

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

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

Кафедра
«Нано- и микроэлектроника»
(наименование)

Магистерская программа

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

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

на тему

Теоретическое изучение влияния формы квантовых точек на эффективность
преобразования энергии в солнечных элементах.

Студент 23ПДм1
номер группы

И. 03.06.25
подпись, дата

Пронькин Александр Васильевич
ФИО полностью

Научный руководитель
Доцент, ПГУ
должность, наименование организации

Игошина С.Е.
подпись, дата

Игошина С.Е.
инициалы, фамилия

Рецензент
начальник отдела, АО
«ПО «Электроприбор»
должность, наименование организации

6.06.25 Михаев
подпись, дата

Комиссаров А.В.
инициалы, фамилия

Нормоконтролер ст. преподаватель
должность

Рыжова Т.Н.
подпись, дата

Рыжова Т.Н.
инициалы, фамилия

Работа допущена к защите в ГЭК (протокол заседания кафедры от 9.06.25 № 10)
Заведующий кафедрой НнМЭ

Заведующий кафедрой, ПГУ
должность, наименование организации

9.06.25
подпись, дата

Пронин И.А.
инициалы, фамилия

Работа защищена с оценкой хор. (протокол ГЭК от 18.06.25 № 5)
Секретарь ГЭК

Доцент, ПГУ
должность, наименование организации

18.06.25
подпись, дата

Вольсков А.А.
инициалы, фамилия

2025

год выпуска

РЕФЕРАТ

Пояснительная записка состоит из 87 страниц, 24 рисунков, списка использованных источников из 20 наименований и 3-х приложений.

Ключевые слова: квантовая точка, солнечный элемент, моделирование электронной структуры, энергетический спектр.

Цель: теоретически изучить влияние формы и размера квантовых точек на эффективность преобразования энергии в солнечных элементах.

Задачи:

1. Теоретически показать, что регулируя размер и состав квантовых точек, можно спроектировать *QDSC* для захвата фотонов на различных длинах волн, тем самым повышая общую эффективность поглощения света.
2. Моделирование фотоэлектрических свойств наноструктурированных пленок *ZnO* в целях дальнейшего использования таких наноструктур в солнечных элементах.

Актуальность: Тема влияния формы квантовых точек (КТ) на эффективность преобразования энергии в солнечных элементах (СЭ) является чрезвычайно актуальной и привлекает пристальное внимание ученых и инженеров по всему миру. Квантовые точки позволяют точно настраивать запрещенную зону для соответствия спектру падающего света. Эта настраиваемость позволяет *QDSC* (солнечный элемент с квантовыми точками) поглощать более широкий диапазон энергий фотонов, оптимизируя использование солнечного спектра.

Объект исследования: солнечные элементы, сенсibilизированные квантовыми точками (*QDSSC*).

Предмет исследования: структурные, электрофизические и физико-химические свойства квантовых точек

СОДЕРЖАНИЕ

Введение.....	4
1 Общие сведения о квантовых точках.....	7
1.1 Особенности энергетического спектра частиц	7
1.2 История открытия	9
1.3 Солнечные элементы на основе квантовых точек.....	10
2 Теоретическое исследование волновых функций электрона в квантовой точке	16
2.1 Моделирование внутризонной структуры КТ методом внутризонной спектроскопии	16
2.2 Моделирование волновых функций электрона в КТ при различных типах потенциала энергетического барьера.....	25
2.3 Результаты моделирования волновых функций КТ	32
3 Особенности использования КТ в солнечных элементах.....	38
3.1 Обзор литературных данных	38
3.2 Влияние формы КТ на эффективность СЭ.....	46
3.3 Исследование перспектив применения квантовых точек в солнечных элементах	52
3.4 Моделирование волновых функций электрона в квантовой точке сферической структуры «ядро/оболочка» на основе <i>AlAs</i> / <i>GaAs</i>	57
3.5 Спектроскопия тонких пленок оксида цинка.....	66
4 Анализ влияния освещенности научно-исследовательской лаборатории на работу инженера-исследователя.....	67
Заключение	81
Список использованных источников	82
Приложение А Задание на Выпускную квалификационную работу.....	84
Приложение Б Заявление и протокол проверки ВКР на оригинальность в системе «Антиплагиат.ВУЗ»	88
Приложение В Презентация ВКР	90

ВВЕДЕНИЕ

На фоне ускоряющегося темпа мирового развития и сопутствующего всплеска спроса на устойчивые энергетические решения значительные исследовательские усилия направляются на продвижение передовых технологий для систематического производства, управления и хранения энергии [1]. Фотоэлектрические (PV) системы, которые используют солнечное излучение для выработки электроэнергии, находятся на переднем крае этих технологических достижений. Солнечная энергия является примером идеального возобновляемого ресурса благодаря своей огромной доступности, экологической устойчивости и неисчерпаемости [2]. Несмотря на эти внутренние преимущества, высокие первоначальные капитальные затраты, связанные с PV-системами, исторически препятствовали их широкому внедрению. Устранение этого барьера требует согласованного внимания к снижению затрат на изготовление при одновременном повышении эффективности устройств [3]. Этот двойной подход снижения затрат и повышения эффективности имеет решающее значение для развития практичных и экономически жизнеспособных солнечных энергетических систем. Текущие усилия по исследованиям и разработкам согласованы для достижения этих целей, с общей целью сделать солнечную энергию более доступной и экономически целесообразной в глобальном масштабе [4,5]. Разрешая парадокс соотношения затрат и эффективности, фотоэлектрические технологии готовы сыграть ключевую роль в устойчивом удовлетворении мирового спроса на энергию, тем самым внося значительный вклад в смягчение энергетических кризисов и решение экологических проблем.

Солнечные элементы на квантовых точках (QDSC) представляют собой новаторское достижение в области фотоэлектрических технологий, использующее уникальные оптоэлектронные свойства квантовых точек (КТ) для достижения превосходной эффективности преобразования солнечной энергии. Квантовые точки представляют собой наноразмерные полупроводниковые кристаллы с диаметром от 2 до 10 нм. Эти

нанокристаллы демонстрируют выраженные эффекты квантового ограничения, что приводит к зависящим от размера изменениям их электронных и оптических свойств. Эта способность системы позволяет точно модулировать спектры поглощения и уровни энергии, потенциально превосходя ограничения эффективности традиционных солнечных элементов на основе кремния и позволяя разрабатывать экономически эффективные и универсальные фотоэлектрические приложения [6].

Квантовые точки являются неотъемлемой частью передовых нанотехнологий благодаря своим замечательным химическим и физическим свойствам, которые выходят за рамки свойств обычных полупроводников. Их применение охватывает широкий спектр технологий, включая, помимо прочего, солнечные элементы, транзисторы, диодные лазеры, светодиоды (*LED*), биомедицинские устройства, струйную печать, очистку сточных вод, центрифугирование и квантовые вычисления [7]. Квантовые точки, обычно характеризующиеся диаметром от 2 до 10 нм (включая 10–50 атомов), представляют собой полупроводниковые материалы, которые эффективно преобразуют падающий свет в спектр видимых цветов. Более крупные КТ (≥ 5 нм) излучают фотоны с более длинными длинами волн (от красного до оранжевого), тогда как меньшие КТ (≤ 3 нм) излучают фотоны с более короткими длинами волн (от синего до зеленого). Эта настраиваемость длины волны возникает из-за эффекта квантового ограничения, при котором размер КТ влияет на уровни энергии, доступные для рекомбинации электронов и дырок. Более крупные КТ с более узкими запрещенными зонами демонстрируют излучение фотонов с более низкой энергией (с более длинной волной), в то время как более мелкие КТ с более широкими запрещенными зонами испускают фотоны с более высокой энергией (с более короткой длиной волны). Достижение точности в контроле состава и однородности размера КТ имеет решающее значение для настройки их оптических свойств. Эта возможность облегчает проектирование КТ с определенными длинами волн излучения, значительно повышая их

полезность в передовых технологиях отображения, биомедицинской визуализации и широком спектре других технологических приложений [8,9].

Актуальность данной темы заключается в том, что тема влияния формы квантовых точек (КТ) на эффективность преобразования энергии в солнечных элементах (СЭ) является чрезвычайно актуальной и привлекает пристальное внимание ученых и инженеров по всему миру. Квантовые точки позволяют точно настраивать запрещенную зону для соответствия спектру падающего света. Эта настраиваемость позволяет *QDSC* поглощать более широкий диапазон энергий фотонов, оптимизируя использование солнечного спектра.

Солнечные элементы на квантовых точках (*QDSC*) представляют собой значительный прогресс по сравнению с обычными полупроводниковыми солнечными элементами, устраняя ограничения, связанные с поглощением фотонов и термализацией носителей. Они используют уникальные свойства квантовых точек (*QD*) для преодоления этих ограничений, такие как проектирование и настройка запрещенной зоны, настраиваемое поглощение, улучшенное поглощение света.

1 Общие сведения о квантовых точках

1.1 Особенности энергетического спектра частиц

Квантовая точка представляет собой участок проводника или полупроводника, в котором носители заряда (электроны или дырки) ограничены в пространстве по всем трём плоскостям. История квантовых точек началась с их открытия в 1980 году русским физиком Екимовым. Существенный прогресс в области науки и технологий, связанных с квантовыми точками, был достигнут после 1984 года, когда Луис Брус установил зависимость между размером квантовых точек и шириной запрещенной зоны для полупроводниковых наночастиц. Однако прошло почти десять лет, прежде чем были достигнуты значительные успехи в исследованиях квантовых точек, включая успешный синтез коллоидных квантовых точек. Малые размеры квантовых точек приводят к очень высокому соотношению атомов на поверхности к объему. Также стоит отметить, что энергетический спектр квантовых точек является дискретным, а расстояние между энергетическими уровнями носителей заряда зависит от их размера. Результатом этой особенности является то, что КТ имеют четко определенные поверхностные явления (рисунок 1.1).

Квантовая точка должна быть достаточно маленькой, чтобы проявились квантовые эффекты. Это происходит, когда кинетическая энергия электрона значительно превышает все остальные энергетические уровни, в первую очередь превышая температуру, измеренную в энергетических единицах.

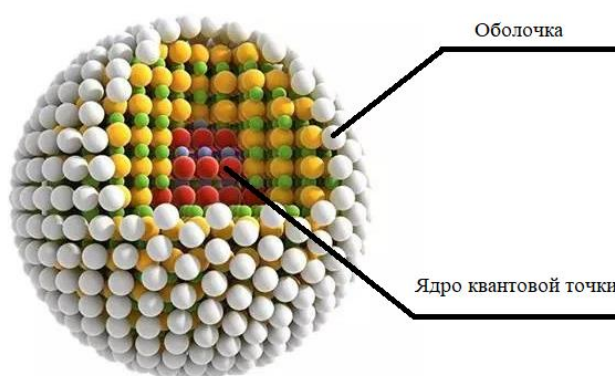


Рисунок 1.1 - Форма квантовой точки

Квантовый мир функционирует по своим уникальным законам, которые отличаются от тех, что действуют в привычном макромире. То, что верно для макромира, не обязательно применимо к квантовому, и наоборот. Когда атомы объединяются в макроскопические объёмы, у веществ появляются знакомые и интуитивно понятные характеристики, такие как вес, плотность, электропроводность и отражающая способность. Однако, если мы опустимся до уровня отдельного атома и попытаемся найти те же свойства, это становится бессмысленным, так как искомые признаки исчезают, уступая место совершенно другим, не интуитивным характеристикам.

Пока размеры системы не превышают нескольких нанометров и количество атомов остаётся небольшим, мы имеем дело с квантовым миром. Как только размеры и количество атомов значительно увеличиваются, квантовые законы заменяются привычными законами макромира, которые мы изучали на уроках физики и химии. В макромире все процессы можно наблюдать и подтверждать с помощью наглядных экспериментов, тогда как в квантовой механике понимание возможно только через сложные математические расчёты.

В макромире вещества обладают определёнными свойствами и подчиняются законам физики и химии благодаря уникальным квантовым характеристикам их атомов на квантовом уровне, которые следуют особым квантовым законам. Нанотехнологии занимаются изменением свойств атомов на этом уровне, чтобы создавать вещества и материалы с новыми, ранее не встречавшимися макрохарактеристиками.

Квантовые точки находятся на границе двух миров. Тем не менее, их необычные свойства обусловлены законами квантовой механики. Интересно, что электронные характеристики этих частиц зависят от их размера и формы. Изменяя эти параметры, можно контролировать их свойства, такие как цвет и способность преобразовывать свет в электричество.

Квантовые точки представляют собой уникальные структуры, которые сочетают в себе черты, как макромира, так и квантового мира, что позволяет

использовать их в практических приложениях. Именно за это трое ученых получили Нобелевскую премию. Примечательно, что квантовые точки были открыты еще в 1980-х годах, причем дважды, но освоить их синтез удалось лишь спустя десять лет.

1.2 История открытия

В конце 1970-х годов советский ученый Алексей Екимов занимался экспериментами по созданию цветных стекол. Он заметил, что одна и та же добавка может придавать стеклу разные оттенки в зависимости от условий нагрева и охлаждения размягченного материала. Заинтересовавшись этим феноменом, Екимов начал исследовать его механизмы. Он использовал хлорид меди для производства стекла при различных температурах и временных интервалах нагрева, в результате чего в стекле были обнаружены нанокристаллы хлорида меди, отличающиеся по размеру и спектральным характеристикам. Наибольшие из них поглощали свет на той же длине волны, что и известные макроскопические кристаллы хлорида меди, в то время как меньшие нанокристаллы поглощали более короткие волны света. Екимов заметил, что размер частиц влияет на оптические свойства материалов, и назвал эти частицы квантовыми точками. В 1981 году он опубликовал свои исследования в «Письмах в “Журнал экспериментальной и теоретической физики”».

Американский ученый Луис Брюс, не знакомый с работами Екимова, в 1983 году независимо от него сделал аналогичное открытие, получив нанокристаллы сульфата кадмия, которые также меняли цвет в зависимости от их размера. Однако выяснилось, что до практического применения еще предстоит преодолеть множество трудностей. Поскольку свойства квантовых точек зависят от их размера, необходимо было разработать методику для их получения в нужных количествах и размерах с минимальными затратами. Методы, предложенные Екимовым и Брюсом, позволяли контролировать лишь средний размер нанокристаллов, но разброс значений оставался значительным. Чтобы получить квантовые точки, поглощающие

определенный цвет, физикам приходилось сортировать готовые наночастицы по размеру, что было сложным и дорогостоящим процессом. Кроме того, нанокристаллы часто имели дефекты. В итоге ни один из изобретателей квантовых точек не смог найти способ для стабильного и контролируемого массового производства

1.3 Солнечные элементы на основе квантовых точек

В 2020-х годах возобновляемые источники энергии становятся всё более актуальными. Это обусловлено как ухудшающейся экологической ситуацией, так и истощением традиционных источников энергии. Солнечная энергия является одним из ключевых видов возобновляемой энергии. Вопрос повышения эффективности солнечных элементов (СЭ) решается на уровне долей процента. Известно, что существует предел Шокли-Квиссера для однопереходных солнечных элементов, который составляет 30% при $E_g = 1,1$ эВ[4]. Поэтому важно разрабатывать новые типы структур для солнечных элементов и соответствующие функциональные покрытия. Основным химическим элементом, используемым в фотогальванике и других полупроводниковых технологиях, является кремний. Запасы кремния в форме SiO_2 на Земле превышают запасы других полупроводниковых материалов, и процесс его извлечения хорошо отработан. На рисунке 1.2 представлено изображение типичного кремниевого монокристаллического солнечного элемента.

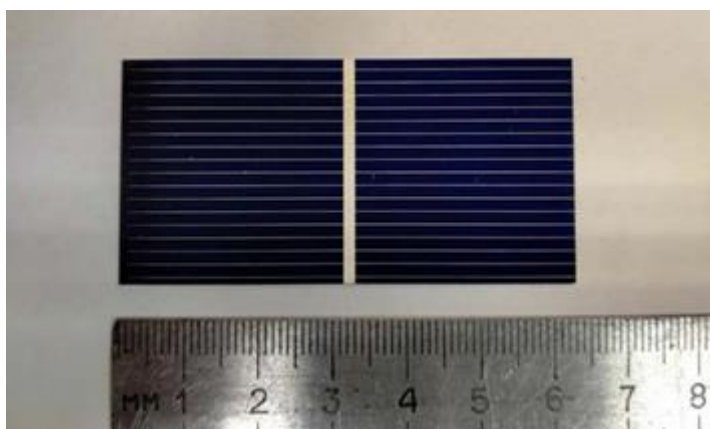


Рисунок 1.2 - Типичный кремниевый монокристаллический солнечный элемент

Разработка солнечных панелей является одной из многообещающих сфер использования коллоидных квантовых точек. В настоящее время традиционные кремниевые панели имеют коэффициент преобразования энергии до 25%. Однако их значительным недостатком является высокая стоимость, а существующие технологии не позволяют производить панели больших размеров. В 1992 году Михаэль Гретцель предложил метод создания солнечных панелей, основанный на использовании материалов с высокой удельной поверхностью, таких как нанокристаллический диоксид титана (TiO). Коллоидные квантовые точки представляют собой полупроводниковые частицы с диаметром всего несколько нанометров. Их можно синтезировать из раствора, что позволяет легко наносить пленки из таких частиц на различные гибкие или жесткие подложки, подобно краске или чернилам.

Квантовые точки могут эффективно выполнять функцию фотосенсибилизатора, так как они позволяют контролировать положение полосы поглощения. Кроме того, они обладают такими важными преимуществами, как высокие коэффициенты экстинкции и высокая стабильность. Химический контроль над размером, формой и составом коллоидных нанокристаллов дает возможность точно изменять их электронные и оптические характеристики. Благодаря высокой эффективности, возможности настройки цвета эмиссии и применения в технологическом секторе, квантовые точки представляют собой привлекательный материал для использования в недорогих солнечных концентраторах большой площади. Однако одной из проблем этой технологии является наложение между излучением и поглощением в самих квантовых точках, что приводит к небольшим потерям света из-за повторного рассеивания уже излученного света. На рисунке 1.3 показано, как квантовые точки интегрированы в пластик, на основе *PMMA* (полиметилметакрилат) и *NC* (наноцементы) и направляют солнечный свет к

краю пластины, что способствует повышению эффективности солнечных панелей.

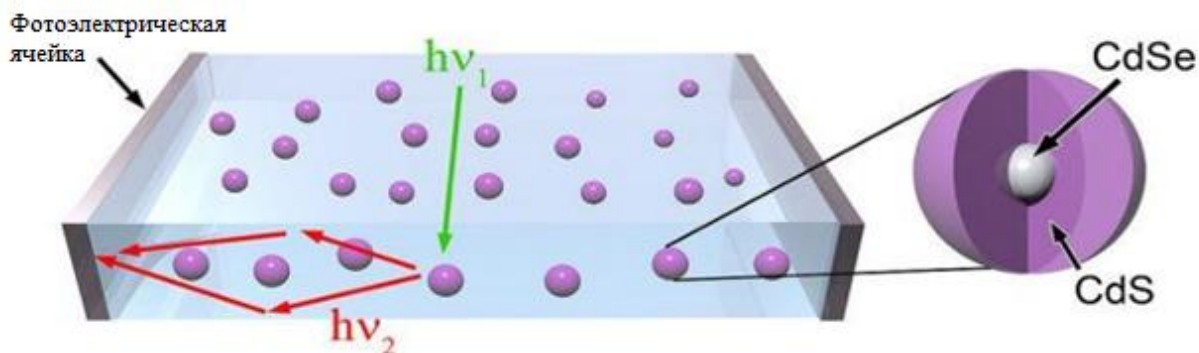


Рисунок 1.3 - Внедрение квантовых точек в пластик

Ученые разработали люминесцентный солнечный концентратор, основанный на квантовых точках с искусственно созданным значительным сдвигом между поглощением и излучением, известным как большой сдвиг Стокса. Эти материалы с сдвигом Стокса представляют собой соединения кадмий-селений и кадмий-сульфид (*CdSe/CdS*) рисунок 1.4, где толстый слой поглощения *CdS* преобладает, а излучение исходит из тонкого внешнего слоя *CdSe*. Таким образом, технология квантовых точек с сдвигом Стокса обладает значительным потенциалом и может быть использована на больших площадях, включая целые фасады зданий.

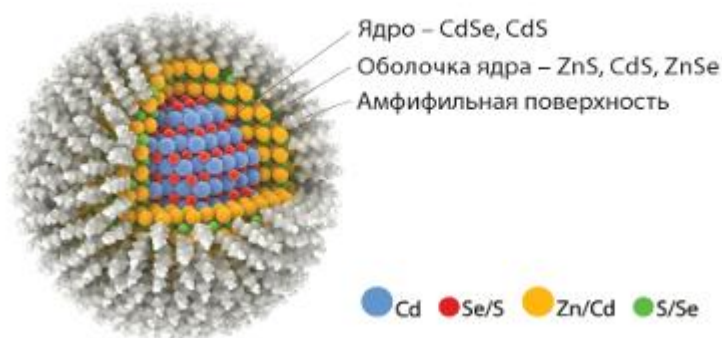


Рисунок 1.4 - Соединения кадмий-селений/кадмий-сульфид

Солнечный элемент - это устройство, которое преобразует солнечную энергию в электрическую с помощью фотоэлектрического эффекта без движущихся частей или загрязняющих побочных продуктов.

Фотоэлектрический эффект - это выработка энергии за счет электромагнитного излучения, разделяющего положительные и

отрицательные носители заряда в поглощающем материале, который способен генерировать ток во внешней цепи [2].

Лучшее понимание процессов, управляющих работой солнечных элементов, имеет решающее значение и оказывает существенное технологическое влияние на эффективность преобразования энергии. Солнечные элементы преобразуют солнечную энергию в пригодную для использования электрическую энергию, используя полупроводниковые материалы n-типа и p-типа. Когда солнечное излучение падает на эти материалы, электроны отрываются от их атомов, позволяя им проходить через материал для выработки электричества, как показано на рисунке 1.5.

