научно-исследовательской лаборатории на работу инженера-исследователя

В сфере нанотехнологии инженер-исследователь занимается разработкой методов получения, исследования и контроля параметров наноструктур, для чего необходимо взаимодействие с широким спектром технологического и исследовательского оборудования. Кроме того, для обеспечения необходимых нормальных условий труда необходимо обратить внимание на аспекты связанные с организацией помещения, где инженер-исследователь будет работать.

Так, в лаборатории, в которой занимается научной деятельностью инженер-исследователь, стены окрашены в бежевый оттенок, потолок имеет белую окраску, а на полу уложен линолеум. Однако, размеры помещения должны соответствовать количеству работающих и размещенному в них комплексу технологических и исследовательских средств, для обеспечения требуемых нормальных условий труда.

Согласно стандартам в области санитарно-гигиенических норм, на одного работающего должны приходиться следующие ограничения: объем помещения не менее 19.5 $м^3$; площадь помещения, огороженного стенами или глухими перегородками не менее 6 $м^2$. Кроме того, помещение должно отвечать требованиям на чистоту воздуха (ГОСТ 12.1.005-88), температуру (ГОСТ 12.1.005-88), освещение (ГОСТ 12.1.004-83), изоляцию от шумов (ГОСТ 12.1.003-83) и другим аспектам, связанным с охраной труда.

Важно отметить, что создание оптимальных условий труда по всем аспектам, связанным с научной работой в области нанотехнологии, играет важную роль в эффективности работы инженера-исследователя и, в конечном итоге, успешности его научных достижений.

Рабочее место инженера-исследователя является ключевым элементом всей производственной цепочки, и его планировка должна соответствовать нормам, обеспечивающим не только комфортное выполнение работ, но и экономию времени и энергии оператора. Основным требованием к рабочему месту является использование стандартных размеров рабочего стола (1100х650 мм), на который располагаются комплекты необходимого оборудования. Однако, не менее важно учитывать рациональное использование производственных площадей и удобство обслуживания устройств ЭВМ, а также соблюдение правил охраны труда. Отсутствие соответствующих условий на рабочем месте может привести к чреватым последствиям, что недопустимо при выполнении научно-исследовательских задач.

Ключевым элементом рабочего места инженера-исследователя является комплект оборудования, размещаемый на стандартном рабочем столе. Этот комплект включает в себя компьютер, который состоит из системного блока, жидкокристаллического монитора, клавиатуры и мыши, а также экран и доску. Для более эффективного выполнения задач, рабочее место заведующего лабораторией оснащено четырьмя персональными компьютерами. Важно учесть, что планировка рабочего места должна соответствовать требованиям нормам для обеспечения комфортного выполнения работ, экономии энергии и времени оператора, рационального использования производственных площадей, а также обеспечения удобства обслуживания и соблюдения правил охраны труда.

Для того, чтобы обеспечить комфортную и безопасную работу оператора исследователя в рабочих условиях, необходимо правильно оборудовать рабочее место.

Первая зона работы инженера-исследователя включает в себя измерения вольт-фарадных характеристик. Рабочее место должно быть оснащено компьютером, включающим в свой состав системный блок, монитор, клавиатуру и мышь, а также установкой для проведения измерений.

Вторая зона работы связана с исследованием полупроводниковых свойств твердых тел. Рабочее место должно включать компьютер с системным блоком, монитором, клавиатурой и мышью, а также установку для измерения полупроводниковых свойств твердых тел и установку для демонстрации эффекта Пельтье. Такой набор оборудования необходим, чтобы изучить свойства полупроводников и их применение в различных областях промышленности.

Третья зона работы связана с изучением многослойных печатных плат. Рабочее место должно быть оснащено вольтметром универсальным, осциллографом и источником питания. Такой набор оборудования необходим, чтобы проанализировать работу многослойных печатных плат и выявить возможные неисправности. Работа в лаборатории требует концентрации и внимательности. Правильное оборудование рабочего места позволит оператору исследователю более эффективно выполнять свои задачи, а также снизит риск возможных вредных воздействий на здоровье.

Естественная или искусственная освещенность рабочего места, повышенная или пониженная влажность воздуха, недостаточная или увеличенная температура воздуха, превышающий допустимые нормы уровень шума и электромагнитного излучения, перенапряжение зрительного аппарата, чрезмерная запыленность воздуха и превышающий установленные стандарты уровень статического электричества - это факторы, способные оказывать негативное воздействие на работающего человека и производительность труда. Анализ этих факторов и определение их уровня является важной задачей для улучшения условий труда и защиты здоровья работников. Например, правильное регулирование освещения, оптимизация температуры и влажности, снижение уровня шума и электромагнитного излучения, контроль чистоты воздуха и уровня статического электричества могут помочь снизить риски для работников и повысить производительность труда. Строгое соблюдение стандартов и правил, применимых к этим элементам, необходимо для обеспечения безопасности и комфорта работников. Профилактические и

защитные меры, такие как мониторинг шума и электромагнитного излучения, очистка воздуха с помощью фильтров и систем вентиляции, соответствующее освещение и контроль температуры, также должны быть реализованы для обеспечения безопасности и комфорта работников.

Лаборатории - это места, где проводятся научные эксперименты и исследования в различных областях знаний. Однако работа в таких помещениях требует учета рисков для здоровья и безопасности работников. Особое беспокойство вызывают уровни ионизирующего излучения, которые, в соответствии с ГОСТ Р (52241-2004), могут быть вредны для здоровья человека, если превышены допустимые пределы этого параметра, и должны быть приняты соответствующие меры защиты. Работники научных лабораторий также подвержены риску поражения электрическим током при работе с электрооборудованием; ГОСТ (12.4.026-2015) определяет соответствующие меры, которые должны быть приняты для предотвращения подобных инцидентов.

Стресс также может стать причиной болезней и психических расстройств у лаборантов в научных лабораториях. В то же время умственное переутомление может негативно сказаться на качестве и точности исследований.

Важным аспектом безопасности является риск возникновения пожара в научных лабораториях: ГОСТ (12.1.044-2018) определяет различные меры по предотвращению и тушению пожаров в рабочих зонах. Следует отметить, что безопасность сотрудников в научных лабораториях также связана с соблюдением определенных параметров микроклимата. Риски для здоровья могут возникнуть при работе в перегретом воздухе или в очень пыльной среде; согласно ГОСТу (1.1.005-88), предельно допустимые параметры микроклимата для научных лабораторий должны соответствовать определенным стандартам и регламентироваться соответствующим образом.

Рабочие зоны инженеров института соответствуют нормам шума не более 60 дБА, что удовлетворяет требованиям ГОСТ 12.1.012-90. Оценка воздействия

электромагнитных полей на человека также проводится в соответствии с действующими стандартами. Допустимые значения электромагнитных параметров определяются в соответствии с ГОСТ Р 54148-2010. Настоящий стандарт устанавливает методы определения параметров электрических и магнитных полей, создаваемых бытовым и аналогичным электрооборудованием на частотах до 300 ГГц.

Рабочие места инженеров-исследователей оборудованы 17-дюймовыми ЖК-мониторами *Samsung Sync Master 710N* с разрешением 1280x1024, частотой обновления 75 Гц , соответствующими стандартам TCO-99, обеспечивающими необходимый уровень электромагнитного излучения.

Электробезопасность лаборатории была обеспечена в соответствии с ГОСТ 12.4.026-2015. Комната, в которой проводились работы, относится к группе помещений, где риск поражения электрическим током невысок. Это обусловлено отсутствием возможности одновременного контакта человека с заземленной металлоконструкцией или металлическим корпусом электрооборудования, отсутствием токопроводящей пыли, а тип пола является токопроводящим в соответствии с ПУЭ 1.1.13.

Питание устройств осуществляется от сети переменного тока напряжением 220 В и имеет номинальное напряжение до 1000 В благодаря заземлению. Все устройства опломбированы для обеспечения электробезопасности сотрудников. Защитное заземление обеспечивается в соответствии с ПУЭ 1.7.55 для предотвращения несчастных случаев, вызванных прикосновением к корпусу в случае короткого замыкания активного кабеля в корпусе оборудования.

Таким образом, институт обеспечивает высокий уровень электробезопасности своих сотрудников путем надлежащего соблюдения инструкций и технических требований.