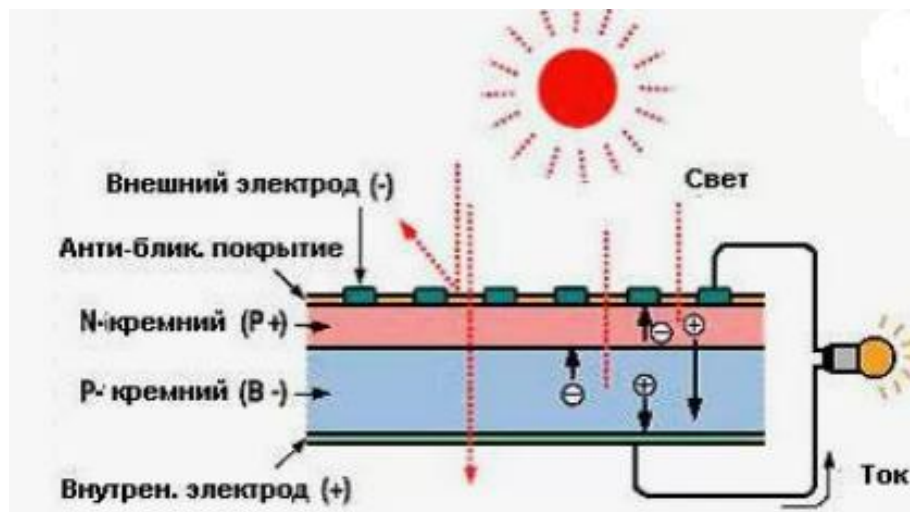


Рисунок 1.5 - Схема, показывающая основную работу солнечного элемента

Квантовые точки обладают перестраиваемостью запрещенной зоны, дискретным электронным состоянием и большим отношением площади поверхности к объему благодаря удержанию фотовозбужденных носителей, что позволяет проектировать их оптические и электрооптические характеристики. Эти новые свойства значительно расширили поглощение света в широком спектре длин волн солнечного излучения по сравнению с объемными материалами и проложили путь к современным архитектурам технологического проектирования солнечных элементов с использованием промежуточного диапазона, множественной генерации экситонов и солнечных элементов с несколькими переходами [5].

Было показано, что эти механизмы обеспечивают количественный прирост эффективности сценариев преобразования энергии, превышающий предел Шокли и Квиссера, установленный для обычных элементов питания. Солнечный элемент промежуточной полосы пропускания обеспечивает внутризонное поглощение фотонов, которые теряются в обычном устройстве, таким образом, энергия фотонов, меньшая, чем энергия основной запрещенной зоны, может быть использована для продвижения носителей заряда по искусственно созданным оптическим переходным путям. Многократная генерация экситонов позволяет поглощать и использовать фотоны с повышенной запрещенной зоной, которые в противном случае были бы диссипативными потерями, для генерации большего количества носителей, тем самым сводя к минимуму процесс, который описывает термодинамическое взаимодействие и распределение энергии горячих носителей, характерный для обычного устройства.

Солнечные элементы с несколькими переходами улучшают поглощение солнечной энергии в широком диапазоне для солнечных элементов полного спектра за счет укладки КТ соответствующих размеров. Эти захватывающие достижения приводят к значительному повышению эффективности преобразования солнечной энергии в электрическую в виде увеличения генерируемых фототоками токов и напряжений[3].

Растущая обеспокоенность по поводу истощения запасов ископаемого топлива и, связанных с этим выбросом углекислого газа, вызвала спрос на возобновляемую, устойчивую и зеленую энергию. В настоящее время широко признано, что на изменение климата в значительной степени влияет увеличение концентрации в атмосфере парниковых газов, таких как CO₂, который является побочным продуктом эксплуатации ископаемого топлива, ответственного за глобальное потепление.

Технология использования возобновляемых источников энергии предлагается в качестве альтернативного решения для получения необходимой зеленой энергии, достаточной для удовлетворения неизбежного

роста глобального спроса на энергию, полностью лишенную парниковых газов. Солнечная энергия появилась среди всех других возобновляемых источников энергии как наиболее жизнеспособный источник энергии для достижения этой цели из-за огромного количества солнечной радиации, достигающей поверхности Земли. Однако спектр солнечной энергии широк и содержит фотоны с энергиями в диапазоне от ультрафиолетового через видимый до инфракрасного диапазона, как показано на рисунке 1.6.

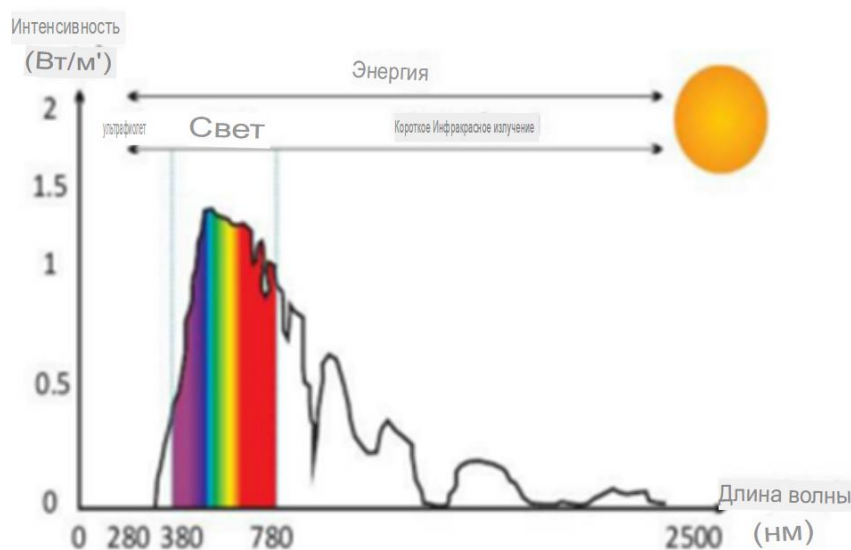


Рисунок 1.6 - Спектр распределения солнечной энергии

Полупроводниковые квантовые точки представляют собой наиболее активно исследуемые наноструктуры благодаря своим уникальным оптическим и электрическим характеристикам. Они служат основой для различных технологий, таких как лазеры на квантовых точках, светодиоды, однофотонные излучатели и солнечные элементы. Эти применения стали возможны благодаря совершенствованию методов роста кристаллов, таких как молекулярно-лучевая эпитаксия и металлоорганическое химическое осаждение из газовой фазы. С помощью этих технологий можно создавать самоорганизующиеся квантовые точки *InAs/GaAs*, используя методы Странского-Крыстанова или Фольмера-Вебера. Полученные квантовые точки имеют различные размеры и формы. Поскольку высококачественные устройства, такие как источники неклассического света, требуют точных

данных о структурных характеристиках квантовых точек, соответствующие методы исследования являются крайне важными.

Для получения данных о росте, самосборке и структурных характеристиках квантовых точек, особенно их форме и размере, применяются электронные микроскопы и сканирующие туннельные микроскопы. Однако эти методы не позволяют напрямую получить информацию о форме волновой функции электронов и дырок. В работах для определения параметризованной волновой функции экситона используется межзонная фотолюминесцентная спектроскопия. Однако во всех этих исследованиях предполагается определенная модель для потенциала квантовой точки. Из-за заданного потенциала удержания квантовой точки форма волновой функции подразумевается неявно. Таким образом, экспериментальные измерения не позволяют непосредственно определить волновые функции квантовой точки.

2 Теоретическое исследование волновых функций электрона в квантовой точке

2.1 Моделирование внутризонной структуры КТ методом внутризонной спектроскопии

Методы электронной микроскопии используются для получения информации о росте, самоорганизации и структурных свойствах, особенно о форме и размере КТ. Однако они не дают информации о форме волновой функции электрона (дырки). В работах межзонная фотолюминесцентная спектроскопия используется для получения параметризованной волновой функции экситона. Там предполагается определенная модель для потенциала КТ, и, таким образом, форма волновой функции уже неявно предполагается, но не определяется напрямую. Дисперсия размера КТ может быть оценена, но она не дает информации о пространственном виде волновой функции[11].

Существуют различные экспериментальные подходы для реализации описанных методов, включая импульсную накачку-зондирование и непрерывную волновую спектроскопию. Для легированных квантовых точек

(КТ) возможны эксперименты с одним пучком. Ключевыми требованиями являются наличие электронного состояния в активной зоне проводимости (или валентной зоне) и возможность оптического зондирования, основанного на переходах в континууме.

Рассматриваемый оптический метод обеспечивает прямой доступ к пространственной форме волновых функций квантовых точек. В частности, возможно определение волновых функций как электронов, так и дырок в квантовой точке. Описанный метод восстановления волновой функции основывается на оптических переходах между связанными состояниями квантовой точки (локализованными внутри нее) и несвязанными состояниями в континууме[6]. Установлено соотношение между преобразованием Фурье волновой функции основного состояния квантовой точки и спектром оптического внутризонного поглощения.

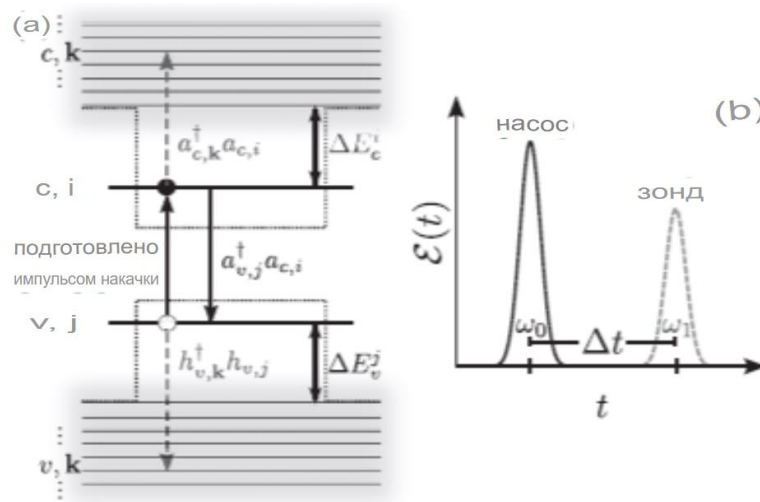
Это открывает возможность получения информации о пространственной форме волновой функции квантовой точки, которая закодирована в оптических спектрах. Для демонстрации предложенной оптической схемы определения волновой функции квантовой точки в качестве модельной системы используется эпитаксиально выращенная квантовая точка *InAs*, встроенная в объемный материал *GaAs* (например, в процессе роста по методу Фольмера-Вебера). Тем не менее, данный метод может быть применен и к другим системам, помимо квантовых точек в объемных материалах. В общем случае волновые функции основного состояния могут быть определены, если возможно возбуждение оптических переходов этой волновой функции в континуум свободных носителей[7]. С незначительными корректировками полученные теоретические результаты могут быть применены для описания различных структур других материалов, таких как объемные примеси или более мелкие наноструктуры, например, квантовые ямы и нити. Кроме того, квантовые точки в квантовых нитях или молекулярных системах также являются подходящими объектами для исследования.

Квантовые точки (КТ), благодаря своим исключительным оптическим и транспортным характеристикам, привлекают огромное внимание исследователей в области нанотехнологий. Их уникальные свойства позволяют использовать КТ в широком спектре устройств, включая лазеры, светодиоды, однофотонные источники и солнечные элементы. Прогресс в методах выращивания кристаллов, таких как молекулярно-лучевая эпитаксия (MBE) и металлоорганическое химическое осаждение из газовой фазы (MOCVD), сыграл ключевую роль в развитии этих приложений. Например, самоорганизующиеся КТ *InAs/GaAs*, формируемые по механизмам Странски-Крастанова и Фольмера-Вебера, демонстрируют разнообразие размеров и форм. Для создания высокопроизводительных устройств, особенно источников неклассического света, необходимо детальное понимание структурных характеристик КТ. Хотя электронная микроскопия и сканирующая туннельная микроскопия предоставляют информацию о росте, самосборке, форме и размере КТ, они не позволяют напрямую определить форму волновой функции электрона (дырки). Спектроскопия межзонной фотолюминесценции, используемая в некоторых работах, предполагает параметризацию волновой функции экситона на основе определенной модели потенциала КТ, что не позволяет напрямую определить ее форму. Оценка дисперсии размеров КТ также не дает информации о пространственной структуре волновой функции.

Предложенная экспериментальная схема для определения пространственной формы волновой функции в КТ представляет собой нелинейный двухэтапный процесс рисунок 2.1, во-первых, импульс накачки резонансно возбуждает ограниченный межзонный электронно-дырочный переход, показано сплошной линией. Импульс накачки создает низкие, но конечные популяции электронов и дырок в ограниченных состояниях КТ. На втором этапе зондирующий импульс проверяет внутризонные переходы, возникающие в результате созданных накачкой популяций электронов и дырок. Мы предполагаем в расчетах, что когерентность, вызванная

импульсом накачки, уже дефазирована, когда приходит зондирующий импульс и спектрально разрешенное внутризонное зондирующее поглощение содержит информацию о пространственной форме волновой функции основного состояния КТ.

Разница энергий между связанным состоянием КТ с самой низкой (самой высокой) энергией и самым низким (самым высоким) объемным состоянием в зоне проводимости (валентной) определяет интересующий спектральный диапазон рисунок 2.1. Обратите внимание, что изображенная энергетическая щель $E_{c,v}$ зависит от пространственного расширения потенциала КТ.



а)-энергетические уровни; б) -график зависимости энергии

Рисунок 2.1 - Схема уровней модели КТ

Объемные состояния кристалла имеют импульс k . i и j представляют уровни КТ. Разность энергий между состоянием КТ $i(j)$ и самым низким (самым высоким) энергетическим объемным состоянием в зоне проводимости (валентной) составляет $E_i^c (E_j^v)$.

Изображены три перехода: межзонный переход внутри КТ и переходы между уровнями точек и объемными состояниями

Пусть Гамильтониан H состоит из двух слагаемых H_0 , и H_L , где H_0 определяет взаимодействие электронов, H_L - гамильтониан классического светового поля.

Объемные состояния характеризуются волновым вектором k . Разница энергий между связанным состоянием квантовой точки с наименьшей (или наибольшей) энергией и самым низким (или высоким) объемным состоянием в зоне проводимости (валентной зоне), обозначенная как $c(E, \nu)$, определяет интересующий спектральный диапазон, как показано на рисунке 2.1(а). Стоит отметить, что изображенная энергетическая щель c, ν зависит от пространственных характеристик потенциала в квантовой точке.

Гамильтониан H , описывающий систему, включает в себя энергию свободных электронов (H_0) и энергию взаимодействия электронов со световым полем HL .

$$H_0 = \sum_{i,\lambda} \epsilon_{\lambda,i} a_{\lambda,i}^\dagger a_{\lambda,i} + \sum_{k,\lambda} \epsilon_{\lambda,k} a_{\lambda,k}^\dagger a_{\lambda,k} \quad (2.1)$$

Взаимодействие электронов с внешним световым полем $E(t) = E(t) e\tilde{\zeta}$ (направление поляризации $e\tilde{\zeta}$) в дипольном приближении.

На основе данного предположения предлагается принципиально новый, полностью оптический подход для прямого доступа к пространственной структуре волновой функции основного состояния. В отличие от существующих методов, наш подход позволяет характеризовать волновые функции электронов и дырок. Метод основан на исследовании оптических переходов между дискретными уровнями квантовой точки и континуумом состояний окружающей среды. Аналогично фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением, рассматриваемые переходы используются для изучения распределения электронов в импульсном пространстве. Ключевым результатом является установление связи между преобразованием Фурье волновой функции основного состояния и оптическим спектром внутренних переходов, что открывает возможность извлечения пространственной информации из оптических измерений [12].

В данной работе мы используем метод накачки-зондирования, но полученные результаты, представленные в частотной области, применимы и к непрерывному волновому возбуждению. Для демонстрации предлагаемой оптической схемы определения волновой функции КТ, мы используем

эпитаксиально выращенную $InAs$ КТ в $GaAs$. Однако, метод применим к определению волновых функций основного состояния в любых системах, где возможны оптические переходы в континуум свободных носителей. Этот метод аналогичен фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением для атомных систем и может быть адаптирован для изучения других структур, таких как примеси, квантовые ямы, провода, а также КТ в квантовых проводах или молекулярных системах КТ.

Взаимодействие электронов с внешним световым полем в дипольном приближении описывается следующим образом:

- $\lambda, i(k)$ представляет собой энергию электрона, где индекс λ указывает на энергетическую зону (либо валентную зону "v", либо зону проводимости "c");

- $a^{\dagger}_{\lambda, i(k)}$ и $a_{\lambda, i(k)}$ - это операторы, которые, соответственно, создают ("рождают") или уничтожают ("аннигилируют") электрон.

Индекс i относится к электрону, находящемуся в связанном состоянии* внутри квантовой точки. Индекс k относится к электрону, находящемуся в состоянии континуума (то есть, не связанному с квантовой точкой) и характеризующемуся волновым вектором k . Внешнее световое поле описывается как $E(t)e\hat{\zeta}$, где $E(t)$ - это амплитуда поля, зависящая от времени, а $\hat{\zeta}$ - вектор, указывающий направление поляризации света.

$$H_L = - \sum_{i,j} d_{ij}^{cv} \mathcal{E}(t) a_{c,i}^{\dagger} a_{v,j} - \sum_{i,k,\lambda} d_{ik}^{\lambda\lambda} \mathcal{E}(t) a_{\lambda,i}^{\dagger} a_{\lambda,k} + \text{H.a.} \quad (2.2)$$

мы учитываем два типа переходов электронов: межзонные переходы внутри квантовой точки (QD) и внутризонные переходы между квантовой точкой и окружающим материалом (*bulk*). Величины d_{ij}^{cv} и $d_{ik}^{\lambda\lambda}$ (где λ обозначает зону проводимости c или валентную зону v) представляют собой элементы матриц дипольных моментов, описывающих межзонные и внутризонные переходы, соответственно.

Межзонные переходы происходят при более высоких энергиях, чем внутризонные, и их спектры разделены. Мы предполагаем, что квантовая точка обладает радиальной симметрией, что позволяет упростить расчет

поглощения, рассматривая только одно направление. Однако, измеряя поглощение света с различной поляризацией, можно получить информацию об азимутальной симметрии квантовой точки, поскольку поляризация света входит в уравнение.

Нарушение азимутальной симметрии должно быть заметно на поляризационной диаграмме поглощения. Спектральное поглощение света с частотой ω можно рассчитать, используя макроскопическую поляризацию

$$\mathcal{P}_{\text{intra}}(\omega) = \mathcal{P}_{\text{intra}}(\omega) \epsilon_{\xi} \alpha(\omega) = \frac{\omega}{nc\epsilon_0} \text{Im} \left[\frac{\mathcal{P}_{\text{intra}}(\omega)}{\mathcal{E}(\omega)} \right] \quad (2.3)$$

Среда, имеющая постоянный показатель преломления n вблизи частот перехода, поляризуется под воздействием зондирующего импульса $E(t)$, что приводит к поляризации $\mathcal{P}_{\text{intra}}(t)$.

$$\mathcal{P}_{\text{intra}}(t) = \rho_{\text{QD}} \sum_{i,k,\lambda} d_{ik}^{\lambda\lambda} \langle a_{\lambda,i}^{\dagger} a_{\lambda,k} \rangle(t) \quad (2.4)$$

На основе уравнения движения Гейзенберга и определения ρ_{QD} как объемной плотности КТ, проводится расчет амплитуд переходов.

$$\begin{aligned} \partial_t p_{ik}^{\lambda\lambda}(t) = & \frac{i}{\hbar} (\epsilon_{\lambda,i} - \epsilon_{\lambda,k} + i\gamma) p_{ik}^{\lambda\lambda}(t) \\ & + \frac{i}{\hbar} d_{ki}^{\lambda\lambda} \mathcal{E}(t) (f^{\lambda,i} - f^{\lambda,k}), \end{aligned} \quad (2.5)$$

Мы определяем, что уравнение (2.5) можно решить в пространстве Фурье, когда плотности носителей для каждой полосы и состояния остаются постоянными.

$$p_{ik}^{\lambda\lambda}(\omega) = - \frac{d_{ki}^{\lambda\lambda} \mathcal{E}(\omega)}{(\epsilon_{\lambda,i} - \epsilon_{\lambda,k} + \hbar\omega + i\gamma)} (f^{\lambda,i} - f^{\lambda,k}) \quad (2.6)$$

В отсутствие электронной инжекции носителей заряда, распределение Ферми-Дирака показывает, что все состояния в валентной зоне заняты, а все состояния в зоне проводимости свободны ($f_c, k=0$). Используя уравнения (2.6) и (2.4), мы разделяем внутризонные переходы, индуцированные зондирующим импульсом, на переходы между квантовой точкой и объемом для электронов и переходы между квантовой точкой и объемом для дырок.

$$\mathcal{P}_{\text{intra}}(\omega) = \rho_{\text{QD}} (\sum_i \mathcal{P}_i^c(\omega) f^{e,i} + \sum_j \mathcal{P}_j^v(\omega) f^{h,j}) \quad (2.7)$$

где:

$$\mathcal{P}_i^\lambda(\omega) \equiv - \sum_{\mathbf{k}} \frac{|d_{i\mathbf{k}}^{\lambda\lambda}|^2 \varepsilon(\omega)}{(\Delta\epsilon_{i\mathbf{k}}^\lambda + \hbar\omega + i\gamma)} \quad (2.8)$$

Уравнения (2.7) и (2.8) демонстрируют, что вклады в поглощение от переходов внутри валентной зоны (дырок) и зоны проводимости (электронов) являются независимыми и не зависят от концентрации других носителей заряда. Это существенное отличие от межзонных переходов в квантовой точке, где вклад в поглощение зависит от суммы дырочной и электронной плотностей состояний. В результате, спектр поглощения можно разделить на отдельные вклады, обусловленные электронами и дырками.

$$\alpha_\lambda^i(\omega) \equiv \frac{\omega}{nc\epsilon_0} \text{Im} \left[\frac{\mathcal{P}_i^\lambda(\omega)}{\varepsilon(\omega)} \right] \quad (2.9)$$

1. Формулы, представленные ранее, применимы как для электронных, так и для дырочных переходов (обозначенных индексами 'c' и 'v' соответственно). Вклад каждого типа носителей рассчитывается независимо, а затем суммируется для получения общего результата.

2. Энергетическая зависимость: Уравнение (2.9) дает разные значения энергии в зависимости от того, рассматриваются электроны или дырки.

3. Выделение электронного вклада: Поскольку спектральные характеристики переходов между зонами проводимости хорошо отличаются от общего фона и переходов между граничными состояниями, а переходы между граничными состояниями относительно четкие, можно считать, что электронный вклад в оптическую функцию ($\varepsilon(\omega)$) можно напрямую извлечь из экспериментальных данных.

4. Фокус на электронах: Основное внимание уделяется демонстрации расчета электронного вклада.

5. Анализ переходов: Для полного понимания необходимо провести детальный анализ того, как можно управлять переходами между различными состояниями, особенно из основного состояния ($i=0$).

6. Пространственная информация: Далее будет представлен более подробный аналитический разбор, показывающий, как пространственную информацию можно получить из уравнений (2.7)-(2.9).

7. Пренебрежение Q : Для переходов между зонами величина Q обычно мала по сравнению с энергиями переходов. Поэтому, для упрощения, предполагается, что Q стремится к нулю, что позволяет сохранить поглощение.

$$\alpha_{\lambda}^i(\omega) = \frac{V_b \omega}{8\pi^2 n c \epsilon_0} \int dk |d_{ik}^{\lambda\lambda}|^2 \delta(\Delta\epsilon_{ik}^{\lambda} + \hbar\omega), \quad (2.10)$$

С использованием дельта-функции Дирака и объемной плотности в формуле (2.10) определяется квадратичный дипольный момент и плотность состояния. Вычисляется интеграл, и плотность состояний при входах. На первый взгляд, для непрерывных волновых функций используются плоские волны. Затем выражение для внутризонного дипольного момента запишем следующим образом:

$$d_{ik}^{\lambda\lambda} = \frac{q}{\sqrt{V_b}} \int \phi_{\lambda,i}^*(\mathbf{r}) r_{\xi} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r} = -\frac{iq}{\sqrt{V_b}} \frac{\partial}{\partial k_{\xi}} \tilde{\phi}_{\lambda,i}^*(\mathbf{k}) \quad (2.11)$$

Волновая функция описывает основное состояние квантовой точки в реальном и Фурье-пространствах. Оператор r_{ξ} связан с пространственной производной в k -пространстве. В приближении плоской волны, полюсный момент напрямую отражает производную волновой функции основного состояния $\tilde{\phi}_{\lambda,i}^*(k)$ внутри квантовой точки. Таким образом, анализ промежуточного момента, вычисленного по уравнению, позволяет получить информацию о пространственной форме волновой функции основного состояния квантовой точки, извлекая ее из спектра внутриполосного поглощения (уравнение 2.10). Предполагается, что зонная структура квантовой точки и окружающего ее материала имеет параболическую форму

$$\epsilon_{c,k} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} + \Delta E_c^0 + \epsilon_{c,0} \quad (2.12)$$

Имея результаты, полученные в (2.10)–(2.12), мы можем вычислить спектр

$$\alpha_{\lambda}^i(\omega) = B\omega \sqrt{\hbar\omega - \Delta E_{\lambda}^i} \left| \frac{\partial}{\partial k} \tilde{\phi}_{\lambda,i}(k) \right|_{k=k_0}^2 \Theta(\hbar\omega - \Delta E_{\lambda}^i) \quad (2.13)$$

где:

$$B = \frac{q^2 m^{\frac{3}{2}}}{3\sqrt{2}\pi\hbar^3 n c \epsilon_0}, k_0(\omega) = \sqrt{\frac{2m(\hbar\omega - \Delta E_{\lambda}^i)}{\hbar^2}}, \Theta(\hbar\omega - \Delta E_{\lambda}^i) \quad (2.14)$$

Применим функцию Хевисайда. Внутризонное поглощение демонстрирует типичную зависимость, пропорциональную квадратному корню из разницы между энергией и шириной запрещенной зоны.

$$\tilde{\alpha}_{\lambda}^i(k_0) = B \frac{k_0 \hbar}{\sqrt{2m}} \left| \frac{\partial}{\partial k_0} \tilde{\phi}_{\lambda,i}(k_0) \right|^2 \quad (2.14)$$

$$\left(\frac{\tilde{\alpha}_{\lambda}^i(k_0) \sqrt{2m}}{B k_0 \hbar} \right)^{\frac{1}{2}} = \left| \frac{\partial}{\partial k_0} \tilde{\phi}_{\lambda,i}(k_0) \right| \quad (2.15)$$

В случае, когда волновая функция квантовой точки изменяется плавно и однонаправленно в области k (как правило, это относится к основному состоянию, $i=0$), можно записать так:

$$\frac{(2m)^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{B\hbar}} \int_0^{k_0} \left(\frac{\tilde{\alpha}_{\lambda}^0(k'_0)}{k'_0} \right)^{\frac{1}{2}} dk'_0 = \pm [\tilde{\phi}_{\lambda,0}(k_0) - \tilde{\phi}_{\lambda,0}(0)] \quad (2.16)$$

Уравнение (2.16) и его применение для определения волновой функции QD являются ключевыми результатами данного исследования. Это позволяет восстановить волновую функцию основного состояния $\tilde{\phi}_{\lambda,0}$, опираясь на измеренный спектр внутреннего диапазона: измерение $\alpha \theta \lambda(\omega)$ или $a \theta \lambda(\omega)$ соответственно и вычисление левой части уравнения обеспечивает преобразование Фурье волновой функции основного состояния. Ширина спектра предоставляет прямой доступ к пространственной конфигурации.

Тем не менее, важно учесть один значимый аспект: предположение о расчетных волновых функциях не учитывает зависимость волновых функций основного состояния от ограничивающего потенциала QD .

2.2 Моделирование волновых функций электрона в КТ при различных типах потенциала энергетического барьера

Мы провели численное исследование нескольких типов удерживающих потенциалов, таких как прямоугольные потенциальные ямы,

гиперболические потенциалы в форме секущей и гармонические потенциалы. В результате мы обнаружили, что уравнение (2.15) не сильно зависит от формы потенциала, и здесь мы представляем результаты только для потенциала вида:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0, & r = 0 \\ \text{Убывающая функция}, & r > 0 \\ V_a(r), & r \geq r_{max} \end{cases} \quad (2.17)$$

На рисунке 2.2 представлены результаты моделирования системы квантовых точек. В частности, показаны: (а) модельные потенциалы, описывающие удержание электронов в квантовых точках с различным размером ($a = 5$ нм, $a = 6,7$ нм и $a = 10$ нм), рассчитанные на основе уравнения; (б) соответствующие волновые функции основного состояния электрона для этих потенциалов; и (с) теоретические спектры внутризонного поглощения для квантовых точек *InAs*, выращенных в *GaAs*, полученные с использованием приближения плоской волны и волновых функций основного состояния, представленных в (б). Расчеты учитывают влияние импульса накачки на плотность электронов в основном состоянии.

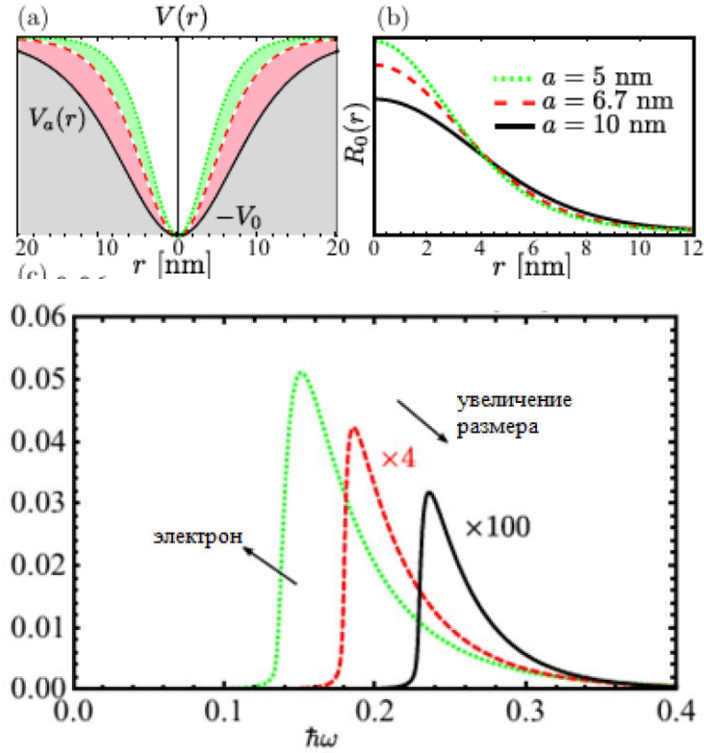


Рисунок 2.2 - Результаты моделирования системы квантовых точек

Межзонные переходы начинаются при более высоких энергиях и отделены от внутризонного спектра. Мы предполагаем радиально-симметричную систему, поэтому достаточно свести расчет поглощения к одному направлению $e\hat{z}$. Однако измерения различных направлений поляризации зонда также могут дать информацию об азимутальной симметрии КТ, поскольку направление поляризации входит в правую часть уравнения. Нарушенная азимутальная симметрия должна быть видна на диаграмме поляризации поглощения. Спектральное поглощение зондирующего импульса $E(\omega)$ можно определить путем поляризационной спектроскопии $Pintra(\omega) = Pintra(\omega)e\hat{z}$ [8],

Мнимая часть $P_{\mu i}(\omega)$ необходима для вычисления внутризонного поглощения $ai_{\mu}(\omega)$. Таким образом, поляризация $P_{\mu i}(\omega)$ при внутризонном поглощении, описанная в уравнении (2.18), определяется действительной и мнимой компонентой. Мнимая часть уравнения имеет следующий вид:

$$\alpha_{\mu}^i(\omega) = \frac{V_b \omega}{8\pi^2 n c \epsilon_0} \int dk |d_{ik}^{\mu\mu}|^2 \delta(\Delta\epsilon_{ik}^{\lambda\mu} + \hbar\omega) \quad 2.18$$

Здесь n - постоянный показатель преломления для соответствующих частот перехода.

Поскольку непрерывные моды k являются квазинепрерывными, k -сумма в уравнении преобразуется в тройной интеграл, который используется для определения поглощения. Для внутризонных переходов в квантовых точках типичные значения сдвига фазы θ_γ составляют несколько МэВ, что значительно меньше по сравнению с энергиями переходов, которые находятся на уровне эВ. Поэтому мы предполагаем, что γ стремится к нулю, что приводит к появлению дельта-функции Дирака в выражении для поглощения, что видно из формулы:

$$\alpha_\mu^i(\omega) = \frac{V_b \omega}{8\pi^2 n c \epsilon_0} \int dk |d_{ik}^{\mu\mu}|^2 \delta(\Delta\epsilon_{ik}^{\lambda_\mu} + \hbar\omega) \quad 2.19$$

Для расчета коэффициента внутризонного поглощения будем использовать дельта-функцию Дирака. Оптический объем V_b , в уравнении (2.19) определяется квадратом внутризонного дипольного момента и оптической плотностью. Внутризонный дипольный момент определяется по формуле 2.20

$$d_{ik}^{\mu\mu} = q \int \xi_{\mu,i}^*(r) r_\xi \xi_{\mu,k}(r) dr \quad 2.20$$

Вектор k указывает направление поляризации зондирующего импульса.

Сначала рассмотрим плоские волны в качестве непрерывных волновых функций. В этом случае внутризонный дипольный момент будет равен:

$$d_{ik}^{\mu\mu} = \frac{q}{\sqrt{V_b}} \int \xi_{\mu,i}^*(r) r_\xi e^{ik \cdot r} dr = -\frac{iq}{\sqrt{V_b}} \frac{\partial}{\partial k_\xi} \tilde{\xi}_{\mu,i}^*(k) \quad 2.21$$

Из уравнения следует, что при использовании приближения плоской волны, внутризонный дипольный момент непосредственно связан с производной волновой функции основного состояния квантовой точки в области k . Таким образом, внутризонный дипольный момент, который участвует во внутризонном поглощении, предоставляет информацию о пространственной форме волновой функции основного состояния квантовой точки. Это позволяет извлечь волновую функцию основного состояния квантовой точки из уравнения спектра внутризонного поглощения.

В дальнейших расчетах предполагается радиальная симметрия системы. Поэтому достаточно рассмотреть поглощение в одном направлении. Тем не менее, измерения в различных направлениях поляризации зондирующего импульса могут также предоставить информацию об азимутальной симметрии квантовой точки, поскольку направление поляризации входит в правую часть уравнения. На поляризационной диаграмме поглощения должно проявляться нарушение азимутальной симметрии.

Предположим, что квантово-волновая функция ведет себя монотонно, неравенство можно переписать следующим образом формула 2.22

$$\frac{(2m_e)^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{B\hbar}} \int_0^{k_0} \left(\frac{\tilde{\alpha}_{\mu}^{i_1}(k'_0)}{k'_0} \right)^{\frac{1}{2}} dk_0 = \pm (\xi_{\mu,i_1}(k_0) - \xi_{\mu,i_1}(0)) \quad 2.22$$

Это уравнение является ключевым результатом, так как его можно использовать для нахождения волновой функции квантовой точки. Оно позволяет восстановить волновую функцию основного состояния квантовой точки на основе измеренного внутризонного спектра.

Поскольку вклад спектра от переходов, связанных с электронным континуумом, четко отделен от переходов, связанных с дырочным континуумом, а переходы между связанными состояниями приводят к относительно резким спектральным линиям, можно предположить, что электронный вклад можно получить непосредственно из экспериментов. Измеряя и вычисляя левую часть уравнения, мы получаем преобразование Фурье волновой функции основного состояния квантовой точки. Ширина предоставляет прямой доступ к пространственной форме квантовой точки через простое преобразование Фурье.

Однако необходимо проверить один важный момент: приближение плоской волны, используемое до сих пор, пренебрегает зависимостью объемных континуальных волновых функций от потенциала ограничения КТ. Поскольку уравнение (2.18) выведено с использованием плоских волн, необходимо исследовать справедливость уравнения для правильных

несвязанных состояний системы континуума КТ. Численно изучили несколько потенциалов ограничения, таких как прямоугольные потенциальные ямы и гиперболические секансные или гармонические потенциалы. Обнаружили, что наши вычисления, основанные на уравнении (2.19), не сильно зависят от формы потенциала. Рассмотрим только результаты для обратного гиперболического секансного потенциала.

Несколько потенциалов связи, таких как постоянные потенциалы, прямоугольные потенциальные ямы или гармонические потенциалы изучаются численно для сравнения результатов с аналитическими решениями в качестве ориентиров для проверки численных показателей. Для этих потенциалов замыкания успешно воспроизводятся хорошо известные результаты. Рассмотрим потенциал в виде обратной функции рисунок 2.3 к гиперболической функции:

$$V(r) = -\frac{V_0}{\cosh^2\left(\frac{r}{a}\right)} \quad (2.23)$$

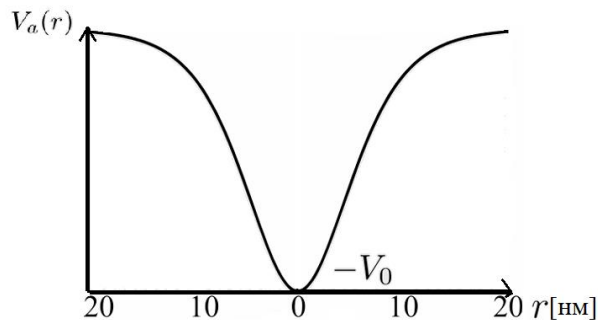


Рисунок 2.3 - Потенциал удержания квантовой точки.

В уравнении Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi}{dx^2} - \left(E + \frac{V_0}{\cosh^2\frac{x}{a}}\right) \psi = 0 \quad 2.24$$

сделаем подстановку:

$$\psi = \left(\cosh \frac{x}{a}\right)^{-2\lambda} u, \lambda = \frac{1}{4} \left(\sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2} + 1} - 1 \right) \quad 2.25$$

уравнение для u примет следующий вид:

$$\frac{d^2u}{dx^2} - \frac{4\lambda}{a} \operatorname{th} \frac{x}{a} \frac{du}{dx} + \frac{4}{a^2} (\lambda^2 - x^2) u = 0 \quad 2.26$$

где:

$$x = \sqrt{-\frac{\mu E a^2}{2\hbar^2}} \quad (2.27)$$

(рассматриваем дискретный спектр $E < 0$).

Если ввести новую независимую переменную $z = -\text{sh}^2 \frac{x}{a}$

то это уравнение приводится к гипергеометрическому уравнению

$$z(1-z) \frac{d^2 u}{dz^2} + \left[\frac{1}{2} - (1-2\lambda)z \right] \frac{du}{dz} - (\lambda^2 - x^2)u = 0 \quad (2.28)$$

Параметры α, β, γ , входящие в гипергеометрическое уравнение общего вида:

$$z(1-z) \frac{d^2 u}{dz^2} + [\gamma - (\alpha + \beta + 1)z] \frac{du}{dz} - \alpha\beta u = 0 \quad (2.29)$$

имеют в следующие значения: $\gamma = \frac{1}{2}, \alpha = x - \lambda, \beta = -x - \lambda$

Два решения уравнения, которые дают соответственно четные и нечетные волновые функции ψ , имеют вид

$$u_1 = F\left(-\lambda + x, -\lambda - x, \frac{1}{2}; z\right) \quad (2.30)$$

$$u_2 = \sqrt{z} F\left(-\lambda + x + \frac{1}{2}, -\lambda - x + \frac{1}{2}, \frac{3}{2}; z\right) \quad (2.31)$$

Эти решения приводят к ограниченным значениям волновых функций при $x = 0$ ($z = 0$).

Для того чтобы волновая функция:

$$\psi = \left(\text{ch} \frac{x}{a}\right)^{-2\lambda} u \quad (2.32)$$

обращалась в ноль при $x \rightarrow \pm\infty$ ($z \rightarrow -\infty$), геометрические функции в выражениях (2.27) и (2.28) должны сводиться к полиномам. Это значит, что, для u_1 , что либо $\lambda - x$, либо $\lambda + x$ являются целыми положительными числами. Второй случай нужно исключить, так как при этом волновая функция при $x \rightarrow \pm\infty$ экспоненциально возрастает. Итак, получаем $\lambda - x = k$ ($k = 0, 1, 2, \dots$) и уровни энергии

$$E_k = -\frac{\hbar^2}{2\mu a^2} \left[\frac{1}{2} \sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2} + 1} - 2k - \frac{1}{2} \right]^2 \quad 2.33$$

Аналогично этому для находим, что условие конечности волновой функции при $x \rightarrow \pm\infty$ выполняется, если

$$\lambda - x - \frac{1}{2} = l \quad (l = 0, 1, 2, \dots)$$

откуда

$$E_l = -\frac{\hbar^2}{2\mu a^2} \left[\frac{1}{2} \sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2} + 1} - (2l + 1) - \frac{1}{2} \right]^2 \quad 2.34$$

Объединяя эти выражения, находим:

$$E_n = -\frac{\hbar^2}{2\mu a^2} \left[\frac{1}{2} \sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2} + 1} - \left(n + \frac{1}{2}\right) \right]^2 \quad 2.35$$

$(n = 0, 1, 2, \dots)$

Число дискретных уровней равно наибольшему целому числу N , удовлетворяющему неравенству:

$$N < \frac{1}{2} \sqrt{\frac{8\mu V_0 a^2}{\hbar^2} + 1} - \frac{1}{2} \quad 2.36$$

Это условие используется для проверки корректности формулы восстановления волновой функции электрона, поскольку она описывает потенциал удержания квантовой точки более реалистично, чем постоянные потенциалы, прямоугольные потенциальные ямы или гармонические потенциалы. Потенциал $V(r)$ характеризуется величиной V_0 , обозначающей высоту, и величиной a , описывающей протяженность потенциала удержания квантовой точки.

2.3 Результаты моделирования волновых функций КТ

Метод реконструкции не требует знания потенциала. Предположение о том, что удерживающий потенциал $V(r)$ имеет форму, приведенную в уравнении (2.23), имеет значение только для достоверности проверки формулы восстановления.

Чтобы найти подходящие значения параметров потенциала a и V_0 , используются сферические квантовые точки с типичными параметрами,

такими как $\Delta E_{ilc} \approx 200$ МэВ для внутризонного перехода проводимости. Кроме того, эффективная масса $GaAs$ используется для описания квантовой точки $InAs/GaAs$. Этот подход подходит, поскольку на эффективную массу точек $InAs$ влияет окружающая среда. $GaAs$ из-за сильного напряжения и условий удержания. В результате получаем согласованный набор связанных и несвязанных радиальных волновых функций $R_l(r)$, для которых мы должны убедиться, что они нормализованы ко всему объему, используя условие нормализации в сферических координатах:

$$1 = \int |\phi(r, \theta, \phi)|^2 r^2 dr d\Omega = \int_0^\infty |R_l(r)|^2 r^2 dr \int |Y_l^m(\theta, \phi)|^2 d\Omega = \int_0^\infty |R_l(r)|^2 r^2 dr \quad 2.37$$

Результирующий набор радиальных волновых функций показан на рисунке 2.4, для удерживающего потенциала зоны проводимости квантовой точки с высотой $V_0 = 0,35$ эВ и протяженностью $a = 6,7$ нм

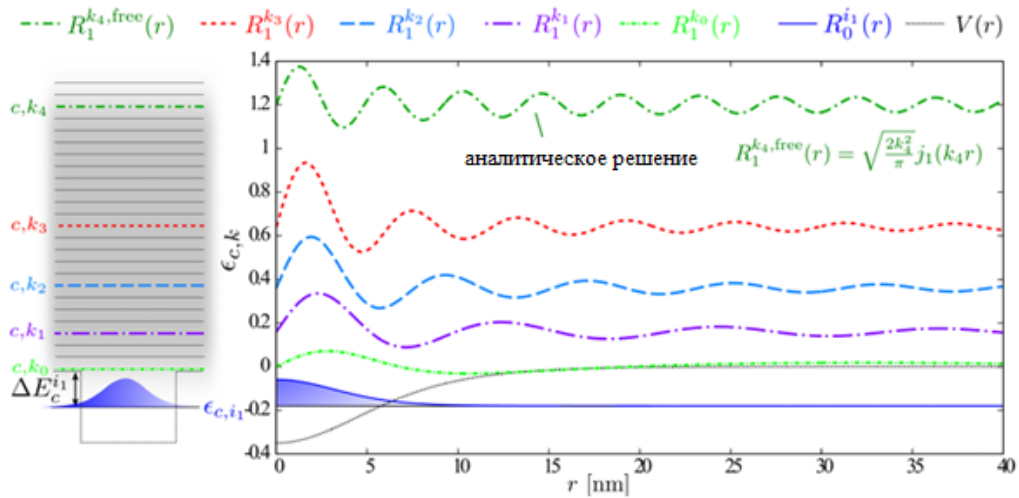


Рисунок 2.4 - Численно рассчитанные радиальные волновые функции

Набор имеет собственное энергетическое значение $\theta_{c,il}$, которое находится в пределах области $V(r)$. Соответствующая связанная волновая функция имеет монотонную s-образную форму, типичную для волновых функций основного состояния в квантовых точках. Волновая функция основного состояния $R_{i10}(r)$ в основном характеризуется своей пространственной протяженностью. Для прямого сравнения с литературными данными пространственная протяженность описывается длинами локализации r_0 (заданными на всю ширину при половинном

максимуме волновой функции основного состояния, связанной с квантовой точкой $FWHM = \sqrt{2\ln 2} r_0$). Типичные значения длины локализации r_0 самособирающихся квантовых точек находятся в диапазоне $r_0 = 3-6$ нм [14].