Согласно ГОСТ 12.1.030-81, компьютер подключается к сети переменного тока напряжением 220 вольт через трехконтактную вилку, третий контакт которой заземлен. При проведении исследований, эксплуатации,

ремонте и обслуживании компьютера необходимо соблюдать ряд правил. В частности, запрещается менять вилку любого электрооборудования, включенного в сеть.

Запрещается обслуживать или открывать корпус, когда он находится под напряжением, чтобы не произошел несчастный случай. Не рекомендуется работать с неизвестным электрооборудованием или если оборудование не заземлено надежно.

В лаборатории при проведении научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ следует учитывать возможность возникновения пожара. По статистике, наиболее распространенными причинами пожаров являются неисправное электрооборудование, неисправные электрические сети и несоблюдение правил эксплуатации и пожарной безопасности.

Для снижения вероятности возникновения пожара ГОСТ 12.1.044-2018 предусматривает различные меры. Например, решение о принятии автоматических выключателей прямого доступа, чтобы обеспечить возможность быстрого отключения оборудования в случае неисправности. Кроме того, огнетушители заряженного ОТВ весом 2 кг предназначены для пожаротушения технологического оборудования и комплектуются в соответствии с требованиями технических условий на него.

Аварийные выходы - еще одна мера безопасности, обеспечивающая быструю эвакуацию из лаборатории в случае пожара. Также можно организовать инструктаж по пожарной безопасности, чтобы предоставить полезную информацию о предотвращении пожара и правильном поведении в случае пожара.

Правильное освещение в лаборатории играет важную роль в работе инженеров-исследователей. Его реализация требует соблюдения гигиенических технических и экономических требований. Правильно спроектированное и реализованное освещение положительно влияет на работоспособность и самочувствие, а также направлено на повышение производительности труда.

Недостаточный уровень освещенности или недостаток естественного света может ухудшить зрительное восприятие и деятельность центральной нервной системы. Такие условия могут вызывать головные боли, раздражительность и снижение концентрации внимания. Это также может привести к снижению трудоспособности и плохому восприятию информации. С другой стороны, слишком яркое освещение на рабочем месте может вызывать блики и раздражающее воздействие на глаза. Неправильно направленный свет может создавать резкие тени и блики на мониторах, затрудняя восприятие информации.

В свете вышесказанного требуется обеспечить надлежащее освещение в лабораториях, это достигается за счет правильного расположения и использования естественного и искусственного света и соблюдения соответствующих стандартов. В результате можно повысить качество работы исследователей и добиться высокой производительности труда. При выборе системы освещения для рабочей зоны в лаборатории следует учитывать требования, указанные в СНиП 23 - 05-95. Одним из важных параметров является освещенность, которая должна соответствовать виду выполняемой зрительной работы. Однако, помимо этого, необходимо, чтобы освещенность во время работы была постоянной, распределение яркости на рабочей поверхности было равномерным, а светильники от осветительных приборов оптимально освещены. Важными факторами также являются электробезопасность, пожаробезопасность, простота использования, долговечность, экономичность и эффективность системы освещения.

При проведении исследований наноструктурированных материалов техникам-исследователям следует соблюдать осторожность при работе на экранах компьютеров и составлении научно-технической документации. Для удобства работы СНиП 23-05-95 рекомендует использовать в рабочей зоне составное освещение с освещенностью 200 люкс. Для поддержания постоянной яркости может быть установлено дополнительное искусственное освещение, которое можно использовать как в светлое время суток, так и в темных

помещениях. Одностороннее естественное освещение - лучший выбор для лабораторий. Однако при работе с экранами компьютеров следует помнить, что прямой солнечный и отраженный свет может утомлять глаза и ухудшать зрение. Поэтому, если возможно, экраны компьютеров следует располагать напротив окна. Если это невозможно, экран можно расположить под углом к окну, чтобы уменьшить влияние естественного излучения. В лабораториях стены окрашены в светло-бежевые цвета с высокой отражательной способностью, чтобы увеличить равномерность распределения

В лаборатории установлены люминесцентные лампы *G*13, они используются в качестве искусственных источников света с более рассеянным светом, чем точечные источники, такие как лампы накаливания и другие подобные лампы, *G*13 характеризуются высокой светоотдачей, длительным сроком службы (около 10 лет) и спектральным составом излучаемого света, близким к природному.

Для обеспечения соответствия системы освещения требованиям СНиП 23-05-95 расчет освещенности производится по точечному методу. Этот метод позволяет рассчитать точные значения освещенности в различных точках рабочей зоны, что дает возможность контролировать и регулировать уровень освещенности в зависимости от задач, выполняемых на рабочем месте.

Освещенность рабочего места (*E*) определяется уравнением:

$$E = \frac{F \cdot m \cdot e \cdot p \cdot Y}{1000 \cdot K_з \cdot h}, \quad (32)$$

где *F* – световой поток светильника, лм;

m – коэффициент, учитывающий отраженную составляющую света и действие удаленных светильников (1,1 – 1,15);

$e = e_1 + e_2 + \ldots + e_i$ – контрольная освещенность, которая будет, если в светильнике будет установлена лампа мощностью 1000 лк;

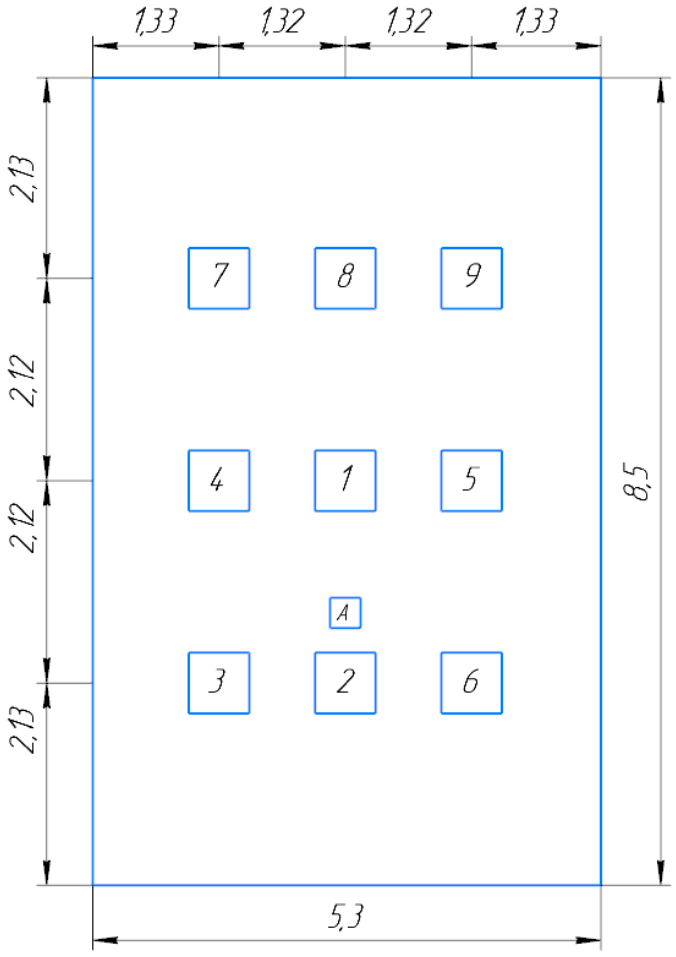
p – расстояние от плоскости опорной точки до плоскости проекции светильника, м;

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

K_3 – коэффициент определенного запаса, который учитывает запыление светильников и износ источников света (1,2-2);

h – высота подвеса светильников над расчётной поверхностью, м.

Лаборатория длиной 8,5 м, шириной 5,3 м и высотой 3,3 м в ней расположено девять источников света. Каждый светильник оснащен двумя люминесцентными лампами $G13$ (световой поток 1350 лм). Расположение светильников в комнате показано на рисунке 20.