Несвязанные континуальные объемные волновые функции $Rk_1(r)$, которые являются результатом численных расчетов, имеют дискретные собственные значения энергии из-за конечного объемного объема. При низких энергиях континуума, таких как θ_c, k_0 и θ_c, k_1 , волновые функции континуума сильноизменяются из-за влияния потенциала удержания квантовой точки.

При увеличении энергии континуума θ_c, k волновые функции радиального континуума $Rk_1(r)$. В радиальной симметрии эти свободные решения определяются сферическими функциями Бесселя.

В отличие от этого, для трехмерного уравнения Шредингера, решения представлены плоскими волнами. Плоские волны и свободные сферические волны представлены в двух различных базисах собственных состояний. Один базис можно разложить на другой базис. Следовательно, по аналогии с плоскими волнами, формула восстановления, которая воспроизводит точную волновую функцию основного состояния квантовой точки, если мы примем свободные сферические волны как непрерывные волновые функции.

После сравнения между свободными сферическими волнами и численно точными волновыми функциями континуума, дополнительно необходимо исследовать отклонения между численными и аналитическими энергиями, в частности, зонную структуру θ_c, k континуума. Зонная структура состояний континуума в зоне проводимости θ_c, k показана на рисунке 2.5 для численных решений $Rk_1(r)$, включая квантовую точку удерживающий потенциал. Параболическая t показывает соответствии сплошных состояний зоны проводимости.

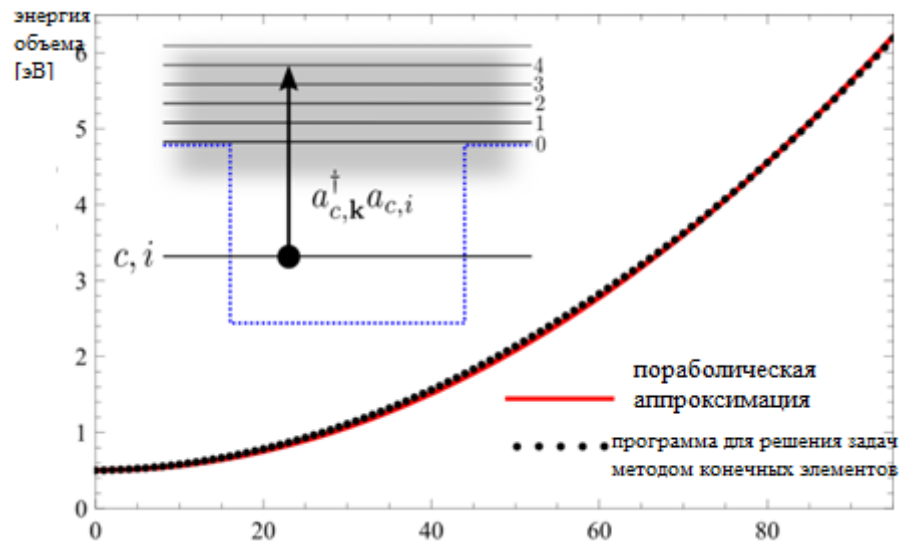


Рисунок 2.5 - Численно рассчитанная зонная структура

При выводе формулы восстановления предполагается параболический вид удерживающего потенциала, что подтверждается для реалистичных волновых функций. Используя параболическое дисперсионное уравнение, соответствующие приблизительные значения k вычисляются из собственных энергий $\theta_{c,k}$

Эксперименты, проведенные с использованием спектроскопии фотоиндуцированного поглощения и фотоспектроскопии, продемонстрировали возможность измерения внутреннего поглощения, связанного с континуумом, в квантовых точках *InAs/GaAs*, хотя оно и имеет меньшую интенсивность по сравнению с поглощением при межзонных переходах [8]. Предположение о монотонном поведении обычно верно для основных состояний квантовой точки $i = i1$. В то же время для состояний более высокого уровня это условие монотонности часто не выполняется. Из-за абсолютного значения в уравнении теряется информация о знаке градиента волновой функции, что создает ограничение, заключающееся в невозможности воспроизведения немонотонного поведения волновой функции. Тем не менее, даже для немонотонных волновых функций важные данные о пространственном расширении волновой функции все еще могут быть получены с помощью формулы восстановления, поскольку пространственное расширение не зависит от знака градиента

В однородных объемных материалах волновые функции обычно представляются в виде плоских волн. В данном случае, при выводе формулы восстановления используется приближение плоской волны, которое не учитывает влияние потенциала удержания квантовой точки на волновые функции объемного континуума. Однако наличие этого потенциала может изменить волновые функции континуума, что требует более сложного описания, выходящего за рамки плоской волны. Поэтому важно проверить один ключевой аспект: поскольку решение уравнения - плоские волны, необходимо исследовать его корректность в контексте формулы восстановления для правильных несвязанных состояний континуальной системы с квантовыми точками.

Рассмотрим проверку корректности формулы восстановления для реалистичных континуальных волновых функций, выходящих за рамки приближения плоской волны. На рисунке 2.6 представлен обзор этой проверки. Принимая во внимание радиальный удерживающий потенциал $V(r)$ квантовой точки, проводится численное решение радиального уравнения Шредингера. В результате получается согласованный набор радиальных волновых функций, который включает как радиальные волновые функции квантовых точек $R_i l(r)$, так и континуальные волновые функции $R_k l(r)$, выходящие за пределы плоской волны. Кроме того, радиальное уравнение Шредингера позволяет определить собственные энергии как квантовой точки, так и континуума, что в свою очередь определяет зонную структуру $\epsilon_{c,k}$. Волновые функции и зонная структура сплошной зоны проводимости.

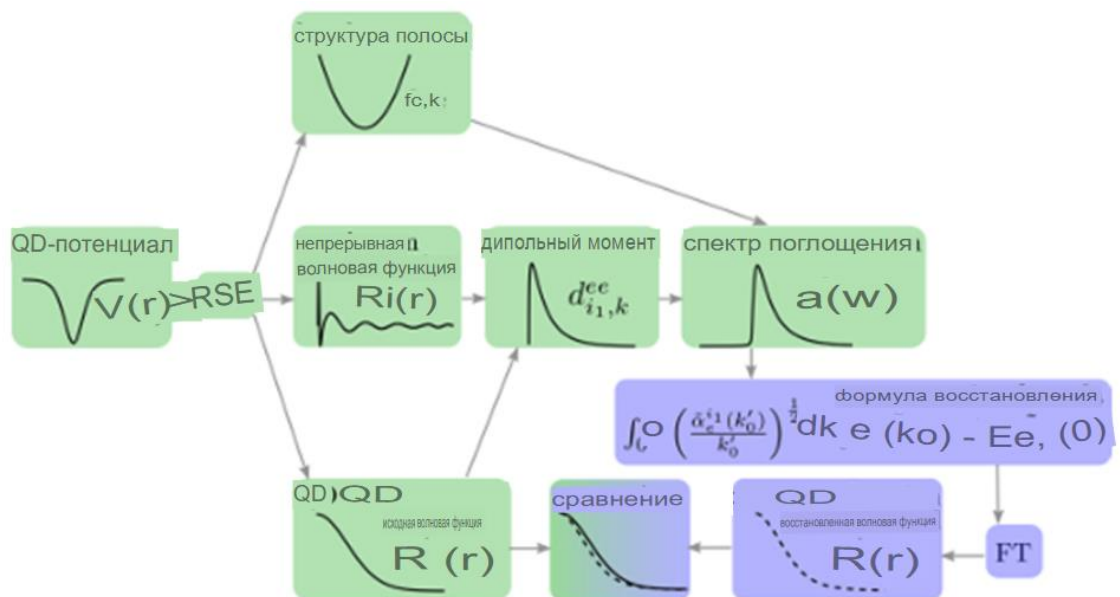


Рисунок 2.6 – Проверка корректности формулы восстановления

Знание дипольного момента и зонной структуры позволяет определять внутризонный спектр поглощения вне рамок приближения плоской волны. Анализы спектров внутризонного поглощения для различных вариантов потенциала удержания квантовой точки могут служить входными данными для формулы восстановления, которая была выведена с использованием плоских волн для континуальных волновых функций, с целью восстановления волновой функции основного состояния квантовой точки.

В заключение, сравнение исходной и восстановленной волновых функций основного состояния квантовой точки позволяет оценить точность формулы восстановления за пределами приближения плоской волны. Если волновые функции континуума точно описываются плоскими волнами, то восстановленная волновая функция основного состояния квантовой точки также будет точной. Отклонение между исходной и восстановленной волновыми функциями может быть использовано для оценки погрешности, возникающей из-за применения плоских волн при выводе формулы восстановления вместо волновых функций, учитывающих влияние потенциала удержания квантовой точки.

3 Особенности использования КТ в солнечных элементах

3.1 Обзор литературных данных

Полупроводники играют столь же важную роль в применении устройств для выработки электроэнергии в виде солнечных элементов, которые поглощают солнечное излучение и преобразуют его в электрическую энергию. В полупроводниках фундаментальная энергия запрещенной зоны определяет их оптическое и электронное поведение и, возможно, является наиболее важным параметром практически для всех применений, связанных с поглощением и излучением фотонов, и, следовательно, играет жизненно важную роль в диапазоне фотонов, которые солнечный элемент может поглощать из солнечного спектра, и последующем преобразовании солнечной энергии в электрическую. Солнечный свет - это форма электромагнитного излучения, которое состоит из частиц, называемых фотонами. Каждый фотон связан с определенной длиной волны и энергией [3].

Чтобы поглощенный фотон генерировал носитель заряда (электрон и дырку), он должен передавать свою энергию носителю заряда путем возбуждения электрона из валентной зоны в зону проводимости. Когда свет падает на полупроводник, только солнечные фотоны с очень специфической запрещенной зоной, характерной для полупроводникового материала, могут быть поглощены и использованы для производства электричества. Другими словами, является ли сбалансированным условие возбуждения носителей заряда в солнечной энергии ячейки. Следовательно, фотоны с энергией ниже запрещенной зоны материала не могут продвигать заряженные носители в зону проводимости и не вносят вклад в генерируемый фототок, приводящий к потере передачи, в то время как энергии обмена фотоны превышают полосу пропускания материала[17].

Уравновешивание горячих носителей с решеткой (охлаждение горячих носителей) достигается за счет рассеяния носителей на фононах, при высоких энергиях горячих носителей в охлаждении участвуют продольные оптические

(LO) фононы, а при более низких температурах носителей задействованы акустические фононы.

Врожденное несоответствие между падающим солнечным спектром и оптической шириной запрещенной зоны материала поглотителя из-за непоглощения фотонов с меньшей шириной запрещенной зоны и термализации фотонов с большей шириной запрещенной зоны являются двумя фундаментальными потерями, которые накладывают серьезные ограничения на эффективность работы 31% для обычных устройств, основанных на термодинамическом детальном балансовом анализе солнечной радиации Шокли и Квиссера (1961).

Искреннее желание обойти эти проблемы потребовало исследования альтернативного пути поглощения и преобразования световой энергии путем управления пространственным распределением оптической энергии с использованием ряда многообещающих оптимизирующих маршрутов, которые проложили путь к солнечным элементам третьего поколения с новым материалом для поглощения фотонов, способным использовать неиспользуемые области солнечной системы. Поэтому исследования были направлены на поиск подходящего полупроводникового поглощающего материала, обладающего следующими характеристиками: (i) настраиваемая ширина запрещенной зоны для лучшего соответствия солнечному излучению. спектр (ii) увеличенная площадь поверхности для увеличения спектра поглощения и (iii) фононное узкое место для замедления охлаждения горячего носителя привели к появлению квантовых точек. Выбор в пользу квантовых точек в настоящее время объясняется их уникальными физическими свойствами и возможностью их модификации путем изменения формы и размеров точки.

Все солнечные элементы на основе QD известны как элементы третьего поколения. Термин "солнечные элементы третьего поколения" относится ко всем новым конструкциям солнечных элементов, позволяющим преодолеть ограничение ширины запрещенной зоны Шокли-Квиссера (SQ), как правило,

при низкой стоимости. Квантовые точки представляют собой частицы с физическими размерами, меньшими, чем экситонный радиус Бора. Малый размер квантовых точек приводит к “квантовому ограничению”. Эффекты квантового удержания возникают, когда размер квантовой точки сравним с объемным экситонным радиусом Бора (среднее расстояние между возбужденным электроном в зоне проводимости и дыркой, которую он оставляет в валентной зоне)[12].

Квантовое ограничение означает, что движение носителей заряда ограничено во всех трех пространственных измерениях таким образом, что энергетические уровни, на которых обитают носители, становятся дискретными с конечным разделением между ними.

Дискретные электронные состояния в квантовых точках являются точной копией спектров атомной энергии, что часто дает им прозвище “искусственные атомы”. Такое поведение резко контрастирует с объемным полупроводником, электронная энергия которого уровни распределены непрерывными полосами. Излучение и длина волны поглощения КТ соответствует энергии их запрещенной зоны, это еще больше делает КТ жизнеспособными и подходящими кандидатами для высокоэффективных солнечных элементов, поскольку их запрещенная зона может быть спроектирована с желаемыми энергиями, чтобы лучше соответствовать солнечному спектру.

Возможность модулировать пространственную вероятность фотовозбужденных носителей (электронов и дырок) в КТ позволяет настраивать полосу поглощения КТ в широком диапазоне, достаточно широком для увеличения поглощения фотонов. Таким образом, квантовые точки излучают и поглощают свет с определенной длиной волны, которая зависит от размера точек. Точки меньшего размера расположены ближе к синему концу спектра, в то время как точки большего размера - к красному спектру, как показано на рисунке 3.1, в результате энергия запрещенной зоны

расширяется, что приводит к синему смещению в спектрах поглощения и излучения запрещенной зоны [4].

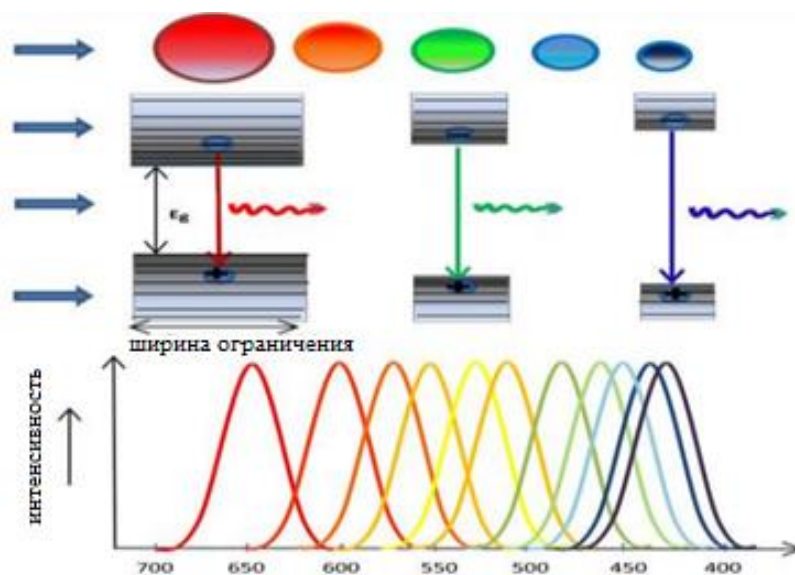


Рисунок 3.1 - Оптические спектры квантовых точек с уменьшением размера

С применением технологии, известной как множественная генерация экситонов (*MEG*), ученые разработали солнечную панель, способную генерировать на 30% больше электричества от каждого синего фотона поглощенного света по сравнению с традиционными методами. Эти новые солнечные элементы могут в скором времени превзойти все существующие коммерческие фотоэлектрические технологии. Они демонстрируют высокую внешнюю квантовую эффективность (*EQE*), превышающую 100% для фотонов солнечного спектра. Важно отметить, что *EQE* не является коэффициентом полезного действия (КПД), а представляет собой отношение пар дырка-электрон к количеству фотонов, попадающих на солнечную панель. Внутренняя эффективность, в свою очередь, измеряет соотношение между количеством поглощенных фотонов и произведенных электронов. На сегодняшний день ни одна фотоэлектрическая ячейка не достигала *EQE* близкой к 100%. Традиционные полупроводники вырабатывают лишь один электрон на каждый фотон, в то время как оставшаяся энергия теряется в виде тепла. Кристаллические нанометровые структуры, такие как квантовые точки, позволяют обойти это ограничение, что приводит к снижению потерь

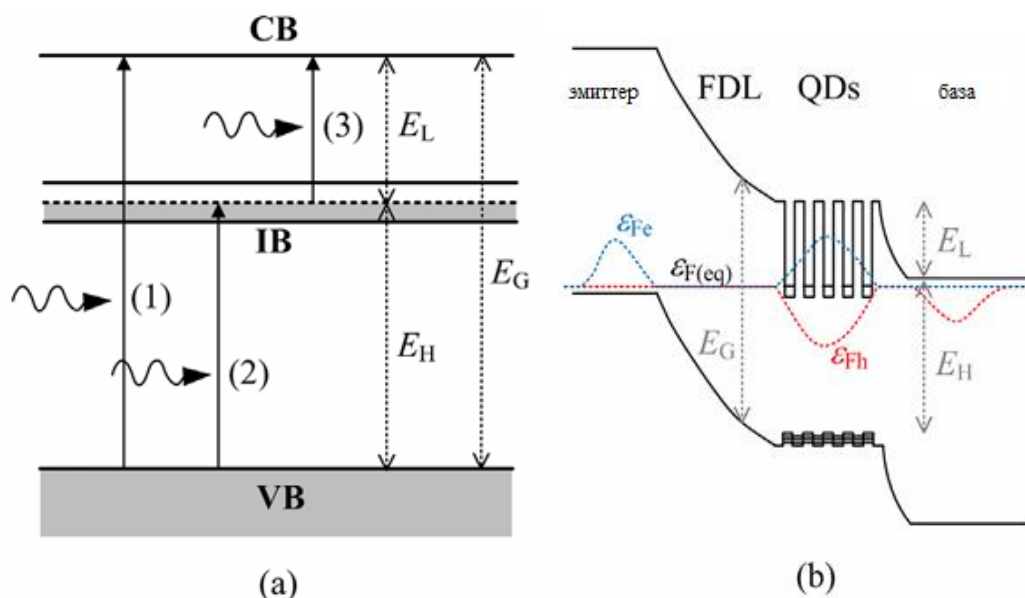
энергии и увеличению выхода электричества. Благодаря своему микроскопическому размеру квантовые точки ограничивают движение электронов и предотвращают рассеивание энергии, что позволяет максимально эффективно использовать энергию фотонов.

Технология *MEG* эффективно использует большую часть энергии фотонов и демонстрирует *EQE* на уровне 114%. Это открывает перспективы для создания полноразмерных солнечных панелей на основе квантовых точек, которые будут значительно мощнее аналогичных панелей на традиционных полупроводниках. В настоящее время КПД опытной ячейки составляет всего 4,5%, однако это лишь лабораторный образец, предназначенный для демонстрации эффекта *MEG*, а не для генерации электроэнергии. Ученые уверены, что в будущем солнечные панели на квантовых точках значительно превзойдут традиционные по мощности и станут экологически чистым источником энергии нового поколения.

Солнечные элементы промежуточной полосы пропускания (*IBSC*) были предложены в качестве средства, позволяющего превзойти эффективность однозонных солнечных элементов за счет поглощения фотонов энергии, находящихся ниже ширины запрещенной зоны. Материалы с промежуточной зоной характеризуются наличием набора электронных состояний, называемых промежуточной зоной (*IB*), в пределах запрещенной зоны полупроводника *EG*, разделяющей ее на две подзоны, *EL* и *EH*, причем *EL* – подзона с наименьшей энергией. Из-за этого *IB* фотоны с энергией ниже запрещенной зоны могут перекачивать электроны из валентной зоны (*VB*) в *IB*, фотоны, помеченные как 2 на рисунке 3.2 (а) и из *IB* в зону проводимости (*CB*), фотоны, помеченные как 3 на рисунке 3.2 (а). Предел эффективности преобразования этих ячеек составляет 63,2% и может быть увеличен более чем на 80%, если они объединены в структуру с несколькими *IB* [2].

С момента появления этой концепции было предложено несколько подходов к ее реализации. Эти подходы можно разделить на те, которые основаны на (а) квантовых точках (КТ *IBSC*) рисунок 3.2 (б). Недавно был

опубликован исчерпывающий обзор с подробным описанием экспериментальных достижений каждого подхода. Эти достижения, особенно те, которые имеют отношение к обсуждению данного письма и относятся к категории *QD IBSC*, можно резюмировать следующим образом. Измерения квантовой эффективности показали, что фотоны с энергией ниже запрещенной зоны, обладающие энергией, достаточной для перекачки электронов из *VB* в *IB*, способны создавать фототок. Однако это было недостаточным доказательством того, что *QD IBSCs* потенциально могут превышать эффективность однозонных солнечных элементов, причина заключалась в механизме продвижения электрона от *IB* к *CB*. Если бы этот механизм представлял собой тепловую накачку, то дополнительный фототок с подзонным зазором не подразумевал бы дополнительной электрической работы. Напротив, если бы этот механизм был обусловлен поглощением второго фотона, была бы возможна дополнительная электрическая работа. В 2006 году было показано, что при освещении квантовой точки *IBSC* одновременно с фотонами низкой энергии, способными только перекачивать электроны из *IB* в *CB*, и фотонами с энергией, способной перекачивать электроны из *VB* в *IB*, было продемонстрировано, что электроны могут быть перекачиваются из *IB* в *CB* благодаря поглощению фотонов. Недавно переход из *IB* в *CB* был спектрально разрешен в зависимости от энергии фотона. Кроме того, при измерении *QD IBSC* в условиях концентрированного света было обнаружено, что *IB* не ограничивает напряжение холостого хода *QDIBSC*. Также было исследовано влияние легирования квантовой точки на поглощение света. Несмотря на все эти экспериментальные результаты, прямое измерение фототока, вырабатываемого ячейкой, диаграмма запрещенной зоны материала *IB* показана на рисунке 3.2.



а) упрощенная диаграмма; б) идеализированная диаграмма

Рисунок 3.2 - Диаграмма запрещенной зоны материала *IB*

Форма квантовых точек может существенно влиять оптические свойства. Например, сферические квантовые точки имеют однородное распределение электронов, что позволяет им эффективно поглощать свет в широком диапазоне длин волн. Однако, квантовые точки в форме стержней или пластин могут демонстрировать более узкие спектры поглощения и эмиссии, что делает их особенно привлекательными для определенных приложений.

Использование квантовых точек разной формы в солнечных элементах может привести к созданию многослойных структур, где каждый слой будет оптимизирован для поглощения света в своем диапазоне длин волн. Это позволит значительно увеличить общую эффективность преобразования солнечной энергии в электрическую. Например, верхний слой может состоять из квантовых точек, оптимизированных для поглощения коротковолнового света, в то время как нижний слой будет нацелен на длинноволновый свет.

Кроме того, квантовые точки могут быть интегрированы в гибкие солнечные панели, что открывает новые возможности для их применения в

различных условиях. Гибкие солнечные элементы могут быть использованы на нестандартных поверхностях, таких как одежда или автомобили, что делает их более универсальными и доступными.

Несмотря на все преимущества, использование квантовых точек в солнечных элементах также сталкивается с определенными вызовами. Например, стабильность и долговечность таких материалов остаются предметом активных исследований. Тем не менее, с развитием технологий и материаловедения, квантовые точки разной формы имеют все шансы занять значительное место в будущем солнечной энергетике.

Одним из ключевых аспектов, который необходимо учитывать при разработке солнечных элементов на основе квантовых точек, является их взаимодействие с окружающей средой. Например, влияние влаги, температуры и ультрафиолетового излучения может существенно снижать эффективность работы таких материалов. Поэтому исследователи активно работают над созданием защитных покрытий и композитных материалов, которые помогут увеличить срок службы квантовых точек и сохранить их уникальные свойства.

Также стоит отметить, что синтез квантовых точек с заданными характеристиками - это сложный и многоступенчатый процесс. Разработка новых методов синтеза, позволяющих получать квантовые точки с высокой однородностью и контролируемыми размерами, является важной задачей для ученых. Совершенствование технологий производства может привести к снижению затрат на изготовление солнечных панелей и, как следствие, к более доступной солнечной энергии для широких слоев населения.

Важным направлением исследований является также интеграция квантовых точек с другими материалами, такими как перовскиты, которые уже продемонстрировали высокую эффективность в солнечных элементах. Комбинирование этих двух технологий может привести к созданию гибридных солнечных панелей, которые будут обладать еще более высокими показателями преобразования солнечной энергии.

3.2 Влияние формы КТ на эффективность СЭ

Форма квантовых точек может существенно влиять на их оптические свойства. Например, сферические квантовые точки имеют однородное распределение электронов, что позволяет им эффективно поглощать свет в широком диапазоне длин волн. Однако, квантовые точки в форме стержней или пластин могут демонстрировать более узкие спектры поглощения и эмиссии, что делает их особенно привлекательными для определенных приложений.

Кроме того, квантовые точки могут быть интегрированы в гибкие солнечные панели, что открывает новые возможности для их применения в различных условиях. Гибкие солнечные элементы могут быть использованы на нестандартных поверхностях, таких как одежда или автомобили, что делает их более универсальными и доступными.

Несмотря на все преимущества, использование квантовых точек в солнечных элементах также сталкивается с определенными вызовами. Например, стабильность и долговечность таких материалов остаются предметом активных исследований. Тем не менее, с развитием технологий и материаловедения, квантовые точки разной формы имеют все шансы занять значительное место в будущем солнечной энергетике.

Одним из ключевых аспектов, который необходимо учитывать при разработке солнечных элементов на основе квантовых точек, является их взаимодействие с окружающей средой. Например, влияние влаги, температуры и ультрафиолетового излучения может существенно снижать эффективность работы таких материалов. Поэтому исследователи активно работают над созданием защитных покрытий и композитных материалов, которые помогут увеличить срок службы квантовых точек и сохранить их уникальные свойства.

Также стоит отметить, что синтез квантовых точек с заданными характеристиками - это сложный и многоступенчатый процесс. Разработка новых методов синтеза, позволяющих получать квантовые точки с высокой

однородностью и контролируемыми размерами, является важной задачей для ученых. Совершенствование технологий производства может привести к снижению затрат на изготовление солнечных панелей и, как следствие, к более доступной солнечной энергии для широких слоев населения.

Важным направлением исследований является также интеграция квантовых точек с другими материалами, такими как перовскиты, которые уже продемонстрировали высокую эффективность в солнечных элементах. Комбинирование этих двух технологий может привести к созданию гибридных солнечных панелей, которые будут обладать еще более высокими показателями преобразования солнечной энергии.

Кроме того, квантовые точки могут быть интегрированы в гибкие солнечные панели, что открывает новые возможности для их применения в различных условиях. Гибкие солнечные элементы могут быть использованы на нестандартных поверхностях, таких как одежда или автомобили, что делает их более универсальными и доступными.

Несмотря на все преимущества, использование квантовых точек в солнечных элементах также сталкивается с определенными вызовами. Например, стабильность и долговечность таких материалов остаются предметом активных исследований. Тем не менее, с развитием технологий и материаловедения, квантовые точки разной формы имеют все шансы занять значительное место в будущем солнечной энергетике.

Также стоит отметить, что синтез квантовых точек с заданными характеристиками - это сложный и многоступенчатый процесс. Разработка новых методов синтеза, позволяющих получать квантовые точки с высокой однородностью и контролируемыми размерами, является важной задачей для ученых. Совершенствование технологий производства может привести к снижению затрат на изготовление солнечных панелей и, как следствие, к более доступной солнечной энергии для широких слоев населения.

Важным направлением исследований является также интеграция квантовых точек с другими материалами, такими как перовскиты, которые

уже продемонстрировали высокую эффективность в солнечных элементах. Комбинирование этих двух технологий может привести к созданию гибридных солнечных панелей, которые будут обладать еще более высокими показателями преобразования солнечной энергии.

На протяжении многих лет исследователи уделяют значительное внимание полупроводникам, легированным марганцем и сульфидом цинка, а также квантовым точкам из этих материалов, благодаря их уникальным оптическим свойствам. Эти свойства можно изменять, используя квантовые эффекты, которые влияют на ширину запрещенной зоны и, следовательно, на способность материала поглощать свет. Объемный сульфид цинка имеет широкую запрещенную зону, что ограничивает его эффективность в качестве поглотителя видимого света. Квантовые точки из ZnS обладают еще более широкой запрещенной зоной, что делает их менее подходящими для использования в солнечных элементах.

Поскольку сульфид цинка является экологически чистым и распространенным материалом, существует необходимость в разработке методов, позволяющих изменить его энергетические характеристики для улучшения поглощения солнечной энергии. Одним из таких методов является легирование, которое вводит промежуточные уровни энергии в запрещенную зону. Эти уровни могут значительно изменить электронную структуру и переходы между энергетическими состояниями.

Ионы марганца, легирующие ZnS , выступают в роли центров рекомбинации для возбужденных электронов и дырок, что приводит к характерному оранжевому свечению. Это свечение связано с переходами между состояниями иона марганца, находящегося в определенной координации с сульфидными ионами. При увеличении концентрации марганца оранжевое свечение начинает угасать, и появляется красная полоса излучения, происхождение которой до конца не изучено. Это может быть связано с взаимодействиями между ионами марганца или с захваченными состояниями, возникающими на поверхности квантовых точек.

Изучение этих явлений имеет как фундаментальное, так и практическое значение, поскольку взаимодействия между различными центрами в квантовых точках могут влиять на эффективность фотогальванических устройств и других оптоэлектронных приложений. Понимание механизмов, лежащих в основе изменения оптических свойств легированных квантовых точек, открывает новые горизонты для создания более эффективных солнечных элементов, а также для разработки светодиодов и лазеров на основе полупроводников.

Одним из ключевых аспектов, требующих дальнейшего изучения, является влияние различных условий синтеза на структуру и свойства легированных квантовых точек. Например, температура, время реакции и концентрация легирующих ионов могут существенно изменить размер и морфологию квантовых точек, что, в свою очередь, влияет на их оптические характеристики. Оптимизация этих параметров может привести к созданию материалов с заданными свойствами, что особенно важно для применения в солнечных элементах, где эффективность поглощения света критически важна.

Кроме того, взаимодействие между ионами марганца и сульфидными ионами может привести к образованию новых энергетических уровней, которые могут быть использованы для управления процессами рекомбинации. Это открывает возможности для создания более сложных систем, в которых можно контролировать не только интенсивность свечения, но и его спектральные характеристики. Например, можно рассмотреть возможность создания многослойных структур, в которых квантовые точки с различными уровнями легирования будут взаимодействовать друг с другом, создавая сложные оптические эффекты и улучшая общую эффективность устройства. Такие многослойные структуры могут быть спроектированы так, чтобы оптимизировать поглощение света в различных диапазонах спектра, что особенно актуально для солнечных элементов, где необходимо максимальное использование солнечной энергии.

Кроме того, исследование взаимодействий между легированными ионами марганца и сульфидными ионами может привести к созданию новых типов фотокатализаторов, которые будут более эффективными в процессах, таких как разложение воды или фотосинтез. Эти процессы требуют точного контроля над энергетическими уровнями и рекомбинацией зарядов, что может быть достигнуто путем тщательной настройки условий синтеза и легирования.

Также стоит отметить, что легирование ZnS и создание квантовых точек открывают новые горизонты для разработки светодиодов и лазеров. Оптимизация оптических свойств легированных материалов может привести к созданию источников света с высокой яркостью и эффективностью, что имеет важное значение для различных приложений, включая освещение, дисплеи и оптические коммуникации.

Рассмотрим синтез наночастиц ZnS , легированных марганцем (Mn), с различными концентрациями легирования (0% и 5%). Для получения этих наночастиц применяются два метода: мокрое химическое соосаждение и импульсная лазерная абляция в водной среде. Процесс начинается с растворения определенных количеств соединений цинка и марганца в деионизированной воде при постоянном перемешивании при комнатной температуре. Затем в полученный раствор добавляется соль натрия, что приводит к образованию белого осадка. Этот осадок собирается с помощью фильтровальной бумаги, центрифугируется и промывается раствором воды с этанолом, после чего высушивается при температуре 120 °C на протяжении ночи.

Для лазерной абляции белый порошок прессуется в форму мишени и отжигается. В эксперименте используется Nd -лазер с длиной волны 266 нм и частотой повторения 10 Гц. Лазерный луч фокусируется с помощью линзы и направляется на мишень, погруженную в деионизированную воду. Процесс абляции продолжается несколько часов для получения достаточного количества образцов.

Характеризация полученных наночастиц проводится с использованием рентгеновской дифракции (*XRD*), где раствор квантовых точек наносится на кремниевую подложку и сушится. Также проводятся электронно-микроскопические исследования с использованием ПЭМ, что позволяет получить изображения наночастиц. Измерения фотолюминесценции выполняются при комнатной температуре с использованием фемтосекундного лазера в качестве источника возбуждения. Спектры фотолюминесценции и фотолюминесценции с возбуждением (*PLE*) анализируются на специализированном флуоресцентном спектрометре. Эти методы позволяют получить информацию о оптических свойствах наночастиц, а также о их структурной организации и морфологии.

Результаты рентгеновской дифракции (*XRD*) позволяют определить кристаллическую структуру синтезированных наночастиц *ZnS: Mn*. Ожидается, что легирование марганцем повлияет на параметры решетки и, возможно, приведет к изменению фазового состава. Анализ полученных данных даст возможность оценить степень кристалличности и выявить возможные изменения в структуре, вызванные легированием.

Электронно-микроскопические исследования (ПЭМ) предоставят детализированные изображения наночастиц, что позволит оценить их размер, форму и распределение. Эти параметры имеют критическое значение для понимания их оптических свойств и потенциальных приложений в области фотоники и электроники. Ожидается, что легированные наночастицы будут демонстрировать улучшенные характеристики по сравнению с нелегированными, что может быть связано с изменениями в электронной структуре и локализацией уровней энергии.

Измерения фотолюминесценции позволяют исследовать оптические свойства наночастиц, такие как интенсивность и длина волны эмиссии. Ожидается, что легирование марганцем приведет к появлению новых уровней энергии, что, в свою очередь, может привести к изменению спектров фотолюминесценции. Это явление связано с тем, что марганец, будучи

легирующим элементом, может создавать дополнительные уровни в запрещенной зоне полупроводника, что способствует улучшению рекомбинации носителей заряда и, как следствие, увеличению интенсивности фотолюминесценции.

Важным аспектом исследования является также влияние концентрации легирования на оптические свойства наночастиц. Ожидается, что при увеличении содержания марганца в структуре ZnS будут наблюдаться изменения в длине волны эмиссии, что может быть связано с эффектом переноса заряда между ионами марганца и матрицей ZnS . Это может привести к сдвигу в спектрах фотолюминесценции, что будет свидетельствовать о наличии новых энергетических уровней, способствующих улучшению оптических характеристик.

Кроме того, анализ полученных спектров фотолюминесценции и фотолюминесценции с возбуждением (*PLE*) позволит более детально изучить механизмы рекомбинации носителей заряда в легированных и нелегированных наночастицах. Сравнительный анализ этих данных даст возможность выявить, как легирование марганцем влияет на динамику процессов, происходящих в наночастицах

3.3 Исследование перспектив применения квантовых точек в солнечных элементах

Солнце является уникальным и неисчерпаемым источником энергии и жизни на нашей планете. Энергия, которую оно излучает, лежит в основе формирования ветров, течений, температуры океанов, биомассы и способствует образованию таких ископаемых, как торф, бурый и каменный уголь, нефть и природный газ на протяжении тысячелетий. Тем не менее, эта энергия является опосредованной и аккумулируется на протяжении долгого времени. В контексте человеческой цивилизации Солнце выступает как бесконечный источник энергии. Внутри Солнца происходит термоядерный синтез, в ходе которого атомы водорода соединяются, образуя гелий и выделяя при этом огромное количество энергии, которая распространяется в

виде радиации и достигает Земли. Здесь она преобразуется в другие формы энергии, используемые в альтернативной энергетике. Главная задача солнечной энергетике заключается в разработке решений для хранения энергии, сопоставимой с запасами углеводородного топлива.

Постоянные инновации в области электрификации приводят к устойчивому увеличению потребления энергии. Значительная доля мирового спроса на электроэнергию будет удовлетворяться за счет альтернативных источников. К ним относятся нетрадиционные источники энергии, такие как солнечная, ветровая и геотермальная энергия. В настоящее время эти источники используются гораздо реже, чем ископаемое топливо, но обладают значительным потенциалом для дальнейшего развития. В настоящее время активно ищутся альтернативные материалы, которые могут быть достаточно недорогими и технологичными, а также обеспечивать коэффициент полезного действия свыше 30%. Одним из возможных вариантов является $CuInGaSe_2 / CdS$ благодаря высокому коэффициенту поглощения $CuInGaSe_2$, его долговечной стабильности и более низкой стоимости. Также имеются многопереходные солнечные элементы на основе $GaInN / GaN / GaInP / GaAs / Si / InGaAsP$, эффективность которых была подтверждена в ряде исследований. В данной работе будет проведена оценка предельной эффективности указанных элементов. Простой метод для вычисления оптимальных запрещенных зон многопереходных солнечных элементов основывается на гипотезе предельной эффективности: каждый фотон с энергией, превышающей энергию запрещенной зоны E_g , генерирует один электронный заряд.

В последние годы наблюдается возрастающий интерес к исследованию воздействия электрического поля на свойства полупроводниковых систем с низкой размерностью. Это обусловлено тем, что в таких системах существует высокая степень свободы в управлении зонной структурой, примесными состояниями и оптическими характеристиками как с помощью внешнего, так и внутреннего электрического поля. Например, в квантовых ямах

электрическое поле, ориентированное вдоль оси размерного квантования, модифицирует электронный спектр и волновые функции. Это приводит к образованию пиков в вероятности оптических переходов в зависимости от воздействия электрического поля. Существенные изменения примесных состояний в наноструктурах под воздействием внешнего электрического поля открывают новые возможности для изучения квантово-размерного эффекта Штарка в спектрах примесного электропоглощения низкоразмерных систем. Это особенно значимо, поскольку эффект Штарка в легированных полупроводниковых наноструктурах является физическим феноменом, который может быть использован в различных устройствах, в том числе в альтернативной энергетике.

Солнечная батарея на основе квантовых точек (QDSC) представляет собой устройство, использующее квантовые точки в качестве фотоэлектрического материала. Она предназначена для замены традиционных объемных материалов, таких как кремний, селенид меди-индия-галлия (CIGS) и теллурид кадмия (CdTe). Квантовые точки обладают регулируемыми запрещёнными зонами, которые могут изменяться в широком диапазоне энергий в зависимости от их размера. В отличие от объемных материалов, ширина запрещённой зоны в которых определяется выбором конкретного материала, это свойство делает квантовые точки особенно привлекательными для многопереходных солнечных батарей, использующих различные материалы для захвата разных частей солнечного спектра. Эффективность таких солнечных элементов превышает 18,1%. Солнечные элементы на основе квантовых точек могут повысить максимально возможную термодинамическую эффективность преобразования солнечных фотонов до примерно 66%, благодаря использованию горячих фотогенерированных носителей для создания более высокого фотопотенциала или фототока.

Стандартные солнечные элементы на основе квантовых точек состоят из стеклянной подложки, на которой располагается прозрачный

электропроводящий оксид индия-олова (*ITO*), пропускающий свет. Также в конструкции используется проводящий полимер, поли(3,4-этилендиокситиофен) полистиролсульфонат (*PEDOT:PSS*), который выполняет функции блокировщика электронов и инжектора дырок в слой *ITO*. Для обеспечения оптимальной работы между металлическим катодом и проводящим полимером применяются квантовые точки, например, селенид кадмия, а также поли (3-гексилтиофен)[19].

Главная идея разработки солнечных батарей с использованием квантовых точек заключается в изменении спектра поглощения и ширины запрещенной зоны наноструктуры. Это свойство делает квантовые точки перспективными для многопереходных солнечных элементов, которые используют различные материалы для повышения эффективности за счет улавливания нескольких участков солнечного спектра. На сегодняшний день многопереходные солнечные элементы изготавливаются из нескольких различных полупроводников. *P-n*-переход каждого материала генерирует электрический ток в ответ на различные длины волн света. Поэтому разумно рассмотреть возможность использования более ограниченного набора материалов, способных охватывать более широкий спектральный диапазон солнечного света.

Преимущества квантовых точек в солнечных элементах:

1. Широкий диапазон поглощения: Квантовые точки можно настроить для захвата света в различных диапазонах спектра, что способствует повышению эффективности преобразования солнечной энергии. Это особенно актуально для солнечных панелей, поскольку солнечный свет охватывает широкий спектр длин волн.

2. Повышенная эффективность: Исследования показывают, что солнечные панели на основе квантовых точек могут демонстрировать более высокую эффективность по сравнению с традиционными кремниевыми панелями. Это связано с возможностью использования нескольких фотонов для генерации одного электрона, что увеличивает общий выход энергии.

3. Гибкость в производстве: Квантовые точки могут быть получены различными способами, включая химический синтез и печать, что позволяет создавать легкие и гибкие солнечные панели. Это открывает новые перспективы для интеграции солнечных технологий в различные конструкции и на разные поверхности.

4. Низкие затраты на сырьё: Применение квантовых точек в солнечных элементах может существенно сократить расходы на сырьё по сравнению с традиционными методами. Квантовые точки можно производить из более доступных и недорогих материалов, что делает их более экономически выгодными для массового производства солнечных панелей. Это также может способствовать снижению цен на солнечную энергетику в целом, делая её более доступной для широкой аудитории.

5. Возможность создания многослойных солнечных панелей: Квантовые точки могут быть применены для разработки многослойных солнечных панелей, которые эффективно поглощают свет в разных диапазонах спектра. Это значительно повышает общую эффективность преобразования солнечной энергии, поскольку каждый слой может быть оптимизирован для работы с определённой частью солнечного спектра. В результате солнечные панели на основе квантовых точек могут стать более конкурентоспособными по сравнению с традиционными однослойными моделями.

6. Устойчивость к деградации: Квантовые точки обладают высокой стойкостью к деградации, что делает их идеальными для использования в солнечных элементах, подверженных воздействию различных климатических условий. Это может привести к увеличению срока службы солнечных панелей и снижению расходов на их обслуживание и замену.

7. Интеграция с другими технологиями: Квантовые точки открывают новые возможности для взаимодействия с различными технологиями, такими как фотоника, электроника и даже биомедицинские области. Например, их можно комбинировать с органическими солнечными элементами для

создания гибридных систем, способных эффективно использовать как солнечную, так и искусственную световую энергию. Это может привести к разработке более универсальных и адаптивных солнечных панелей, способных функционировать в различных условиях освещения.

8. Возможности для инновационных приложений: Квантовые точки могут найти применение не только в традиционных солнечных панелях, но и в новых формах солнечной энергетики, таких как прозрачные солнечные элементы, которые можно интегрировать в окна зданий или экраны мобильных устройств. Это позволит создавать «умные» здания, которые могут вырабатывать собственную энергию, не занимая дополнительного пространства. Такие технологии могут существенно изменить подход к архитектуре и дизайну, делая их более устойчивыми и энергоэффективными.