A – контрольная точка; 1-9 светильники

Рисунок 24 – Расположение светильников в научно-исследовательской лаборатории:

Каждый светильник оснащен двумя люминесцентными лампами $G13$ со световым потоком 1350 лм, поэтому F = 2*1350 лм = 2700 лм

Коэффициент m = 1,2 для люминесцентных ламп учитывает отраженную составляющую света и влияние удаленных светильников. Поскольку лаборатория является малопыльным помещением, коэффициент безопасности светильника для люминесцентных ламп составляет $K_З$ = 1,2. Поверхность, на которую должно попадать освещение, находится на высоте 0,7 м от пола, поэтому высота светильников, подвешенных над рабочей поверхностью, составляет: h = 3,3 м – 0,7 м =2,6 м

Контрольная освещенность, полученная при установке ламп 1000 лк, может быть определена по следующей формуле:

$$e_i = \frac{I_\alpha \cos^3 \alpha_i}{h^2}, \quad (33)$$

где I_α – сила света по направлению к точке:

α_i – угол между поверхностью и лучом падающего света, определяемый выражением:

$$\alpha_i = arctg(\frac{d_i}{h}), \quad (34)$$

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

$$d_1 = d_2 = \sqrt{0.7^2 + 1^2} = 1.2 \text{ м}, \quad (35)$$

$$d_3 = d_4 = d_4 = d_6 = \sqrt{1.7^2 + 1^2} = 1.9 \text{ м}, \quad (36)$$

$$d_7 = d_8 = d_9 = \sqrt{3^2 + 1^2} = 3.1 \text{м}. \quad (37)$$

Определим α_i,:

$$a_1 = a_2 = arctg\left(\frac{1.2}{2.4}\right) = 27^\circ \quad (38)$$

$$a_3 = a_4 = a_6 = a_6 = arctg\left(\frac{1.9}{2.4}\right) = 39^\circ \quad (39)$$

$$a_7 = a_8 = a_9 = arctg\left(\frac{3.1}{2.4}\right) = 52^\circ \quad (40)$$

Определим e_i:

$$I_1=I_2=132 \text{ кд}, \quad (41)$$

$$I_3=I_4=I_5=I_6=93 \text{ кд}, \quad (42)$$

$$I_7=I_8=I_9==65 \text{ кд}, \quad (43)$$

$$e_1 = e_2 = \frac{132 \cdot \cos^3 27^\circ}{(2.4)^2} = 16.6 \text{ лк}, \quad (44)$$

$$e_3 = e_4 = e_5 = e_6 = \frac{93 \cdot \cos^3 39^\circ}{(2.4)^2} = 7.8 \text{ лк}, \quad (45)$$

$$e_7 = e_8 = e_9 = \frac{65 \cdot \cos^3 52^\circ}{(2.4)^2} = 2.6 \text{ лк}. \quad (46)$$

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

$$e = e_1 + e_2 + ... + e_9 = 76.1 \text{ лк} \quad (47)$$

Рассчитаем Y_i, по выражению:

$$Y_i = cos\theta + \frac{d_i}{h} sin\theta, \quad (48)$$

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

$$Y_1 = Y_2 = 0.5 \quad (49)$$

$$Y_3 = Y_4 = Y_5 = Y_6 = 0.8 \quad (50)$$

$$Y_7 = Y_8 = Y_9 = 1.3, \quad (51)$$

$$Y_{Общ} = Y_1 + Y_2 + ... + Y_9 = 2.6 \quad (52)$$

Исходя из вышесказанного, рассчитаем освещенность рабочего места исследователя по формуле. (32):

$$E = \frac{2700 \cdot 1.1 \cdot 76.1 \cdot 2.6}{1000 \cdot 1.2 \cdot 2.6} = 200 \text{ лк} \quad (53)$$

Результаты расчетов освещенности рабочей зоны инженера-исследователя показывают, что система освещения в лаборатории соответствует требованиям безопасности и комфорта на рабочем месте согласно СНиП 23-05-95. Проведенный на основании расчетов анализ позволяет сделать вывод, что условия труда в данном помещении соответствуют требованиям ГОСТ 12.1.003-83 и СНиП 23-05-95, предъявляемым к данному типу помещений. Помещение, в котором проводились работы, не классифицируется как помещение с высоким риском поражения электрическим током. Оборудование в данном помещении питается от сети переменного тока с промышленной частотой 50 Гц и напряжением 220 В. Меры пожарной безопасности приняты в соответствии с требованиями ГОСТ 12.1.004-91. К ним относятся выключатели прямого доступа, огнетушители ОХП-10 и ОХПВ-10 и запасные выходы для быстрой эвакуации в случае пожара.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе выполнения дипломной работы проведено исследование влияния размеров оболочки квантовых точек CdSe/ZnS на плотность квантовых состояний электрона в квантовой точке. Показано, что рост размера оболочки КТ при одном и том же характерном размере ядра влияет на квантовые состояния электронов в оболочке, на электрофизические и оптические свойства, что наряду с материалом и размером может рассматриваться как эффективный фактор управления.

Максимум распределения электронной плотности состояний квантовых точек с ядром/оболочкой CdSe/ZnS находится в ядре, поскольку в этом случае возбужденным электронам и дыркам энергетически выгодно находиться в полупроводниках с малой запрещенной зоной. Проведенные в данной работе расчеты подтверждают предположение о том, что спектры поглощения и фотолюминесценции квантовых точек первого типа определяются размером и материалом ядра.

В ходе выполнения, выявлено влияние природы и толщины оболочки на свойства квантовых точек, на эффективность люминесценции и широкое применения в оптоэлектронике.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Ф. Коберлинг, У. Колб, Г. Филипп, И. Потапова, Т. Баше и А. Мьюс, "Анизотропия флуоресценции и кристаллическая структура отдельных полупроводниковых нанокристаллов", *J. Phys*. хим. Б107, 7463-7471 (2003).

2. . Батталья Д., Ли Дж. Дж., Ван Ю., Пенг С. Коллоидные двумерные системы: квантовые оболочки и ямы CdSe // Angew. хим. Междунар. Эд.42, 5035-5039 (2003).

3. Б. О. Даббуси, Дж. Родригес-Вьехо, Ф. В. Микулек, Дж. Р. Гейне, Х. Маттусси, Р. Обер, К. Ф. Йенсен, М. Г. Бавенди, «Квантовые точки (CdSe) ZnS ядро-оболочка: синтез и характеристика ряда размеров высоколюминесцентныхнанокристаллитов», *J. Phys*. хим. Б101, 9463-9475 (1997).

4. Батталья Д., Ли Дж. Дж., Ван Ю., Пенг С. Коллоидные двумерные системы: квантовые оболочки и ямы CdSe // *Angew*. хим. Междунар. Эд.42, 5035-5039 (2003).

5. *Murray C. B., Norris D. J., Bawendi M. G. Synthesis and characterization of nearly monodisperseCdE (E = sulfur, selenium, tellurium) semiconductor nanocrystallites // Journal of the American Chemical Society.* – 1993. – V. 115. – *P*. 8706-8715

6. Козлова, М.В. Диссертация на соискание ученой степени кандидата физикоматематических наук. Особенности нелинейного поглощения при резонансном одно- и двухфотонном возбуждении экситонов в коллоидных квантовых точках CdSe/ZnS / М.В. Козлова. – Москва, 2015.

7. *Chakraborty I., Moulik S. – P. Preparation and characterization of PbS nanoparticles in AOT micellar medium // Journal of Nanoparticle Research*. – 2004. – V. 6. – P. 233-240.

8. *Medintz I., Mattoussi H. Quantum dot-based resonance energy transfer and its growing application in biology // Physical Chemistry Chemical Physics*. – 2018. – V. 11. – P.17-45.

9. https://science.kuzstu.ru/wpcontent/Events/Conference/HIHT/2018/HIHT/pages/Articles/137.pdf

10. A.I. Mikhailov, V.F. Kabanov, N.D. Zhukov, E.G. Glukhovskoy.Nanosystems: Phys., Chem., Math., 8 (5), 596 (2017).

11. Reprinted with permission from Dabbousi, B. O., J. Rodriguez-Viejo, F. V. Mikulec, J. R. Heine, H. Mattoussi, R. Ober, K. F. Jensen, and M. G. Bawendi,J.Phys. Chem. B, 101, 9463, 1997

12. В.П. Драгунов, И.Г. Неизвестный, В.А. Гридчин. Основы наноэлектроники (М., Логос, 2016)

ПРИЛОЖЕНИЕ А

(обязательное)

Задание на выпускную квалификационную работу

«Утверждаю»
Зав. кафедрой НиМЭ
Пронин И.А.
(фамилия, инициалы)
«09» июня 2023 г.

ЗАДАНИЕ
на бакалаврскую работу

1. Студент(ка) гр. 19ПД1 факультета информационных технологий и электроники
Направление подготовки 11.03.04 «Электроника и наноэлектроника»
Профиль Микроэлектроника и твердотельная электроника
Пронькин Александр Васильевич
(фамилия, имя, отчество)

2. Руководитель Игошина Светлана Евгеньевна
(фамилия, имя, отчество)

3. Тема бакалаврской работы Моделирование электронной структуры нанокристаллов на основе селенида кадмия и сульфида цинка
Тема утверждена приказом ПГУ № 359-п/с от «04» апреля 2023 г.

4. Техническое задание на бакалаврскую работу (вид работы: разработка, проектирование, исследование, и т.д., назначение, основные параметры, условия функционирования и т.д.)
Выбор и построение модели для исследования электронной структуры квантовых точек ядро/оболочка
Показать, что геометрические размеры оболочки будут влиять на плотность распределения вероятности собственного состояния сферической КТ
Моделирование энергетического спектра нанокристаллов на основе селенида кадмия и сульфида цинка.
Объект исследований: квантовые точки на основе селенида кадмия/сульфида цинка
Методика: модель сферически симметричной потенциальной ямы. Расчет волновых функций электрона и энергетического спектра в КТ проводим в модели «жестких» стенок

5. Объем и содержание основной части бакалаврекой работы

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

1. Общие сведения о квантовых точках
1.1 Особенности энергетического спектра частиц пониженной размерности
1.2 Модели квантовых точек ядро/оболочка
1.3 Технология получения квантовых точек ядро/оболочка

2. Квантование энергетического спектра носителей заряда в квантовых точках

2.1Модель прямоугольной потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками

2.2 Модель цилиндрической квантовой ямы

2.3 Модель сферической потенциальной ямы

3. Теоретическое изучение квантовых состояний и энергетического спектра квантовых точек на основе селенйда кадмия/сульфида цинка

3.1 Моделирование волновых функций электрона в КТ в модели «жестких»стенок

3.2 Теоретическое сравнение электронных состояний квантовых точек в зависимости от геометрических размеров ядра и оболочки

3.3 Анализ и сравнение энергетических спектров квантовых точек в зависимости от геометрических размеров ядра и оболочки

3.4 Выводы

4. Анализ влияния освещенности научно-исследовательской лаборатории на работу инженера-исследователя

5.2. Иллюстративная часть (перечень и содержание чертежей и слайдов презентации)

1.Титульный слайд	Слайд 1
2.Актуальность работы, цели, задачи	Слайд 2
3.Постановка задачи: квантовые точки на основе селенида кадмия/сульфида цинка	Слайд 3
4. Модели квантовых точек	Слайд 4, 5
5. Квантовые точки на основе селенида кадмия сульфида цинка	Слайд 6
6.Плотность распределения вероятности электронных состояний в квантовой точке CdSe /ZnS	Слайд 7, 8
7. Сравнение энергетического спектра квантовых точек в зависимости от размера ядра и оболочки	Слайд 9
8.Квантовые точки ядро оболочка(CdSe)/ZnS CdSe/ZnS	Слайд 10-13
9.Выводы	Слайд 14

6. Консультанты и содержание дополнительных разделов

6.1.

Консультант

7. Календарный график по выполнению бакалаврской работы

Наименование этапов работы	Объем работы	Срок выполнения	Подпись руководителя, консультанта
Общие сведения о квантовых точках	10%	09.06	
Квантование энергетического спектра носителей заряда в квантовых точках	20%	10.06	
Теоретическое изучение квантовых состояний и энергетического спектра квантовых точек на основе селенида кадмия/сульфида цинка	30%	11.06	
Анализ влияния освещенности научно-исследовательской лаборатории на работу инженера-исследователя	20%	13.06	
Иллюстративная часть	10%	14.06	
Оформление ВКР	10%	14.06	

Руководитель бакалаврской работы _____ Игошина С.Е.
подпись фамилия, инициалы

Дата выдачи задания « 09 » июня 2023 г.

Задание к исполнению принял _____ Пронькин А.В.
подпись фамилия, инициалы

« 09 » июня 2023 г.

Бакалаврскую работу к защите допустить

Декан факультета _____ Кревчик В.Д.
подпись фамилия, инициалы

« 19 » июня 2023 г.

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

(обязательное)

Заявление и протокол проверки ВКР на оригинальность в системе «Антиплагиат.ВУЗ»

Ректору Пензенского государственного университета Гулякову А.Д.
студента 4 курса ФИТЭ очной формы обучения
Пронькина Александра Васильевича

ЗАЯВЛЕНИЕ

Я, *Пронькин Александр Васильевич*, студент(ка) 4 курса очной формы обучения направления подготовки 11.03.04 Электроника и наноэлектроника, *Микроэлектроника и твердотельная электроника*, прошу провести проверку с использованием системы «Антиплагиат.ВУЗ» бакалаврской выпускной квалификационной работы на тему *«Моделирование электронной структуры нанокристаллов на основе селенида кадмия и сульфида цинка»*, выполненной мной самостоятельно, на содержание элементов плагиата.

Все прямые заимствования из печатных и электронных источников, а также из защищенных ранее выпускных квалификационных работ, кандидатских и докторских диссертаций имеют соответствующие ссылки.

Я ознакомлен(а) с действующим Стандартом университета «Выпускная квалификационная работа обучающихся по образовательным программам высшего образования - программам бакалавриата, программам специалитета и программам магистратуры», согласно которому обнаружение плагиата является основанием для недопуска ВКР к защите и отчисления из университета.

Пронькин А.В. 15.06.23
подпись студента дата

ВКР представлена на проверку 15.06.23 дата

Руководитель ВКР Игошина С.Е.

Протокол

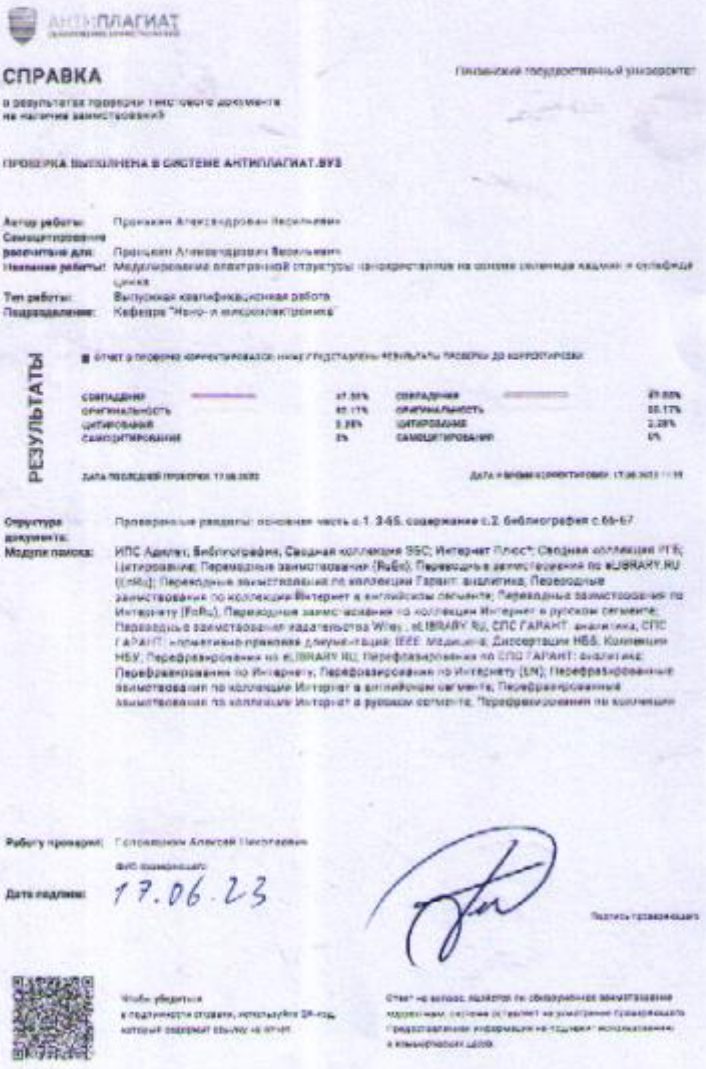
проверки на оригинальность в системе «Антиплагиат.ВУЗ» выпускной бакалаврской работы на тему «*Моделирование электронной структуры нанокристаллов на основе селенида кадмия и сульфида цинка*»