9. Экологическая устойчивость: Применение квантовых точек может помочь уменьшить негативное воздействие на окружающую среду. Поскольку их можно производить из менее токсичных и более доступных материалов, это снижает экологический след в процессе производства солнечных панелей. Кроме того, высокая эффективность квантовых точек способствует более рациональному использованию ресурсов.

3.4 Моделирование волновых функций электрона в квантовой точке сферической структуры «ядро/оболочка» на основе $AlAs$ / $GaAs$

Цель исследования эффекта Штарка заключается в анализе зависимости энергии связи водородоподобной донорной примеси в квантовой точке с сферической «ядром/оболочкой» на основе $AlAs/GaAs$ от координат.

Исследования эффекта Штарка в контексте квантовых точек с донорными примесями представляют собой значимую область в физике полупроводников и квантовой механики. В данном случае внимание уделяется изучению зависимости энергии связи водородоподобной донорной примеси, находящейся в квантовой точке с сферической структурой «ядро/оболочка», состоящей из материалов $AlAs$ и $GaAs$.

Квантовые точки, обладающие особыми оптическими и электронными характеристиками, становятся все более важными в современных нанотехнологиях и фотонике. Водородоподобные донорные примеси, такие как атомы водорода, внедренные в полупроводниковые матрицы, создают локализованные состояния, которые могут быть использованы для управления электронными свойствами материалов.

Эффект Штарка, проявляющийся в изменении энергии связи примеси под воздействием внешнего электрического поля, позволяет исследовать взаимодействие между электронами и полем, а также влияние геометрии квантовой точки на эти взаимодействия. В случае сферической структуры «ядро/оболочка» важно учитывать, что распределение электрического поля и потенциальный профиль в таких системах могут значительно изменяться в зависимости от координат.

Анализ зависимости энергии связи от координат включает в себя решение уравнения Шредингера для системы с учетом потенциала, создаваемого донорной примесью и внешним электрическим полем. Это позволяет получить информацию о том, как изменяется энергия связи в зависимости от положения примеси внутри квантовой точки, а также от величины и направления приложенного поля.

Результаты подобных исследований могут иметь важные приложения в разработке новых полупроводниковых устройств, таких как квантовые точки для светодиодов, лазеров и фотодетекторов, а также в области квантовых вычислений, где управление состояниями на уровне отдельных частиц играет ключевую роль. В частности, возможность манипулирования состояниями донорных примесей в квантовых точках открывает новые горизонты для создания квантовых битов (кубитов), которые могут использоваться в квантовых вычислениях. Эти кубиты, обладая высокой степенью изолированности и контролируемости, могут обеспечить надежную платформу для реализации квантовых алгоритмов.

Изучение эффекта Штарка в контексте квантовых точек с донорными примесями может способствовать более глубокому пониманию процессов, которые происходят в полупроводниковых устройствах при воздействии внешних полей. Например, в светодиодах и лазерах изменение энергии связи примесей может оказывать влияние на эффективность излучения и его спектральные характеристики. Это, в свою очередь, может быть использовано для оптимизации параметров устройств, что особенно актуально в условиях быстрого технологического прогресса. Также следует отметить, что воздействие внешнего электрического поля на локализованные состояния в квантовых точках может быть применено для разработки новых типов сенсоров и детекторов. Например, изменение энергии связи донорных примесей под воздействием электрического поля может быть использовано для создания чувствительных датчиков, способных реагировать на незначительные изменения в окружающей среде, такие как температура, давление или химический состав.

Ключевым аспектом исследования эффекта Штарка в квантовых точках является необходимость разработки теоретических моделей и численных методов, которые могут точно описать поведение электронов в сложных потенциальных профилях. Это включает в себя применение таких методов, как метод конечных элементов или молекулярно-динамическое моделирование, позволяющие учитывать неоднородности и анизотропию материалов, а также взаимодействие между различными уровнями энергии. Кроме того, важно учитывать влияние температуры на поведение донорных примесей и их взаимодействие с внешним электрическим полем. С повышением температуры возрастает вероятность термического возбуждения электронов, что может привести к изменению энергии связи и, соответственно, к изменению оптических и электрических свойств квантовых точек. Это открывает новые перспективы для исследований, направленных на создание термостабильных квантовых точек, способных функционировать в широком диапазоне температур. Также стоит упомянуть, что

взаимодействие между донорными примесями и матрицей полупроводника может приводить к образованию новых состояний, которые могут быть использованы для создания более сложных квантовых систем. Например, в системах с несколькими донорными примесями могут возникать эффекты, связанные с квантовой запутанностью и корреляцией, что открывает новые возможности для разработки квантовых вычислительных технологий.

В данной работе продемонстрировано, что наличие оболочки с энергетическими зонами, смещенными относительно ядра, создает дополнительные возможности для управления положением квантовых уровней. Это вызывает интерес для улучшения энергетической структуры квантовой точки с целью создания реалистичных структур с определенными электрофизическими и оптическими свойствами.

Рассмотрим водородоподобную примесь, расположенную в центре квантовой точки во внешнем электрическом поле, направленное вдоль оси z .

Гамильтониан поставленной задачи будет иметь вид

$$H = H_0 + W + V_w(r) \quad (3.1)$$

Здесь $H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \nabla^2 + V(r)$, где $V(r) = -\frac{e^2}{\epsilon_0 r_{ed}}$ - слагаемое, учитывающее

кулоновское взаимодействие, расстояние между положением примеси и положением электрона; θ – угол между вектором положения электрона $\vec{r}$ и вектором положения примеси $\vec{d}$:

$$r_{ed} = |\vec{r} - \vec{d}| = \sqrt{r^2 + d^2 - 2rd \cos(\theta)} \quad (3.2)$$

Третье слагаемое $V_w(r)$ - потенциал конфаймента, который имеет вид

$$V_w(r) = \begin{cases} 0, & a < r < b \\ \infty, & 0 < r < a \text{ или } r \geq b, \end{cases} \quad (3.3)$$

где a и b соответствуют внутреннему и внешнему радиусу, соответственно, z_0 – координата примесного иона в КЯ.

Энергетический спектр водородоподобной примеси в квантовой яме в приближении скалярной эффективной массы рассчитывается с помощью стационарного уравнения Шредингера (3.1).

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(z) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon\sqrt{x^2+y^2+(z-z_0)^2}} \right\} \Psi(r) = E\Psi(r) \quad (3.4)$$

Решения уравнения (3.2) существенным образом зависят от ширины квантовой ямы относительно боровского радиуса r_B основного состояния примеси в объемном полупроводнике, из которого состоит КЯ. На рисунке 3.3 показана зависимость величины энергии связи E примеси от отношения a/b при различных параметрах a и b (синий- $b=3a^*_D$, $f=0$, черный- $b=3a^*_D$, $f=0.4$, оранжевый- $b=3a^*_D$, $f=0.8$, зеленый- $b=3a^*_D$, $f=1$).

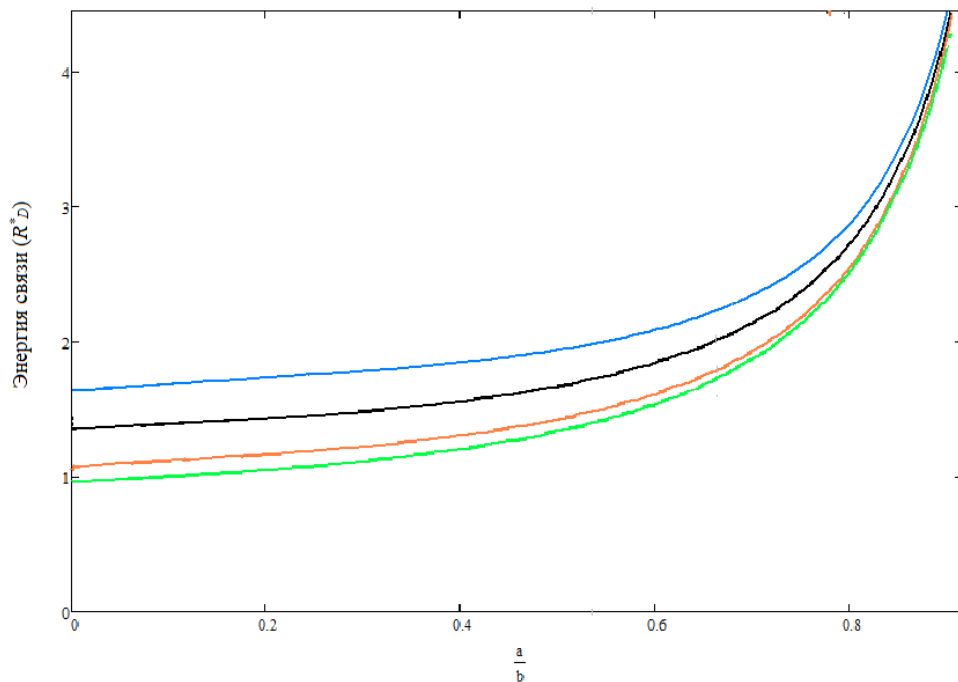


Рисунок 3.3 – Зависимость величины энергии связи

Из поведения кривых видно, что энергия связи уменьшается по мере увеличения электрического поля, следовательно, влияние электрического поля становится менее выраженным, когда соотношение $(a/b) \rightarrow 0$.

Из рисунка 3.3 можно сделать два важных вывода:

Первое: когда $(a/b) \rightarrow 0$, ситуация соответствует сферической гомогенной КТ радиуса b , энергия связи которой уменьшается с увеличением внешнего радиуса b . И наконец, стремится к $1R^*_D$ - энергии связи объемного материала.

Второе: когда $a / b = 1$ для всех значений внешнего радиуса b , энергия донора стремится к $4R_D^*$, соответствующая известному $2D$ пределу.

Можно сделать вывод, что значительные и уникальные изменения в электронных и оптических характеристиках, обусловленные расположением дискретных уровней энергии, зависят от геометрических параметров и формы квантовых точек.

Квантовые точки, помимо способности мультиплицировать заряды, обладают еще одним значительным преимуществом — возможностью настройки их оптических характеристик. Это достигается путем изменения размеров и состава частиц, что позволяет точно контролировать длину волны света, которую они способны поглощать. В результате можно создавать солнечные элементы, адаптированные для работы в различных условиях освещения и климата, что делает их более универсальными и эффективными.

Квантовые точки можно интегрировать в легкие и гибкие солнечные панели, что открывает новые горизонты для их применения. Такие панели могут быть установлены на различных поверхностях, включая крыши, автомобили и носимые устройства. Это значительно расширяет возможности солнечной энергетики, позволяя использовать ее в местах, где традиционные солнечные панели были бы неэффективны или невозможны[20].

Исследования также свидетельствуют о том, что солнечные элементы на основе квантовых точек могут быть более устойчивыми к деградации по сравнению с кремниевыми панелями. Это связано с тем, что квантовые точки могут быть изготовлены из более прочных материалов, что увеличивает срок службы солнечных установок и снижает затраты на их обслуживание и замену.

Тем не менее, несмотря на многообещающие результаты, существует ряд проблем, которые необходимо решить для массового внедрения квантовых точек в солнечные элементы. Во-первых, необходимо обеспечить стабильность и долговечность квантовых точек в условиях эксплуатации. Хотя они могут быть более устойчивыми к деградации, чем кремниевые

панели, их поведение под воздействием внешних факторов, таких как ультрафиолетовое излучение, влага и температура, требует дальнейших исследований. Разработка защитных покрытий и технологий, обеспечивающих долговечность квантовых точек, станет важным шагом к их коммерциализации. Во-вторых, процесс производства квантовых точек должен быть оптимизирован для достижения экономической целесообразности. В настоящее время технологии их синтеза могут быть сложными и дорогими, что ограничивает массовое производство. Ученые работают над упрощением методов получения квантовых точек и поиском более доступных и экологически чистых материалов, что позволит снизить стоимость конечного продукта и сделать его более конкурентоспособным на рынке.

Необходимо учитывать вопросы масштабируемости технологий. Переход от лабораторных исследований к промышленному производству требует разработки новых методов интеграции квантовых точек в существующие производственные процессы солнечных панелей. Это включает в себя создание новых технологий нанесения и обработки, которые позволяют эффективно использовать квантовые точки в больших объемах.

Внешние воздействия также оказывают заметное влияние на свойства квантовых систем. Например, смещение электронного облака под воздействием электрического поля приводит к изменению электрооптических характеристик квантовых точек. Это открывает новые перспективы для разработки солнечных батарей на их основе. При воздействии электрического поля можно наблюдать изменения в спектре поглощения. Квантовые точки представляют собой многообещающую технологию для солнечной энергетики благодаря своей способности адаптироваться к различным длинам волн света. Это свойство позволяет значительно повысить эффективность преобразования солнечной энергии, что особенно актуально для солнечных панелей, учитывая широкий спектр солнечного излучения.

Исследования показывают, что использование квантовых точек в солнечных элементах может привести к более высоким показателям преобразования энергии по сравнению с традиционными кремниевыми панелями. Это связано с тем, что один электрон может взаимодействовать с несколькими фотонами, что в свою очередь увеличивает общую выработку энергии.

Исследования в сфере солнечной энергетики показывают, что внедрение квантовых точек в солнечные элементы может значительно улучшить эффективность преобразования солнечной энергии по сравнению с обычными кремниевыми панелями. Квантовые точки представляют собой наноразмерные полупроводниковые частицы с уникальными оптическими и электронными свойствами. Одним из основных преимуществ квантовых точек является их способность взаимодействовать с несколькими фотонами одновременно.

В традиционных кремниевых солнечных панелях каждый фотон может возбуждать лишь один электрон, что ограничивает максимальную эффективность преобразования энергии. В то время как в солнечных элементах на основе квантовых точек один электрон может быть возбужден несколькими фотонами, что приводит к образованию нескольких электронов на один поглощенный фотон. Этот процесс, называемый мультипликацией зарядов, позволяет значительно увеличить общую выработку энергии. Таким образом, использование квантовых точек в солнечных батареях создает новые перспективы для увеличения эффективности солнечных панелей, что может существенно повлиять на переход к более устойчивым источникам энергии. Исследования в этой области продолжаются, и учёные высказывают надежду, что вскоре квантовые точки станут стандартом в производстве солнечных элементов, обеспечивая лучшие показатели преобразования энергии и способствуя развитию экологически чистой энергетики.

Существуют различные производственные методы, позволяющие создавать квантовые точки, включая химические реакции и технологии *3D-*

печати. Эти подходы дают возможность разрабатывать легкие и гибкие солнечные панели, которые можно интегрировать в различные конструкции и на самые разные поверхности, открывая новые возможности для применения солнечных технологий. Кроме того, использование квантовых точек может значительно снизить себестоимость, поскольку их можно изготавливать из более доступных и недорогих материалов. Это делает их экономически эффективными для массового производства солнечных панелей и может способствовать снижению цен на солнечную энергию в целом.

Квантовые точки также дают возможность создавать многослойные солнечные панели, способные эффективно поглощать свет в различных диапазонах спектра. Каждый слой можно оптимизировать для работы с конкретной частью солнечного излучения, что значительно повышает общую эффективность преобразования энергии и делает такие панели более конкурентоспособными по сравнению с традиционными однослойными моделями. Более того, квантовые точки демонстрируют высокую устойчивость к деградации, что делает их идеальными для использования в солнечных элементах, подвергающихся воздействиям различных климатических условий. Это может привести к увеличению срока службы солнечных панелей и снижению затрат на их обслуживание.

Эффективность традиционных солнечных панелей составляет примерно 18.1%. Тем не менее, солнечные элементы на основе квантовых точек обладают потенциалом для значительного увеличения максимально возможной термодинамической эффективности преобразования солнечной энергии до приблизительно 66%. Это достигается за счет использования горячих фотогенерированных носителей, что позволяет достигать более высоких фотоэлектрических напряжений и токов. Таким образом, квантовые точки способны эффективно улавливать свет в широком диапазоне длин волн солнечного спектра, а их электрооптические свойства будут настраиваться не только в процессе производства, но и в ходе эксплуатации. Чтобы доказать

справедливость формулы восстановления, необходимы реалистичные континуальные волновые функции, которые учитывают влияние ограничивающего потенциала квантовой точки.

Полный набор собственных энергий θ и огибающих волновых функций $\theta(r)$ (для квантовой точки и состояний континуума) можно получить, решая уравнение Шредингера

В свою очередь, предполагается подходящий потенциал удержания квантовой точки $V(r)$. Решения включают связанные волновые функции квантовой точки, а также несвязанные континуальные волновые функции. Обратите внимание, что свободные решения уравнения Шредингера для $V(r) = 0$ задаются плоскими волнами

Для простоты предполагается радиально-симметричный потенциал удержания квантовой точки $V(r)$ (например, для описания квантовых точек, выращенных в режиме роста Вольмера-Вебера). Для вращательно-симметричного потенциала удержания квантовой точки полезно выполнять вычисления в сферических координатах.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_\mu} \left(\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) + V(r) \right] R_l(r) = \epsilon R_l(r) \quad (3.5)$$

В сферических координатах свободные решения, решающие радиальное уравнение Шредингера (3.4) для $V(r) = 0$, могут быть определены, если мы установим $\rho = kr$, что приведет к:

$$\left[\frac{d^2}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho} \frac{d}{d\rho} + \left(1 + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) \right] R_l(\rho) = 0 \quad (3.6)$$

В то время как сферические функции Бесселя $j_l(\rho)$ достигают конечных значений при $r = 0$, сферическая Функция Неймана $n_l(\rho)$ 1 порядка имеет особенность при $r \rightarrow 0$. При $r \rightarrow \infty$ оба решения приближаются к нулевому значению. Поскольку можно предположить, что влияние удерживающего потенциала квантовой точки уменьшается на больших расстояниях от квантовой точки $V(r \rightarrow \infty) = 0$, для решения также используется граничное условие Дирихле $R_l(r \rightarrow \infty) = 0$. радиальное уравнение Шредингера, приведенное в уравнении (4.4) для ненулевых потенциалов $V(r) \neq 0$.

Целью этого раздела является определение волновой функции основного состояния связанной квантовой точки и волновых функций несвязанного континуума для расчета внутризонного дипольного момента, и спектра внутризонного поглощения. В общем, внутризонный дипольный момент между двумя состояниями s_1 и s_2 в радиальной симметрии равен:

$$d^{s_1 s_2} = q \int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{s_1, l}^{m*}(\theta, \phi) Y_{s_2, l'}^{m'}(\theta, \phi) \mathbf{e}_r \sin(\theta) d\phi d\theta \int_0^\infty R_l^{s_1*}(r) R_{l'}^{s_2}(r) r^3 dr \quad 3.7$$

правило выбора $\Delta l = 1$ для угловых моментов l и l' . Поскольку число угловых моментов основного состояния квантовой точки равно $l = 0$, вклад вносят только состояния континуума с $l = 1$. По этой причине радиальное уравнение Шредингера вычисляется для определения волновой функции основного состояния квантовой точки и для вычисления волновых функций состояния континуума k . Следовательно, уравнение решается численно с использованием метода конечных элементов (МКЭ).

3.5 Спектроскопия тонких пленок оксида цинка

Прозрачные проводящие металлооксиды стали предметом исследований благодаря своим уникальным физическим свойствам и перспективам прикладного характера при создании устройств микро- и нанoeлектроники, а также средств отображения информации.

Важнейшее практическое применение данных материалов основано на значительном удельном сопротивлении и высоком значении коэффициента пропускания в видимом спектре. Прозрачные металлические оксиды включают, в частности, такие соединения, как оксиды индия и олова, оксид цинка, оксид кадмия и др. Полупроводник оксид цинка, как пьезоэлектрический и оптический волноводный материал, имеет потенциал практического использования в качестве функциональных компонентов газовых сенсоров, поверхностных акустических устройств, прозрачных электродов и солнечных батарей [1–4].

Большие значения оптической ширины запрещенной зоны (~ 3.3 эВ при комнатной температуре) и энергии связи экситона (~ 60 мэВ) позволяют рассматривать ZnO как материал для создания приборов оптоэлектроники

нового поколения, работающих в ультрафиолетовом диапазоне, а также люминофоров для цветных дисплеев. Для многих из указанных приложений является актуальным наличие возможности управления физическими параметрами тонкопленочных структур на основе ZnO , что особенно актуально, если известны волновые функции электронов в наноструктурах в составе тонкопленочных структур на основе ZnO , что позволяет установить их форму и, тем самым, появляется больше возможности для изучения их свойств.

Исследование волновых функций электронов путем измерения спектров поглощения квантовых точек является актуальной задачей, поскольку позволяет получать дополнительную уточняющую информацию о геометрии квантовых точек и, следовательно, об их энергетическом спектре. Например, в работе было получено уравнение и показана возможность его использования для получения волновой функции основного состояния КТ $GaAs$ на основе результатов измерения внутризонного спектра.

В работе показано, что наночастицы оксида цинка с формой близкой к прямоугольному параллелепипеду могут выступать в качестве потенциальных ям для свободных электронов, разделённых между собой слоями поливинилового спирта, образующими потенциальные барьеры. В работе изучены оптические спектры пропускания тонких пленок ZnO нового типа морфологии с множеством уровней пространственной иерархии. Была показана возможность решения задач наноструктурной инженерии путем установления взаимосвязи между оптическими спектрами пропускания пленкообразующих золь оксида цинка и формирующейся в процессе иерархической самосборки наноструктурой.

Цель настоящей работы заключается в теоретическом исследовании волновых функций электрона в модели заданного потенциала и волновых функций электрона, полученных на основе изучения спектра поглощения образца ZnO , включающего наночастицы.

Для решения поставленной задачи было рассмотрено соотношение, показывающее связь оптического поглощения наночастиц ZnO и их волновой функции в основном состоянии, который позволяет получить информацию о волновой функции наночастицы, а как следствие этого, о форме квантовой точки, закодированной в оптических спектрах.

В качестве объекта исследования были выбраны тонкие пленки, включающие наночастицы ZnO сферической формы размерами 6-10 нм с потенциалом ограничения вида:

$$V(r) = \frac{-V_0}{\cosh\left(\left(\frac{r}{a}\right)^2\right)} \quad (3.8)$$

где V_0 является характерным признаком потенциала $V(r)$, определяющим его высоту.