студента (ки) 4 курса *Пронькин Александр Васильевич*

направления подготовки 11.03.04 Электроника и наноэлектроника,

профиль «Микроэлектроника и твердотельная электроника»

Руководитель ВКР Игошина Светлана Евгеньевна



АНТИПЛАГИАТ

СПРАВКА

Пензенский государственный университет

о результатах проверки текстового документа на наличие заимствований

ПРОВЕРКА ВЫПОЛНЕНА В СИСТЕМЕ АНТИПЛАГИАТ.ВУЗ

Автор работы: Пронькин Александрович Васильевич
Самоцитирование рассчитано для: Пронькин Александрович Васильевич
Название работы: Моделирование электронной структуры нанокристаллов на основе селенида кадмия и сульфида цинка
Тип работы: Выпускная квалификационная работа
Подразделение: Кафедра "Нано- и микроэлектроника"

РЕЗУЛЬТАТЫ

Отчет о проверке скорректировался, ниже представлены результаты проверки до корректировки

СОВПАДЕНИЯ	47.55%	СОВПАДЕНИЯ	49.55%
ОРИГИНАЛЬНОСТЬ	50.17%	ОРИГИНАЛЬНОСТЬ	50.17%
ЦИТИРОВАНИЯ	2.28%	ЦИТИРОВАНИЯ	2.28%
САМОЦИТИРОВАНИЯ	0%	САМОЦИТИРОВАНИЯ	0%

Дата последней проверки: 17.06.2023 — Дата и время корректировки: 17.06.2023 11:11

Структура документа: Проверенные разделы: основная часть с.1-345, содержание с.2, библиография с.66-67

Модули поиска: ИПС Адилет; Библиография; Сводная коллекция ЭБС; Интернет Плюс*; Сводная коллекция РГБ; Цитирование; Переводные заимствования (RuEn); Переводные заимствования по eLIBRARY.RU (EnRu); Переводные заимствования по коллекции Гарант: аналитика; Переводные заимствования по коллекции Интернет в английском сегменте; Переводные заимствования по Интернету (EnRu); Переводные заимствования по коллекции Интернет в русском сегменте; Переводные заимствования издательства Wiley ; eLIBRARY.RU; СПС ГАРАНТ: аналитика; СПС ГАРАНТ: нормативно-правовая документация; IEEE; Медицина; Диссертации НББ; Коллекция НБУ; Перефразирования по eLIBRARY.RU; Перефразирования по СПС ГАРАНТ: аналитика; Перефразирования по Интернету; Перефразирования по Интернету (EN); Перефразированные заимствования по коллекции Интернет в английском сегменте; Перефразированные заимствования по коллекции Интернет в русском сегменте; Перефразирования по коллекции

Работу проверил: Гогольчин Алексей Николаевич
ФИО проверяющего
Дата подписи: 17.06.23
Подпись проверяющего

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

Отчет не может являться гарантией обнаружения заимствования программным системой, служит лишь средством, облегчающим предоставление информации для принятия решения человеком.

Руководитель ВКР

«17» 06 2023 год _____ Игошина С.Е.

подпись фамилия, инициалы

АНТИПЛАГИАТ

СПРАВКА

Пензенский государственный университет

о результатах проверки текстового документа
на наличие заимствований

ПРОВЕРКА ВЫПОЛНЕНА В СИСТЕМЕ АНТИПЛАГИАТ.ВУЗ

Автор работы: Пронькин Александрович Васильевич
Самоцитирование рассчитано для: Пронькин Александрович Васильевич
Название работы: Моделирование электронной структуры нанокристаллов на основе селенида кадмия и сульфида цинка
Тип работы: Выпускная квалификационная работа
Подразделение: Кафедра "Нано- и микроэлектроника"

РЕЗУЛЬТАТЫ

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

СОВПАДЕНИЯ	47.55%	СОВПАДЕНИЯ	47.55%
ОРИГИНАЛЬНОСТЬ	50.17%	ОРИГИНАЛЬНОСТЬ	50.17%
ЦИТИРОВАНИЯ	2.28%	ЦИТИРОВАНИЯ	2.28%
САМОЦИТИРОВАНИЯ	0%	САМОЦИТИРОВАНИЯ	0%

ДАТА ПОСЛЕДНЕЙ ПРОВЕРКИ: 17.06.2023

ДАТА И ВРЕМЯ КОРРЕКТИРОВКИ: 17.06.2023 11:35

Структура документа: Проверенные разделы: основная часть с.1, 3-65, содержание с.2, библиография с.66-67

Модули поиска: ИПС Адилет, Библиография, Сводная коллекция ЭБС, Интернет Плюс*, Сводная коллекция РГБ, Цитирование, Переводные заимствования (RuEn), Переводные заимствования по eLIBRARY.RU (EnRu), Переводные заимствования по коллекции Гарант: аналитика, Переводные заимствования по коллекции Интернет в английском сегменте, Переводные заимствования по Интернету (EnRu), Переводные заимствования по коллекции Интернет в русском сегменте, Переводные заимствования издательства Wiley, eLIBRARY.RU, СПС ГАРАНТ: аналитика, СПС ГАРАНТ: нормативно правовая документация, IEEE, Медицина, Диссертации НББ, Коллекция НБУ, Перефразирования по eLIBRARY.RU, Перефразирования по СПС ГАРАНТ: аналитика, Перефразирования по Интернету, Перефразирования по Интернету (EN), Перефразированные заимствования по коллекции Интернет в английском сегменте, Перефразированные заимствования по коллекции Интернет в русском сегменте, Перефразирования по коллекции

Работу проверил: Головашкин Алексей Николаевич

ФИО проверяющего

Дата подписи: 17.06.23

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 В

(обязательное)

Презентация ВКР

ФГБОУ ВО «ПЕНЗЕНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

ОТЗЫВ

РУКОВОДИТЕЛЯ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

Бакалаврская работа на тему Моделирование электронной структуры нанокристаллов на основе селенида кадмия и сульфида цинка

Выполнена студентом (кой) Пронькиным Александром Васильевичем
(фамилия, имя, отчество)

Факультет информационных технологий и электроники
кафедра Нано- и микроэлектроника группа 19ПД1
Направление подготовки, профиль Электроника и наноэлектроника, микроэлектроника и твердотельная электроника
Квалификация бакалавр

Руководитель Игошина С.Е. (фамилия, имя, отчество) к. ф. – м. н., доцент кафедры «НиМЭ» (должность и место работы)

Качества выпускника, выявленные в ходе выполнения бакалаврской работы

При работе над выпускной квалификационной работой Пронькин А.В. показал удовлетворительное знание предмета, умение пользоваться научно-технической литературой, проявил самостоятельность при решении конкретных научно-исследовательских задач, соответствующие квалификационной характеристике. Пронькин А.В. изучил особенности квантовых состояний частиц в системах пониженной размерности и особенности квантования энергетического спектра носителей заряда в квантовых точках типа ядро/оболочка и овладел профессиональными технологиями в данной области. Полученные знания он затем применил на практике для теоретического изучения влияния геометрических размеров оболочки на плотность распределения вероятности собственного состояния сферической КТ. Расчетно-пояснительная записка выполнена в соответствии с техническим заданием и требованиями к бакалаврской работе.

Заключение
ВКР выполнена грамотно, в соответствии с техническим заданием и заслуживает оценки "хорошо", а Пронькин А.В. квалификации бакалавра по направлению «Электроника инаноэлектроника»

«19» июня 20 г.

Руководитель (подпись) Игошина С.Е. (фамилия, инициалы)

Моделирование электронной структуры нанокристаллов на основе селенида кадмия и сульфида цинка

Студент группы 19ПД1 Пронькин А.В.

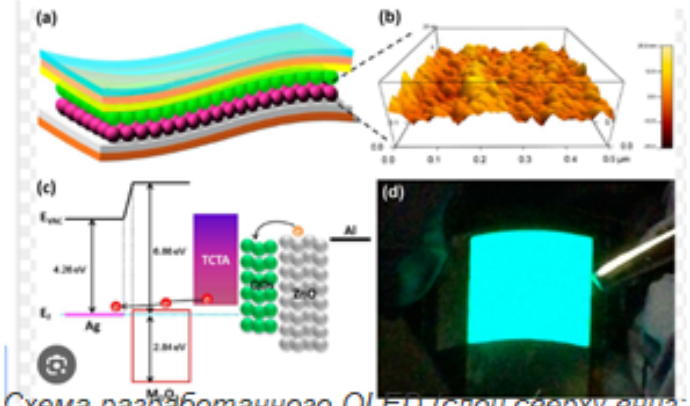
Руководитель: доцент,

к.ф.-м.н.Игошина С.Е.

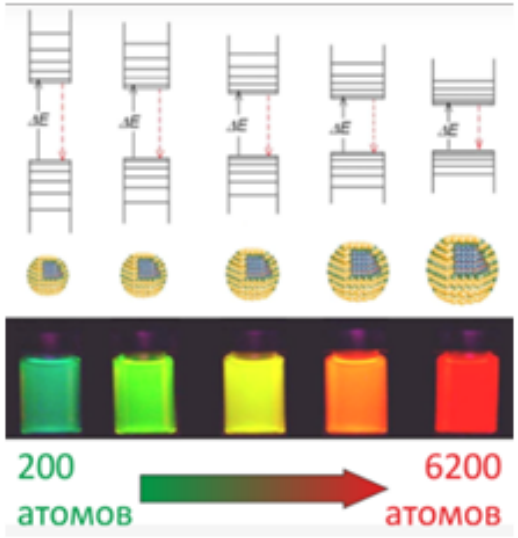
Актуальность работы

Обусловлена:

- Влиянием размера ядра и оболочки квантовой точки на квантовые состояния электронов и, скорее всего, на электрофизические и оптические свойства, что наряду с материалом и размером КТ может рассматриваться как эффективный фактор управления;



(a) Схема разработанного QLED (слои сверху вниз: полимерная плёнка из Каптона/Al/ZnO наночастицы/CdSe-CdS-ZnS квантовые точки/полимер TCTA/MoO_3/Ag), (b) AFM-изображение полученной плёнки, (c) диаграмма электронных уровней и (d) работающий QLED



Флуоресценция CdSe/ZnS нанокристаллов разных размеров

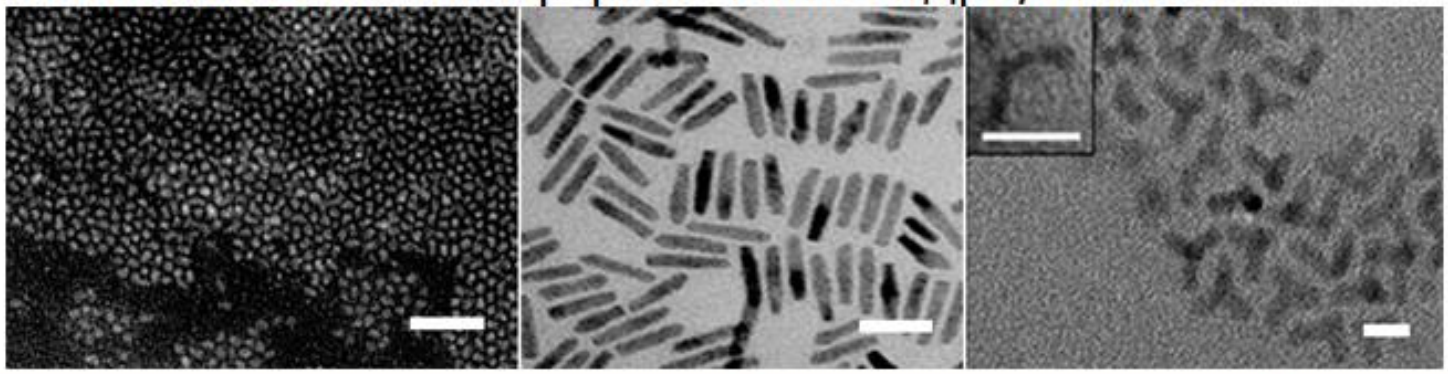
Постановка задачи

- **Объект исследования:**

Квантовые точки на основе селенида кадмия/сульфида цинка (CdSe/ZnS).

Цель проведенной работы:

Показать, что геометрические размеры квантовой точки будут влиять на плотность распределения вероятности квантовых состояний сферической КТ ядро/оболочка

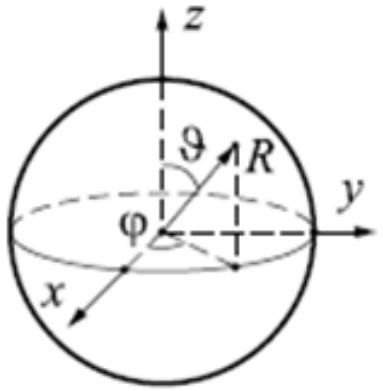


Reprinted with permission from Dabbousi, B. O., J. Rodriguez-Viejo, F. V. Mikulec, J. R. Heine, H. Mattoussi, R. Ober, K. F. Jensen, and M. G. Bawendi, J. Phys. Chem. B, 101, 9463, 1997

Модель сферически симметричной потенциальной ямы

- Рассмотрим сферически симметричную квантовую точку радиуса a

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \qquad V(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0, & \mathbf{r} \in \mathrm{QD}, \\ \infty, & \mathbf{r} \notin \mathrm{QD}. \end{cases}$$



$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{\hat{l}^2}{r^2}\right]\psi(r,\vartheta,\varphi) = E\psi(r,\vartheta,\varphi)$$

$$\hat{l}^2 = -\frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}$$

$$\psi_{nlm}(r,\vartheta,\varphi) = \sqrt{\frac{2}{R^3}}\frac{j_l(\xi_{nl}r/R)}{j_{l+1}(\xi_{nl})}Y_{lm}(\vartheta,\varphi), \qquad E_{nl} = \frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{\xi_{nl}^2}{R^2}$$

	CdSe	ZnS
Ширина запрещенной зоны, эВ	1.72	3.5-3.7

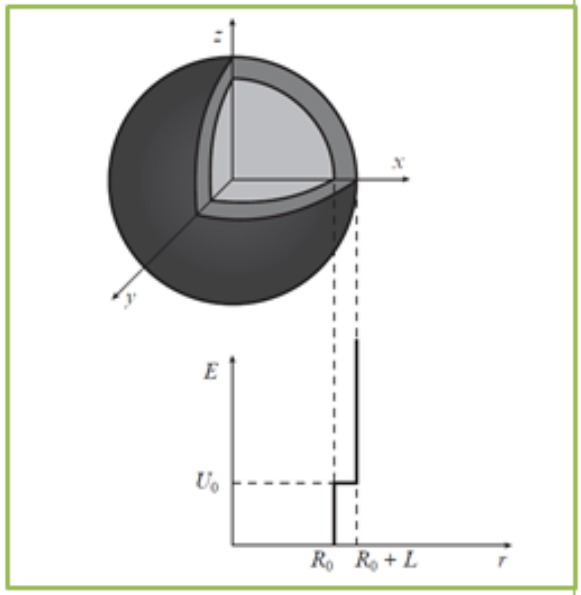
Модель сферически симметричной потенциальной ямы ядро/оболочка типа I

- Постановка задачи: Физические свойства КТ зависят от движения электрона, описываемого квантово-механическим уравнением Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m(r)}\nabla^2\psi + U(r)\psi = E\psi$$

$$U(r) = \begin{cases} 0, & r \leqslant R_0, \\ U_0, & R_0 < r \leqslant R_0 + L, \\ \infty, & r > R_0 + L, \end{cases}$$

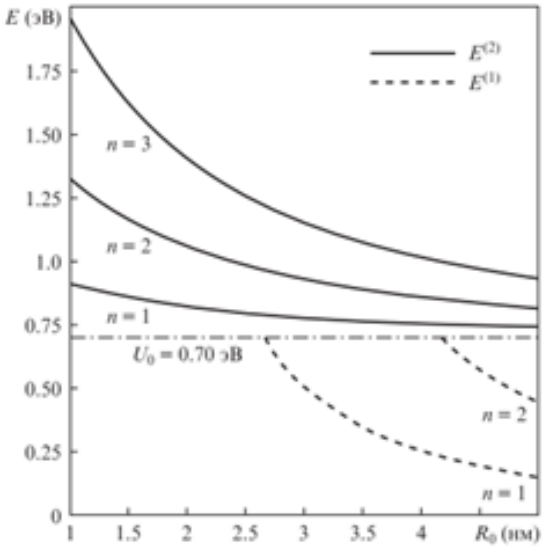
$$m(r) = \begin{cases} m_1^*, & R \leqslant R_0, \\ m_2^*, & R_0 < r \leqslant R_0 + L \end{cases}$$