Исследования электрофизических свойств оксида цинка показали, что для его состояния в виде ультрадисперсных наночастиц, характерна ширина запрещённой зоны $\Delta E_{g1}=3,34$ эВ, и эффективная масса электронов и дырок, которая соответственно равна $m_e^* = 0,28m_0$, $m_h^* = 0,60m_0$, где m_0 – масса покоя электрона [4-5]. Энергия сродства к электрону собственного ZnO составляет $\chi_{ZnO}=4,19$ эВ [6], а его диэлектрическая проницаемость $\epsilon=8,5$ [7].

В общем случае, тонкие пленки основе наночастиц металлооксидов (например, оксида цинка) и связующих (например, ПВС) могут содержать большое число частиц, точная оценка которого сильно затруднена, в том числе из-за их дисперсии по размеру и форме, что делает актуальным исследование данной работы.

Спектры оптического пропускания пленкообразующих золь с различным временем созревания измеряли на спектрофотометре СФ-56 (ОКБ Спектр, Россия), при этом кюветы и дистиллированную воду использовали в качестве образца сравнения. Исследование морфологии поверхности образцов, полученных на основе комбинированных золь-гель систем проводили с помощью растрового электронного микроскопа *VEGA3 SBH (Tescan)*.

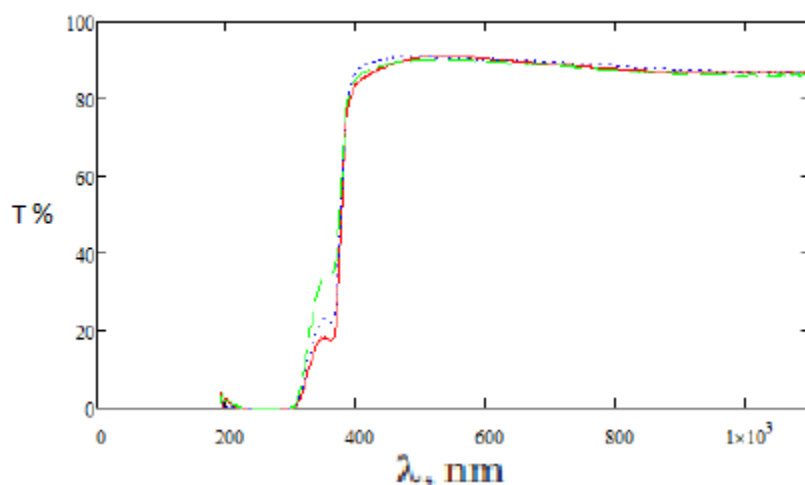


Рисунок 3.4 - Спектры пропускания пленок ZnO

По интерференционным экстремумам в спектрах пропускания, была определена толщина пленок ZnO , соответствующая значению 250 нм. Анализ полученных данных позволил определить средний коэффициент пропускания T в видимой области спектра, расположенный на уровне 0.75–0.80. Полученные результаты установили сдвиг края оптического пропускания пленок ZnO с 350 нм при отсутствии легирования до 375 нм для примесного образца. Коэффициент поглощения $\alpha(\lambda)$ исследуемых пленок рассчитывался по уравнению:

$$\alpha := \frac{2.303}{d} \cdot \log \left(\frac{100}{A_{(1)}} \right) \quad (3.9)$$

Связь энергии фотона с его длиной волны:

$$h\nu := \frac{1243.125}{A_{(0)}} \quad (3.10)$$

Спектр поглощения пленок ZnO показан на рисунке 3.5.

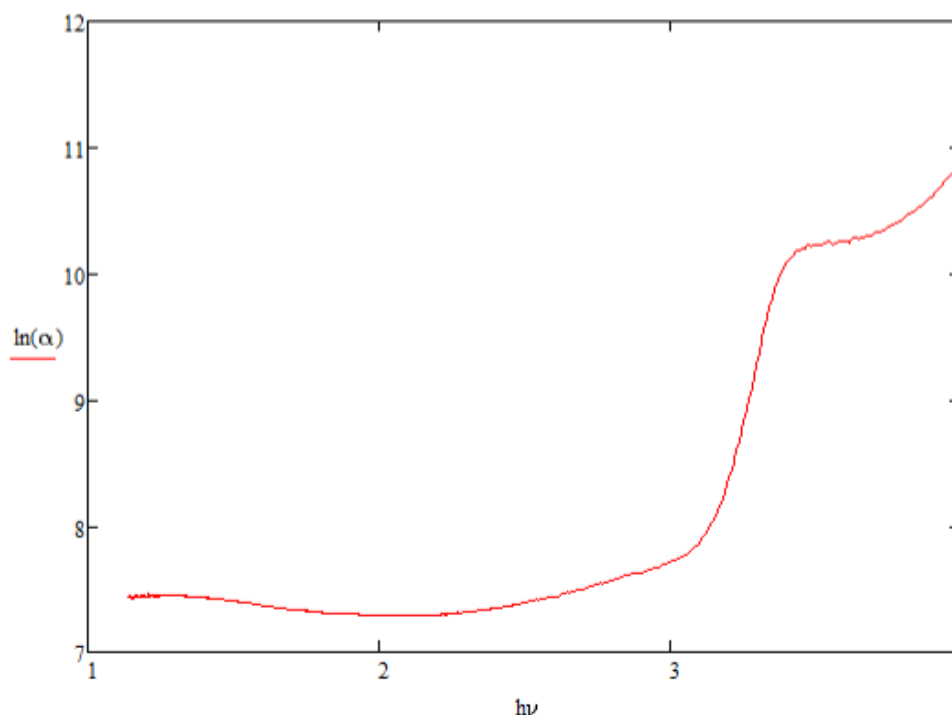


Рисунок 3.5 – Спектры поглощения пленок ZnO с наночастицами

По результатам исследования был сделан вывод, что, зная спектр поглощения тонких пленок оксида цинка можно получить волновую функцию наночастиц ZnO, составляющих материал, и уточнить их форму с учетом потенциала конфаймента различной геометрии.

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

Инженер-исследователь в области нанотехнологий занимается разработкой методов получения, изучения и контроля характеристик наноструктур, что требует взаимодействия с разнообразным технологическим и исследовательским оборудованием. Для создания подходящих условий труда необходимо учитывать организацию рабочего пространства, в котором будет работать инженер.

В лаборатории, где осуществляется научная деятельность, стены окрашены в бежевый цвет, потолок - в белый, а на полу уложен линолеум.

Важно, чтобы размеры помещения соответствовали числу сотрудников и имеющемуся оборудованию, чтобы гарантировать необходимые условия труда.

Согласно санитарно-гигиеническим нормам, на одного работника должно приходиться: объем помещения не менее 19,5м³ и площадь не менее 6м². Кроме этого, помещение должно соответствовать требованиям по чистоте воздуха (ГОСТ 12.1.005-88), температуре (ГОСТ 12.1.005-88), уровню освещения (ГОСТ 12.1.004-83), шумозащите (ГОСТ 12.1.003-83) и другим аспектам, связанным с охраной труда.

Создание оптимальных условий по всем указанным параметрам имеет важное значение для производительности инженера-исследователя и, в конечном итоге, для успеха его научной работы в области нанотехнологий.

Рабочее место инженера-исследователя является фундаментальным элементом производственного процесса, и его проектировка должна отвечать нормам, обеспечивающим не только комфортную работу, но и эффективное использование времени и энергии оператора. Ключевым требованием к рабочему месту является использование стандартного рабочего стола размерами 1100x650 мм, на который размещается необходимое оборудование. Также важно учитывать рациональное использование рабочей площади и удобство в обслуживании компьютерной техники, при этом соблюдать правила охраны труда. Неправильное оборудование рабочего места может привести к нежелательным последствиям, что недопустимо при выполнении научно-исследовательских задач.

Важнейшей частью рабочего места инженера-исследователя является комплект оборудования на стандартном рабочем столе, который включает компьютер (системный блок, жидкокристаллический монитор, клавиатура и мышь), а также экран и доску. Для повышения эффективности работы кабинета заведующего лабораторией используется четыре персональных компьютера. При проектировании рабочего пространства также следует

учитывать требования по обеспечению комфортной работы, экономии ресурсов и рациональному использованию пространства.

Для создания комфортных и безопасных условий работы для оператора-исследователя важно надлежащим образом организовать его рабочее пространство.

Первая зона работы инженера-исследователя фокусируется на измерении вольт-фарадных характеристик. Здесь необходимо наличие компьютера, состоящего из системного блока, монитора, клавиатуры и мыши, а также специализированного оборудования для проведения измерений.

Вторая зона направлена на исследование полупроводниковых свойств твердых материалов. Рабочее место должно быть укомплектовано компьютером со всеми необходимыми компонентами, а также устройством для измерения полупроводниковых характеристик и установкой для демонстрации эффекта Пельтье. Этот набор технологий необходим для глубокой оценки полупроводников и их использования в различных сферах промышленности.

Третья зона посвящена изучению многослойных печатных плат, поэтому рабочее место должно содержать универсальный вольтметр, осциллограф и источник питания. Данное оборудование нужно для анализа работы многослойных плат и выявления потенциальных неисправностей. Работа в лабораторных условиях требует повышенной концентрации и внимательности. Правильная организация рабочего пространства позволяет оператору-исследователю более эффективно выполнять свои функции и минимизировать риск негативного воздействия на здоровье.

Факторы, такие как естественное или искусственное освещение, неправильные уровни влажности, несоответствующая температура, превышение допустимого уровня шума и электромагнитного излучения, а также чрезмерная запыленность и высокий уровень статического электричества, могут негативно сказаться на состоянии работников и их

производительности. Анализ этих факторов и их мониторинг имеют важное значение для улучшения условий труда и защиты здоровья сотрудников. Например, корректировка освещения, оптимизация температуры и влажности, снижение шума и электромагнитного излучения, а также контроль за чистотой воздуха и уровнем статического электричества способствуют снижению рабочих рисков и повышению производительности. Строгое соблюдение норм и стандартов в этих областях также является необходимым условием для достижения безопасных и комфортных условий труда.

Необходимы профилактические и защитные меры, такие как контроль за уровнем шума и электромагнитного излучения, улучшение качества воздуха с помощью фильтров и вентиляционных систем, правильное освещение и регулирование температуры, чтобы обеспечить безопасность и комфорт сотрудников.

Лаборатории являются местами, где проводятся научные эксперименты и исследования в различных областях. Однако работа в таких условиях требует внимания к рискам для здоровья и безопасности работников. Особенно важно следить за уровнями ионизирующего излучения, которые, согласно ГОСТ Р (52241-2004), могут негативно повлиять на здоровье человека, если их значения превышают допустимые. Поэтому необходимо принимать защитные меры. Сотрудники лабораторий также могут подвергаться риску поражения электрическим током при использовании электрического оборудования; для предотвращения таких случаев ГОСТ (12.4.026-2015) определяет соответствующие меры безопасности.

Стресс может стать источником заболеваний и психических расстройств для лаборантов, и при этом умственное переутомление может отрицательно сказаться на качестве и точности их работы.

Также важным аспектом безопасности является угроза пожара в научных лабораториях: ГОСТ (12.1.044-2018) предлагает различные методы для предотвращения и тушения пожаров в рабочих зонах. Надо отметить, что

безопасность работников связана и с соблюдением определенных параметров микроклимата. Риски для здоровья могут возникнуть при работе в перегретом или чрезмерно запыленном воздухе; согласно ГОСТ (1.1.005-88), предельно допустимые параметры микроклимата для научных лабораторий должны соответствовать установленным стандартам и нормам.

Рабочие зоны инженеров института удовлетворяют требованиям по уровню шума, который не должен превышать 60 дБА в соответствии с ГОСТ 12.1.012-90. Также проводится оценка воздействия электромагнитных полей на человека, что осуществляется согласно действующим стандартам. Допустимые уровни электромагнитных параметров определяются согласно ГОСТ Р 54148-2010. Этот стандарт устанавливает методы измерения электрических и магнитных полей, создаваемых бытовой и аналоговой техникой на частотах до 300 ГГц.

Рабочие места инженеров-исследователей оснащены 17-дюймовыми ЖК-мониторами Samsung SyncMaster 710N с разрешением 1280x1024 и частотой обновления 75 Гц, которые соответствуют стандартам ТСО-99 и обеспечивают необходимый уровень электромагнитного излучения.

Электробезопасность лаборатории обеспечена в соответствии с ГОСТ 12.4.026-2015. Помещение, в котором проводятся работы, относится к категории с низким риском электротравм, так как отсутствует вероятность одновременного касания человека заземленной металлоконструкции или металлического корпуса электрооборудования. Кроме того, здесь нет токопроводящей пыли, а пол соответствует требованиям ПУЭ 1.1.13.

Питание оборудования производится от сети с переменным током напряжением 220 В и номинальным напряжением до 1000 В благодаря заземлению. Все устройства имеют пломбы для обеспечения безопасности сотрудников. Защитное заземление предусмотрено в соответствии с ПУЭ 1.7.55, что предотвращает несчастные случаи, связанные с прикосновением к корпусу при коротком замыкании активного кабеля.

Таким образом, институт поддерживает высокий уровень электробезопасности для своих работников, следуя необходимым инструкциям и техническим требованиям.

Согласно ГОСТ 12.1.030-81, компьютер подключается к сети переменного тока 220 В через трехконтактную вилку с заземленным третьим контактом. При эксплуатации, обслуживании и ремонте компьютера необходимо соблюдать определенные правила. В частности, не допускается замена вилки у любого подключенного к сети электрооборудования.

Также запрещено обслуживать или открывать корпус оборудования под напряжением, чтобы избежать рисков несчастных случаев. Не рекомендуется работать с неведомым или неправильно заземленным электрооборудованием.

В лабораторных условиях, где проводятся научные исследования и разработки, необходимо уделять особое внимание пожарной безопасности. Статистика показывает, что чаще всего пожары возникают из-за неисправностей в электрооборудовании и электросетях, а также из-за нарушений правил эксплуатации и пожарной безопасности.

Для минимизации риска возгорания, согласно ГОСТ 12.1.044-2018, следует принимать различные меры предосторожности. Например, необходимо предусмотреть установку автоматических выключателей для оперативного отключения оборудования в случае аварии. Также, для тушения пожаров технологического оборудования, необходимо использовать огнетушители с зарядом ОТВ весом 2 кг, укомплектованные в соответствии с техническими условиями.

Важным элементом безопасности являются аварийные выходы, обеспечивающие быструю эвакуацию из лаборатории при пожаре. Регулярные инструктажи по пожарной безопасности помогут сотрудникам узнать о мерах предотвращения пожаров и правилах поведения в случае их возникновения.

Помимо пожарной безопасности, важную роль играет освещение лаборатории, которое должно соответствовать гигиеническим, техническим и экономическим требованиям. Правильно организованное освещение положительно влияет на работоспособность, самочувствие и производительность труда исследователей.

Недостаточное освещение или дефицит естественного света могут негативно сказаться на зрительном восприятии и работе нервной системы, вызывая головные боли, раздражительность, снижение концентрации и, как следствие, снижение трудоспособности. Слишком яркий свет, в свою очередь, может создавать блики и раздражать глаза, а неправильное направление света может приводить к появлению резких теней и бликов на мониторах, затрудняя восприятие информации.

Таким образом, необходимо обеспечить адекватное освещение в лабораториях, используя как естественный, так и искусственный свет в соответствии с установленными стандартами. Это позволит повысить качество работы исследователей и добиться высокой производительности. При выборе системы освещения следует руководствоваться требованиями СНиП 23-05-95, учитывая необходимую освещенность для конкретного вида зрительной работы. Важно, чтобы освещение было постоянным и равномерным, а светильники обеспечивали оптимальное освещение без бликов. Также необходимо учитывать электро- и пожаробезопасность, простоту использования, долговечность, экономичность и эффективность системы освещения.

При исследовании наноструктурированных материалов исследователям стоит быть внимательными во время работы с компьютерными экранами и создании научно-технических документов. Для удобства работы СНиП 23-05-95 рекомендует применять составное освещение с уровнем яркости 200 люкс в рабочей зоне. Для поддержания стабильной яркости дополнительно можно установить искусственное освещение, которое будет полезным как в дневное время, так и в помещениях с недостаточным светом. Одностороннее

естественное освещение особенно подходит для лабораторий. В то же время, при работе с экранами компьютеров нужно учитывать, что прямые солнечные лучи и отраженный свет могут вызывать утомление глаз и ухудшать зрение. Поэтому, если это возможно, экраны следует размещать напротив окна, а если нет – то под углом к нему, чтобы уменьшить воздействие естественного света. Для повышения равномерности освещения стены лаборатории обычно окрашивают в светло-бежевые тона с высокой отражательной способностью.

В лаборатории используются люминесцентные лампы типа, которые обеспечивают более рассеянный свет по сравнению с точечными источниками, как, например, лампы накаливания. Они обладают высокой светоотдачей, длительным сроком службы (около 10 лет) и спектром света, близким к натуральному.

Чтобы освещение соответствовало требованиям СНиП 23-05-95, рассчитывается освещенность с помощью точечного метода. Этот метод позволяет определить точные значения освещенности в разных точках рабочего пространства, обеспечивая возможность контролировать и адаптировать уровень света в зависимости от выполняемых на рабочем месте задач.

Освещенность рабочего места (E) определяется уравнением:

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

где F – световой поток светильника, лм;

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

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

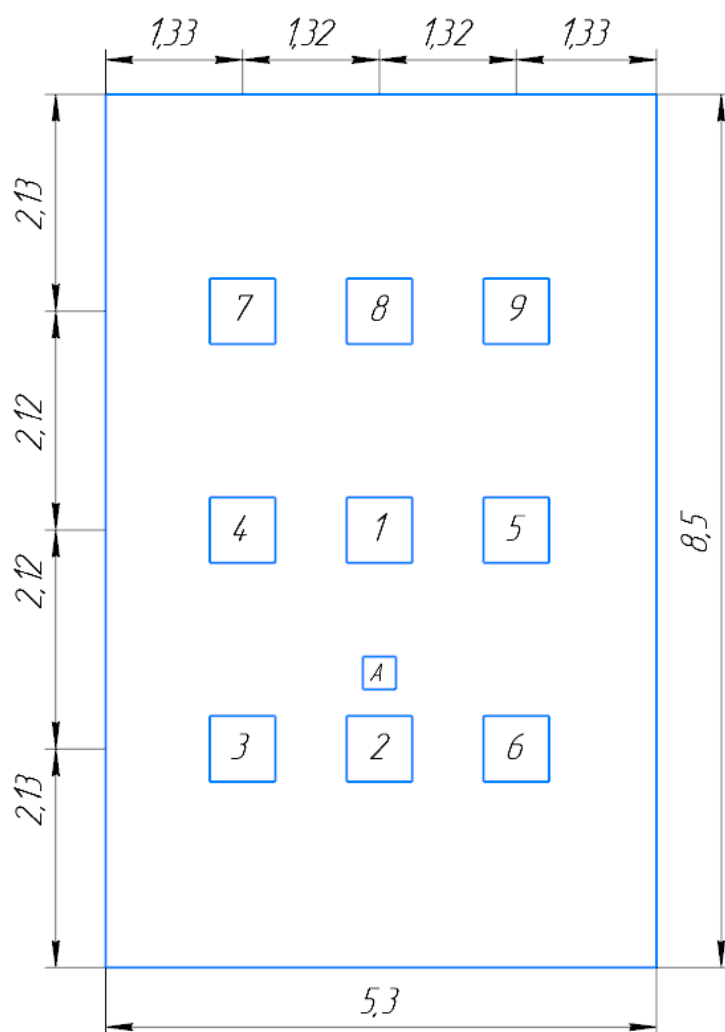
p – расстояние от плоскости опорной точки до плоскости проекции светильника, м;

$Y = Y_1 + Y_2 + \dots + Y_i$ – 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 (световой поток 1350 лм). Расположение светильников в комнате показано на рисунке 20.



A – контрольная точка; 1-9 светильники

Рисунок 4.1 – Расположение светильников в научно-исследовательской лаборатории

Каждый светильник оснащен двумя люминесцентными лампами G13 со световым потоком 1350 лм, поэтому $F = 2 \cdot 1350 \text{ лм} = 2700 \text{ лм}$

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 $K_3 = 1,2$. Поверхность, на которую должно попадать освещение, находится на высоте $0,7$ м от пола, поэтому высота светильников, подвешенных над рабочей поверхностью, составляет: $h = 3,3 \text{ м} - 0,7 \text{ м} = 2,6 \text{ м}$

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

$$e_i = \frac{I_\alpha \cos^3 \alpha_i}{h^2}, \quad (4.2)$$

где I_α – сила света по направлению к точке:

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

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

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

$$d_1 = d_2 = \sqrt{0.7^2 + 1^2} = 1.2 \text{ м}, \quad (4.4)$$

$$d_3 = d_4 = d_5 = d_6 = \sqrt{1.7^2 + 1^2} = 1.9 \text{ м}, \quad (4.6)$$

$$d_7 = d_8 = d_9 = \sqrt{3^2 + 1^2} = 3.1 \text{ м}. \quad (4.7)$$

Определим α_i :

$$\alpha_1 = \alpha_2 = \arctg\left(\frac{1.2}{2.6}\right) = 27^\circ \quad (4.8)$$

$$a_3 = a_4 = a_5 = a_6 = \arctg\left(\frac{1.9}{2.4}\right) = 39^\circ \quad (4.9)$$

$$a_7 = a_8 = a_9 = \arctg\left(\frac{3.1}{2.4}\right) = 52^\circ \quad (4.10)$$

Определим e_i :

$$I_1 = I_2 = 132 \text{ кД}, \quad (4.11)$$

$$I_3 = I_4 = I_5 = I_6 = 93 \text{ кД}, \quad (4.12)$$

$$I_7 = I_8 = I_9 = 65 \text{ кД}, \quad (4.13)$$

$$e_1 = e_2 = \frac{132 \cdot \cos^3 27^\circ}{(2.4)^2} = 16.6 \text{ лк}, \quad (4.14)$$

$$e_3 = e_4 = e_5 = e_6 = \frac{93 \cdot \cos^3 39^\circ}{(2.4)^2} = 7.8 \text{ лк}, \quad (4.15)$$

$$e_7 = e_8 = e_9 = \frac{65 \cdot \cos^3 52^\circ}{(2.4)^2} = 2.6 \text{ лк}. \quad (4.16)$$

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

$$e = e_1 + e_2 + \dots + e_9 = 76.1 \text{ лк} \quad (4.17)$$

Рассчитаем Y_i , по выражению:

$$Y_i = \cos\theta + \frac{d_i}{h} \sin\theta, \quad (4.18)$$

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

$$Y_1 = Y_2 = 0.5 \quad (4.19)$$

$$Y_3 = Y_4 = Y_5 = Y_6 = 0.8 \quad (4.20)$$

$$Y_7 = Y_8 = Y_9 = 1.3, \quad (4.21)$$

$$Y_{Общ} = Y_1 + Y_2 + \dots + Y_9 = 2.6 \quad (4.22)$$

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

$$E = \frac{2700 \cdot 1.1 \cdot 76.1 \cdot 2.6}{1000 \cdot 1.2 \cdot 2.6} = 200 \text{ лк} \quad (4.23)$$

Результаты расчетов уровня освещения в рабочей зоне инженера-исследователя демонстрируют, что система освещения в лаборатории удовлетворяет стандартам безопасности и комфорта на рабочем месте в соответствии с СНиП 23-05-95. Для анализа, основанного на этих расчетах, можно сделать вывод, что условия труда в данном помещении соответствуют нормам ГОСТ 12.1.003-83 и СНиП 23-05-95, применимым к данному типу помещений. Рабочее пространство, в котором проводились исследования, не относится к зонам с высоким риском поражения электрическим током. Оборудование в этом помещении подключено к сети переменного тока с частотой 50 Гц и напряжением 220 В. Пожарная безопасность обеспечена в соответствии с требованиями ГОСТ 12.1.004-91, включая прямые выключатели доступа, огнетушители моделей ОХП-10 и ОХПВ-10, а также запасные выходы для быстрой эвакуации в случае возникновения пожара.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе выполнения дипломной работы проведено изучение влияния формы квантовых точек на эффективность солнечных элементов.