S.E. Igoshina, A.A. Karmanov, Features of the electronic spectrum in a type-I core – shell quantum dot Quantum Electronics//Kvantovaya Elektronika and Turpion Ltd ***43*** *(1) 76 – 78 (2013).*

Квантовые точки на основе селенида кадмия/сульфида цинка

$$m_{CdSe} = 0.13m_0,\ m_{ZnS} = 0.28m_0$$



$$\psi(r,\theta,\phi) = \begin{cases} C_1 j_l(k_1 r)\, Y_{lm}(\theta,\phi), & r \leqslant R_0, \\ C_1 \dfrac{j_l(k_1 R_0)}{j_l(k_2 R_0)} j_l(k_2 r)\, Y_{lm}(\theta,\phi), & R_0 < r \leqslant R_0 + L \\ 0, & r > R_0 + L, \end{cases}$$

$$C_1 = \frac{j_l(k_2 R_0)\sqrt{2}}{\sqrt{R_0^3 i_l^2(k_2 R_0) a_l + i_l^2(k_1 R_0)[(R_0 + L)^3 b_l - R_0^3 c_l]}}$$

$$k_1^2 = \frac{2m_1^*}{\hbar^2}E,\ k_2^2 = \frac{2m_2^*}{\hbar^2}(E - U_0)$$

Решение уравнения Шредингера
Существует только для множества значений энергии
и представляет собой множество волновых функци $\bar{E}_n$
с квантовыми числами n

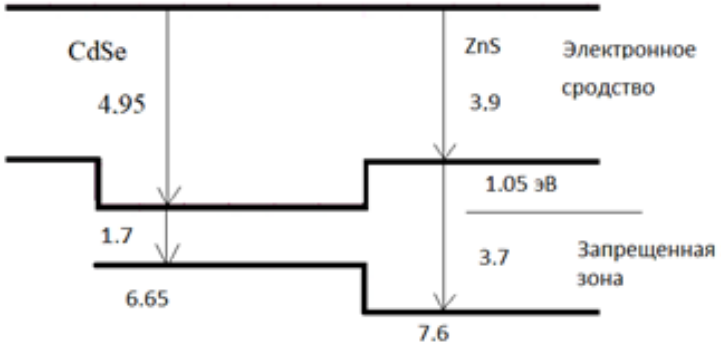
r_n	En
2.9	0.70
3.0	0.6566
3.1	0.6195
3.2	0.5768
3.3	0.5418
3.4	0.5096
3.5	0.4816
3.6	0.4564
3.7	0.4312
3.8	0.4081
3.9	0.3885
4.0	0.3689
4.1	0.3514
4.2	0.3346
4.3	0.3192
4.4	0.3045
4.5	0.2912
4.6	0.2793
4.7	0.2674
4.8	0.2562
4.9	0.2485
5.0	0.2366
5.1	0.2275
5.2	0.2184
5.3	0.2107
5.4	0.2044
5.5	0.1953
5.6	0.1883
5.7	0.182
5.8	0.1771
5.9	0.1701
6.0	0.1645

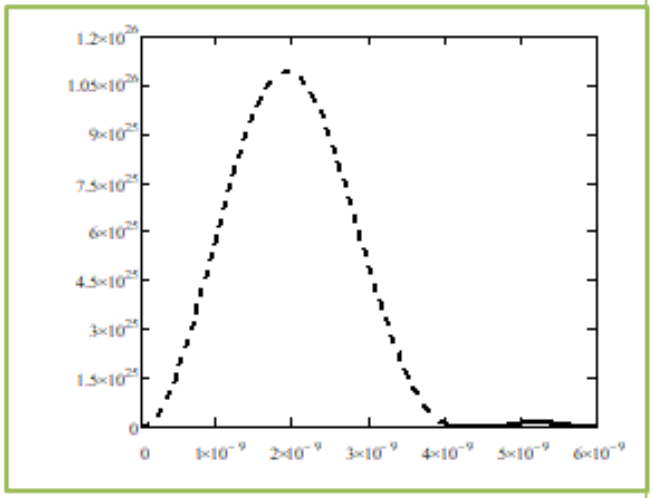
Обобщенный энергетический спектр электронов в квантовой точке «ядро/оболочка» типа I на основе CdSe/ZnS (l=1)

S.E. Igoshina, A.A. Karmanov, Features of the electronic spectrum in a type-I core – shell quantum dot Quantum Electronics//Kvantovaya Elektronika and Turpion Ltd43 (1) 76 – 78 (2013).

Плотность распределения вероятности электронных состояний в квантовой точке CdSe/ZnS

Картина волновой функции для основного состояния электрона в КТ соответствует распределению электронов в квантовой точке типа ядро/оболочка типа I. Максимум распределения электронной плотности находится в ядре, т.к. в этом случае возбужденным электронам и дыркам энергетически удобно находиться в полупроводнике с малой шириной запрещенной зоны.

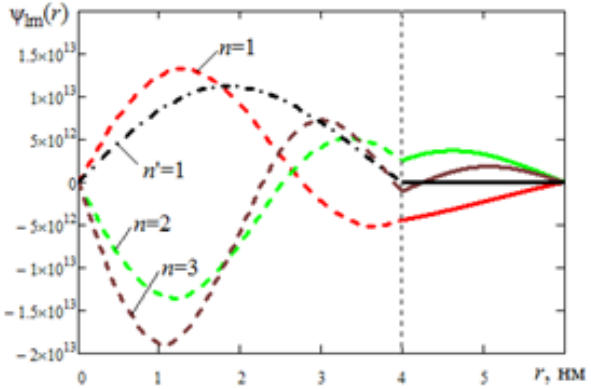


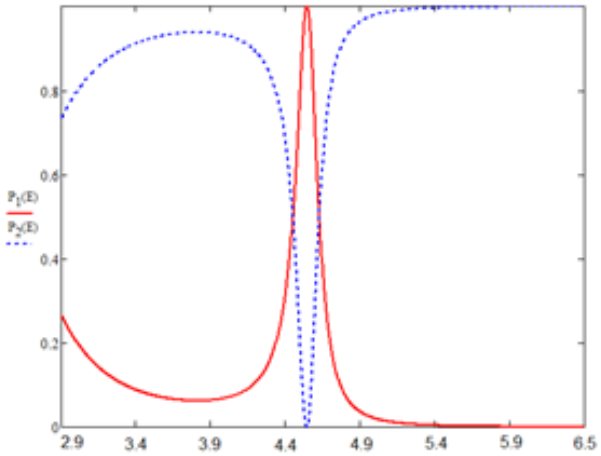


Моделирование волновых функций в квантовых точках CdSe/ZnS

Волновые функции электрона в квантовой точке «ядро/оболочка» типа I: R0=4нм; L=2 нм; l=1; m=1

Волновые функции электрона в квантовой точке «ядро/оболочка» типа I: R0=4нм; L=2нм; l=1; m=1
Волновые функции электронов на границе раздела ядро/оболочка КТ непрерывны и обращается в ноль на границе раздела оболочка/внешняя среда





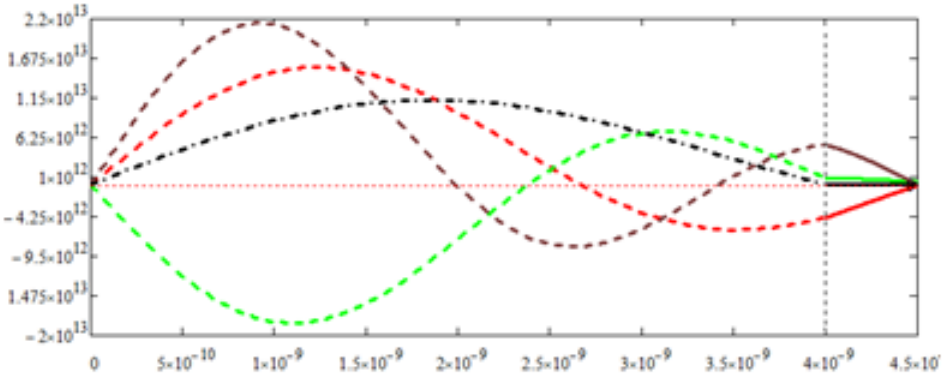
Размер квантовой точки, нм
Красным цветом обозначена плотность распределения вероятности в ядре КТ, синим в оболочке

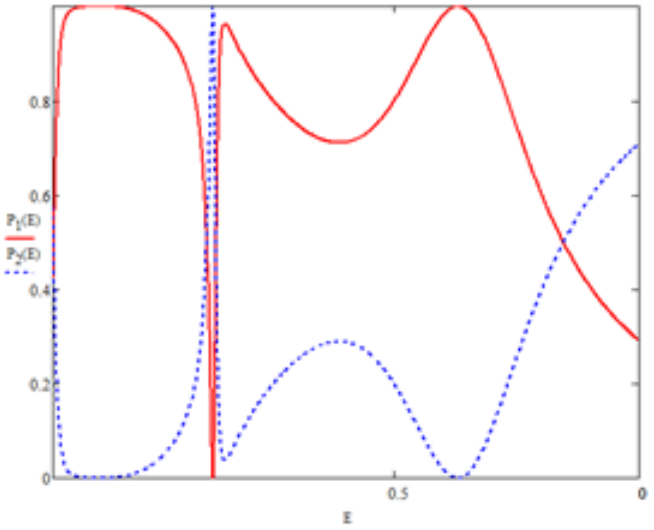
С учетом множества значений энергии $\bar{E}_n$ рассчитаем вероятность распределения квантовых состояний P(r) в квантовой тс *CdSe/ZnS*

Игошина, С. Е. Волновые функции электрона в квантовых точках «ядро/оболочка» типа I / С. Е. Игошина, А. А. Карманов. — Текст : непосредственный // Молодой ученый. — 2014. — № 8 (67). — С. 41-45.

Моделирование волновых функций и плотности квантовых состояний в квантовых точках CdSe/CdS и CdSe/ZnS

Волновые функции электрона в квантовой точке «ядро/оболочка» типа I: R0=4нм; L=0.5 нм ; l=1; m=1

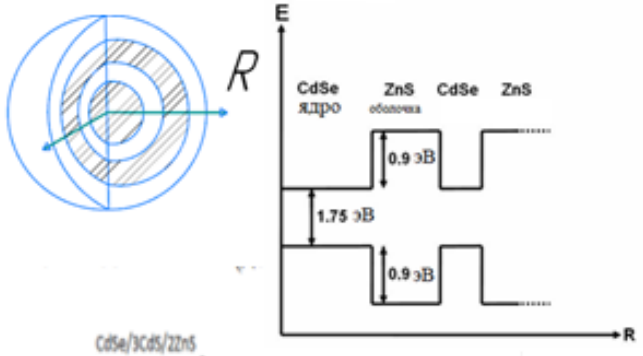


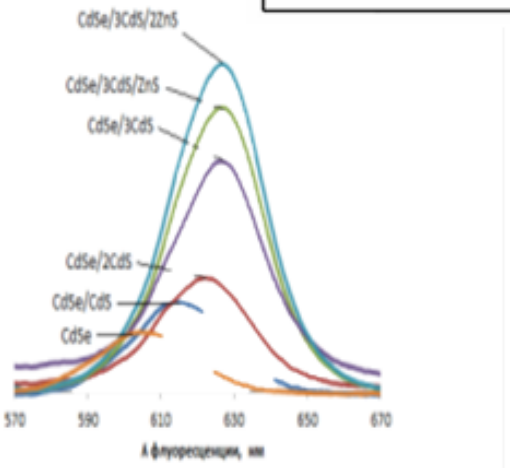


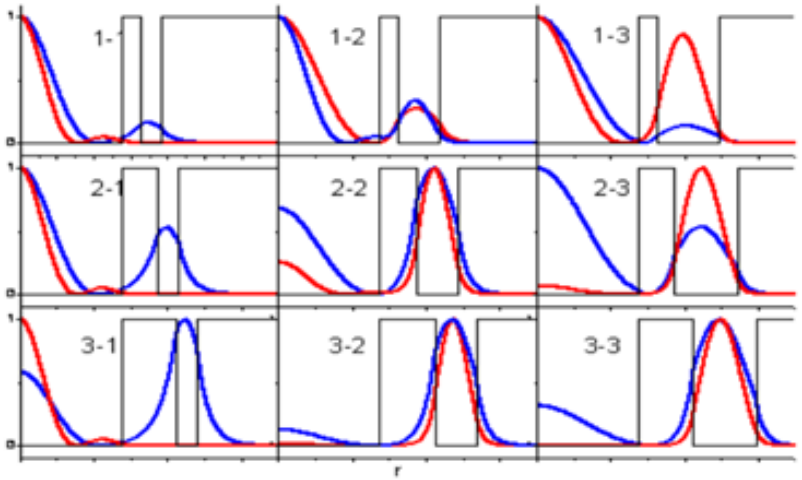
Сравнение энергетического спектра квантовых точек в зависимости от размера ядра и оболочки

- Максимум распределения электронной плотности состояний для квантовой точки типа ядро/оболочка CdSe/ZnS находится в ядре, т.к. в этом случае возбужденным электронам и дыркам энергетически удобно находиться в полупроводнике с малой шириной запрещенной зоны
- Анализ представленных зависимостей показывает, что вариация толщины оболочки в КТ ядро/оболочка позволяет варьировать вероятность нахождения электрона в ядре и оболочке, соответственно. При этом управлением размером ядра при фиксированной толщине оболочки можно добиться преимущественного нахождения электрона только в ядре или только в оболочке, что перспективно для квантовых вычислений.

Квантовые точки ядро оболочка(CdSe)/ZnS/CdSe/ZnS







Sedat Nizamoglu and Hilmi Volkan Demir Onion-like (CdSe)ZnS/CdSe/ZnS quantum-dot-quantum-well heteronanocrystals for investigation of multi-color emission // 17 March 2008 / Vol. 16, No. 6 / OPTICS EXPRESS 3515

Квантовые точки ядро/оболочка(CdSe)/ZnS/CdSe/ZnS

- Создание наночастиц типа ядро-оболочка позволяет не только уменьшить вклад поверхностных состояний в синтезируемых нанокристаллах, но и менять оптические свойства квантовых точек.
- Изменяя толщину оболочек ZnS и CdSe, можно настроить локализацию носителей с режима квантовых точек типа 1 на режим квантовых точек типа 2 и наоборот
- Использование оболочки позволяет модифицировать поверхность, улучшать эффективность излучения, стабильность.

Применение КТ CdSe/ZnS

- КТ CdSe/ZnS ядро/оболочка применяются как люминесцентные метки в твёрдофазном иммуноанализе (fluorescence-linked immunosorbent assay FLISA) для определения аналитов в различных объектах, в частности: сульфаметазина и энрофлоксацина в курином мясе, хлорпирифоса в питьевой воде, поверхностных белков Listeria monocytogenes, одновременного определения препаратов дексаметазона, гентамицина, клоназепама, ацетата медроксипрогестерона и цефтиофура.
- КТ применяются в качестве зондов сканирующего микроскопа, телевизоры серии QLED, полупроводниковых лазерах, в солнечных батареях, системах многоцветного кодирования на основе квантовых точек, маркера в медицинских и биологических исследованиях

E. Tully, S. Hearty, P. Leonard, R. O'Kennedy. // Int. J. of Biol. Macromolecules. 2006. V. 39. P. 127 – 134.
C.F. Peng, Z.K. Li, Y.Y. Zhu, W. Chen, Y. Yuan, L.Q. Liu, Q.S. Li, D.G. Xu, R.R. Qiao, L.

Выводы

- Рассмотрена теоретическая модель для изучения влияния на свойства квантовых точек, помимо состава, размера ядра и оболочки квантовой точки ядро/оболочка.
- Показано, что размеры ядра и оболочки КТ будут заметно влиять на электронный спектр рассматриваемых объектов и, на электрофизические и оптические свойства, что наряду с материалом и размером может рассматриваться как эффективный фактор управления.

Спасибо за внимание!