Результаты моделирования демонстрируют, что определенные формы квантовых точек, а именно, структуры с увеличенной площадью поверхности и анизотропными свойствами, способствуют более эффективному поглощению света и разделению зарядов. Это, в свою очередь, приводит к росту тока короткого замыкания и напряжения холостого хода в солнечных панелях. Полученные результаты открывают новые перспективы для разработки солнечных элементов нового поколения с улучшенными характеристиками на основе квантовых точек. Дальнейшие исследования будут направлены на оптимизацию формы и состава квантовых точек, а также на изучение влияния их расположения и ориентации в активном слое солнечного элемента. Кроме того, планируется проведение экспериментальной проверки полученных теоретических результатов с целью подтверждения их практической значимости и возможности реализации в реальных устройствах.

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. Баранов А.В., Маслов В.Г., Орлова А.О., Федоров А.В. Практическое использование наноструктур. Учебное пособие. – СПб: НИУ ИТМО, 2014. – С. 102 Рис. 41. Библи. 66.
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. "Nanostructured Materials for Solar Energy Conversion" edited by A. E. K. Kanan and F. K. Shams
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 нанoeлектроники (М., Логос, 2016)
13. Subramanian V, Kuno M, Kamat, V. Quantum dot solar cells. harvesting light energy with CdSe nanocrystals molecularly linked to mesoscopic TiO₂ films. *J Am Chem Soc* 2006; 128 (7) 2385–2393.
14. А.В. Федоров, А.В. Баранов, В.Г. Маслов, А.О. Орлова, Е.В. Ушакова, М.Ю. Леонов, В.Г. Голубев ФИЗИКА НАНОСТРУКТУР Учебное пособие СанктПетербург 2015
15. Nozik A. J. et al. Semiconductor quantum dots and quantum dot arrays and applications of multiple exciton generation to third-generation photovoltaic solar cells // *Chemical reviews*. – 2010. – Т. 110. – №. 11. – С. 6873–6890.
16. Brus, L. Electron-electron and electron-hole interactions in small semiconductor crystallites: The size dependence of the lowest excited electronic state. *Chem. Phys.* 1984, 80, 4403–4409
17. Moraitis, P.; van Leeuwen, G.; van Sark, W. Visual appearance of nanocrystal-based luminescent solar concentrators. *Materials* 2019, 12, 885
18. Kondrotas R. et al. Low-dimensional materials for photovoltaic application // *Journal of Semiconductors*. – 2021. – Т. 42. – №. 3. – С. 031701.
19. Y. Okada, N. J. Ekins-Daukes, T. Kita, R. Tamaki, M. Yoshida, A. Pusch, O. Hess, C. C. Phillips, D. J. Farrell, K. Yoshida, et al., *Applied Physics Reviews* 2, 021302 (2015)
20. Kim, H.-J.; Jo, J.-H.; Yoon, S.-Y.; Jo, D.-Y.; Kim, H.-S.; Park, B.; Yang, H. Emission enhancement of Cu-doped InP quantum dots through double shelling scheme. *Materials* 2019, 12, 2267

ПРИЛОЖЕНИЕ А

(обязательное)

Задание на Выпускную квалификационную работу

«Утверждаю»
Заведующий кафедрой
Пронин И.А.
(фамилия, имя, отчество)
«___» _____ 2025 г.

ЗАДАНИЕ

на выпускную квалификационную работу магистра

1. Студент гр. 23ПДм1 факультета ФИТЭ
Направление подготовки 11.03.04 «Электроника и нанoeлектроника»
Магистерская программа _____
Пронькин Александр Васильевич
(фамилия, инициалы)

2. Руководитель Игошина Светлана Евгеньевна
(фамилия, инициалы)

3. Тема выпускной работы Теоретическое изучение влияния формы квантовых точек на эффективность преобразования энергии в солнечных элементах

Тема утверждена приказом ПГУ № 582/о от «21» 04 2025 г.

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

4.1. Анализ литературных источников с целью изучения физико-химических свойств выбранных в качестве объектов исследования полупроводниковых квантовых точек

4.2 Анализ методов регулирования размеров и состава квантовых точек, для захвата фотонов на различных длинах волн

4.3 Моделирование фотоэлектрических свойств наноструктурированных пленок ZnO в целях дальнейшего использования таких наноструктур в солнечных элементах.

Объект исследований: Квантовые точки солнечные элементы, сенсibilизированные квантовыми точками

5. Объем и содержание основной части выпускной 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

1.2 История открытия

1.3 Солнечные элементы на основе квантовых точек

2. Теоретическое исследование волновых функций электрона в квантовой точке

2.1 Моделирование внутризонной структуры КТ методом внутризонной спектроскопии
2.2 Моделирование волновых функций электрона в КТ при различных типах потенциала энергетического барьера

2.3 Результаты моделирования волновых функций КТ

3. Особенности использования КТ в солнечных элементах

3.1. Обзор литературных данных

3.2. Влияние формы КТ на эффективность СЭ

3.3. Исследование перспектив применения квантовых точек в солнечных элементах

3.4. Моделирование волновых функций электрона в полупроводниковых оксидах

5.2. Иллюстративная часть (перечень и название слайдов презентации)

Слайд 1-2 Актуальность работы

Слайд 3-5 Цель, объект и методы исследования

Слайд 6-8 Анализ результатов исследования и литературных источников

Слайд 9-11 Постановка задачи

Слайд 11-12 Моделирование волновых функций

Слайд 13 Результаты

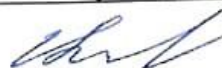
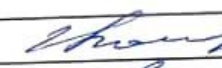
Слайд 14-15 Список публикаций

6. Консультанты и содержание дополнительных разделов

6.1. _____

Консультант _____

7. Календарный план по выполнению выпускной работы магистра

Наименование этапов работы	Объем работы	Срок выполнения	Подпись руководителя, консультанта
Общие сведения о квантовых точках	10%	23.05	
Теоретическое исследование волновых функций электрона в квантовой точке	16%	24.05	
Особенности использования КТ в солнечных элементах	15%	26.05	
Моделирование волновых функций электрона в квантовой точке сферической структуры «ядро/оболочка» на основе AlAs / GaAs	20%	28.05	
Анализ влияния освещенности научно-исследовательской лаборатории на работу инженера-исследователя	15%	30.05	
Иллюстративная часть	12%	2.06	
Оформление пояснительной записки	12%	3.06	

Дата выдачи задания «22» _____ мая 2025 г.

Руководитель выпускной работы _____
подпись

Игошина С.Е.
фамилия, инициалы

Задание к исполнению принял _____
подпись

Пронькин А.В.
фамилия, инициалы

« 22 » _____ мая 2025 г.

Выпускную квалификационную работу к защите допустить

Декан факультета _____
подпись

Кревчик В. Д
фамилия, инициалы

« 10 » _____ 06 2025 г.

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

(обязательное)

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

Ректору Пензенского государственного
университета Гулякову А.Д.
студента 2 курса ФИТЭ очной формы
обучения
Пронькина Александра Васильевича

ЗАЯВЛЕНИЕ

Я, Пронькин Александр Васильевич, студент 2 курса очной формы обучения направления подготовки 11.04.04 Электроника и нанoeлектроника, профиль «Микроэлектроника и твердотельная электроника», прошу провести проверку с использованием системы «Антиплагиат.ВУЗ» магистерской диссертации на тему «Теоретическое изучение влияния формы квантовых точек на эффективность преобразования энергии в солнечных элементах», 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 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.


Подпись студента

ВКР представлена на проверку 04.06.15

Руководитель ВКР Игошина С. Е. 

Протокол

Проверки на оригинальность в системе «Антиплагиат.ВУЗ» выпускной магистерской работы на тему «Теоретическое изучение влияния формы квантовых точек на эффективность преобразования энергии в солнечных элементах»

студента 2 курса Пронькин А.В.

направления подготовки 11.03.04 Электроника и микроэлектроника,

профиль «Микроэлектроника и твердотельная электроника»

Руководитель ВКР Игошина С. Е.



АНТИПЛАГИАТ
система контроля заимствований

СПРАВКА

о результатах проверки текстового документа
на наличие заимствований

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего
образования «Пензенский государственный
университет»

ПРОВЕРКА ВЫПОЛНЕНА В СИСТЕМЕ АНТИПЛАГИАТ.ВУЗ

Автор работы: Пронькин Александр Васильевич
Самодетерминация: Пронькин Александр Васильевич
расчитана для: Теоретическое изучение влияния формы квантовых точек на эффективность преобразования
Исходная работа: энергии в солнечных элементах
Тип работы: Магистерская диссертация
Подразделение: Кафедра «Нано- и микроэлектроника»

РЕЗУЛЬТАТЫ

■ Внимание, документ подконтрольный: обнаружены попытки маскировки заимствований, рекомендуется
проверить полный отчет
■ отчет в проверке корректировался: ниже представлены результаты проверки до корректировки

СОВПАДЕНИЯ	26.35%	СОВПАДЕНИЯ	26.35%
ОРИГИНАЛЬНОСТЬ	73.65%	ОРИГИНАЛЬНОСТЬ	73.65%
ЦИТИРОВАНИЕ	0%	ЦИТИРОВАНИЕ	0%
САМОДЕТЕРМИНАЦИЯ	0%	САМОДЕТЕРМИНАЦИЯ	0%

ДАТА ПОСЛЕДНЕЙ ПРОВЕРКИ: 04.06.2025

ДАТА И ВРЕМЯ КОРРЕКТИРОВКИ: 04.06.2025 14:16

Структура
документа:
Модуль поиска:

Проверенные разделы: основная часть с.1-2, 31-78, содержание с.3, введение с.4-30, выводы с.79

Коллекция ИГУ, Медицина, СПС ГАРАНТ, нормативно-правовая документация;
Парафразированные заимствования по коллекции Интернет в английском сегменте, СПС
ГАРАНТ, аналитика; Шаблоны фраз; Парафразированные по коллекции IEEE; Переводные
заимствования, Патенты СССР, РФ, СНГ, ИПС Адмлет, IEEE, СМИ России и СНГ; Диссертации ИБС;
Кольцо вузов; Цитирование; Публикации РГБ; Сводная коллекция ЭБС; Кольцо вузов (переводы и
парафразирование); Публикации eLIBRARY (переводы и парафразирование); Публикации
eLIBRARY; Переводные заимствования по коллекции Гарант, аналитика; Переводные
заимствования IEEE; Переводные заимствования по коллекции Интернет в русском сегменте;
Публикации РГБ (переводы и парафразирование); Переводные заимствования по коллекции...

Работу проверил: Головацкий Алексей Николаевич
визирование

Дата подписи:

04.06.25

Подпись проверяющего



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

Отчет на запрос, выявляет ли обнаруженные заимствования
интернетом, система оставляет на усмотрение проверяющего.
Предоставленная информация не подлежит использованию
в коммерческих целях.

Руководитель ВКР

«04» 06 2025 год

подпись

Игошина С.Е.
фамилия, инициалы



СПРАВКА

о результатах проверки текстового документа
на наличие заимствований

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего
образования "Пензенский государственный
университет"

ПРОВЕРКА ВЫПОЛНЕНА В СИСТЕМЕ ANTIPLAGIAT.VUZ

Автор работы: Пронькин Александр Васильевич
Самоцитирование
рассчитано для: Пронькин Александр Васильевич
Название работы: Теоретическое изучение влияния формы квантовых точек на эффективность преобразования энергии в солнечных элементах
Тип работы: Магистерская диссертация
Подразделение: Кафедра "Нано- и микроэлектроника"

РЕЗУЛЬТАТЫ

- ВНИМАНИЕ. ДОКУМЕНТ ПОДОЗРИТЕЛЬНЫЙ: ОБНАРУЖЕНЫ ПОПЫТКИ МАСКИРОВКИ ЗАИМСТВОВАНИЙ. РЕКОМЕНДУЕТСЯ ПРОВЕРИТЬ ПОЛНЫЙ ОТЧЕТ
- ОТЧЕТ О ПРОВЕРКЕ КОРРЕКТИРОВАЛСЯ: НИЖЕ ПРЕДСТАВЛЕНЫ РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОВЕРКИ ДО КОРРЕКТИРОВКИ

СОВПАДЕНИЯ	26.35%	СОВПАДЕНИЯ	26.35%
ОРИГИНАЛЬНОСТЬ	73.65%	ОРИГИНАЛЬНОСТЬ	73.65%
ЦИТИРОВАНИЯ	0%	ЦИТИРОВАНИЯ	0%
САМОЦИТИРОВАНИЯ	0%	САМОЦИТИРОВАНИЯ	0%

ДАТА ПОСЛЕДНЕЙ ПРОВЕРКИ: 04.06.2025

ДАТА И ВРЕМЯ КОРРЕКТИРОВКИ: 04.06.2025 14:16

Структура документа: Проверенные разделы: основная часть с.1-2, 31-78, содержание с.3, введение с.4-30, выводы с 79
Модули поиска: Коллекция НБУ, Медицина, СПС ГАРАНТ: нормативно-правовая документация; Перефразированные заимствования по коллекции Интернет в английском сегменте; СПС ГАРАНТ: аналитика; Шаблонные фразы; Перефразированные фразы по коллекции IEEE; Переводные заимствования, Патенты СССР, РФ, СНГ, ИПС Адилет; IEEE, IEEE Xplore, IEEE Russia и СНГ, Диссертации НББ, Кольцо вузов; Цитирование; Публикации РГБ, Сводная коллекция ЭБС; Кольцо вузов (переводы и перефразирования); Публикации eLIBRARY (переводы и перефразирования); Публикации eLIBRARY; Переводные заимствования по коллекции Интернет в русском сегменте; Переводные заимствования IEEE; Переводные заимствования по коллекции Интернет в русском сегменте; Публикации РГБ (переводы и перефразирования); Переводные заимствования по коллекции...

Работу проверил: Головяшкин Алексей Николаевич

ФИО проверяющего

Дата подписи:

04.06.25

Подпись проверяющего



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

Ответ на вопрос: Если ли обнаруженное заимствование
корректируется? Если да, то заимствование подлежит
предоставлению на усмотрение проверяющего
в корректном виде. Если нет, то заимствование не подлежит использованию

ПРИЛОЖЕНИЕ В
(обязательное)
Презентация ВКР

Публикации студента Пронькина Александра Васильевича

1. ИССЛЕДОВАНИЕ ПЕРСПЕКТИВ ПРИМЕНЕНИЯ КВАНТОВЫХ
ТОЧЕК В СОЛНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТАХ

Мухаев Д.А., Пронькин А.В., Игошина С.Е., Карманов А.А.

В сборнике: Методы, средства и технологии получения и обработки измерительной информации ("Шляндинские чтения - 2024"). Материалы XVI Международной научно-технической конференции с элементами научной школы и конкурсом научно-исследовательских работ для студентов, аспирантов и молодых ученых. Пенза, 2024. С. 218-221.

2. МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ НАНОЧАСТИЦ ZnO С
УЧЕТОМ ГЕОМЕТРИИ И ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ

Пронькин А.В., Игошина С.Е., Карманов А.А.

XI Всероссийская научно-практическая конференция «Информационные технологии в науке и образовании, проблемы и перспективы» (ВНПК-2025), 12 марта 2025 г.



**Теоретическое изучение влияния формы
квантовых точек на эффективность
преобразования энергии в солнечных
элементах.**

Студент группы 23ПДм1 Пронькин А.В.

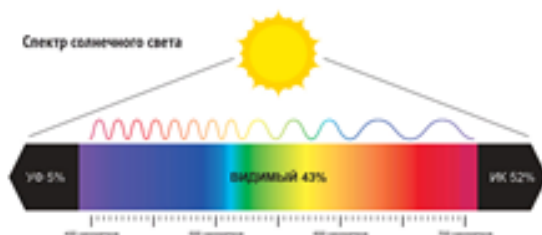
Руководитель: доцент,

к.ф.-м.н. Игошина С.Е.

Актуальность работы

Обусловлена:

- Квантовые точки позволяют точно настраивать запрещенную зону для соответствия спектру падающего света. Эта настраиваемость позволяет поглощать более широкий диапазон энергий фотонов, оптимизируя использование солнечного спектра.



Цель работы

Цель проведенной работы:

- Анализ научной литературы с целью изучения влияния формы и размера квантовых точек на эффективность преобразования энергии в солнечных элементах;
- Разработка методики с целью определения наличия наноструктурированных частиц в полупроводниковых пленках и определения их геометрической формы по спектрам поглощения.

Объект исследования

Объект исследования:

Наноматериалы на основе оксида цинка, содопированного медью и алюминием различной концентрации.

Задачи:

Показать, что примесный фактор оказывает заметное влияние на оптические характеристики исследуемых пленок, в частности на поглощение излучения, и для легированных образцов сопровождается увеличением значений ширины запрещенной зоны, что характерно для проявления эффектов размерного квантования

Методы исследования

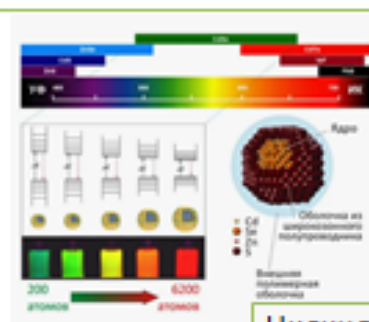
- Спектроскопия

помогает определить оптические свойства квантовых точек и их взаимодействие с фотонами. Это может помочь оценить эффективность преобразования света в электрическую энергию.

- Моделирование

используется для получения информации о росте, самоорганизации и структурных свойствах, особенно о форме и размере квантовых точек.

Влияние формы квантовых точек на их оптические свойства



Многочисленные исследования показывают, что форма квантовых точек напрямую влияет на их оптические свойства, включая поглощение и испускание света.

Цилиндрические квантовые точки обладают уникальными характеристиками для специальных приложений, однако их эффективность в солнечных батареях ниже из-за сложной структуры и асимметрии.

Сферические квантовые точки в солнечных батареях более эффективны в преобразовании солнечной энергии благодаря высокому уровню фотолюминесценции, что делает их предпочтительными для создания эффективных солнечных батарей.

Анализ результатов исследования литературных данных



Gros, C., Minko, F., Chow W. W. Photon antibunching from few quantum dots in a cavity // *Physical Review A*. – 2015. – Т. 91. – №. 6. – С. 063804.

7

Сравнительная таблица влияния геометрической формы квантовых точек на их свойства

Форма квантовых точек	Оптические свойства	Электронные свойства	Применение
Сферические	Высокая фотолюминесценция	Энергетический уровень уравновешен	LED, фотовольтаика
Кубические	Умеренная фотолюминесценция	Дискретные энергетические уровни	Оптоэлектроника
Цилиндрические	Пиковая эмиссия в определенной длине волны	Меньшая подвижность электронов	Биомедицинские приложения
Плоские	Слабая фотолюминесценция	Искривление энергетических уровней	Нанотехнологии

Каждая форма квантовых точек имеет свои уникальные преимущества и недостатки, которые делают их более или менее подходящими для определенных применений.

8

Постановка задачи

Методика восстановления волновой функции электрона основного состояния по спектру поглощения

Стационарное уравнение Шредингера для электрона в поле потенциала

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi}{dx^2} - \left(E + \frac{V_0}{\cosh^2 \frac{x}{a}} \right) \psi = 0 \quad V(r) = -\frac{V_0}{\cosh^2 \left(\frac{r}{a} \right)},$$

Объект исследования – квантовые точки GaAs

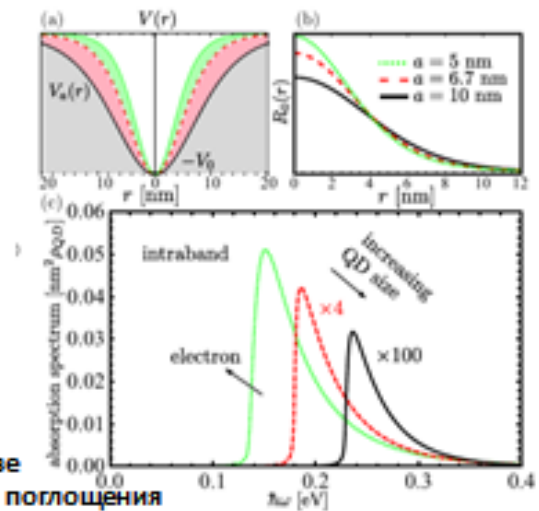
Размер КТ:

$a = 5$ нм, $a = 6,7$ нм, $a = 10$ нм

$E_c \approx 200$ meV

$V_0 = 0,35$ эВ

Показана возможность использования Методики для получения волновой функции основного состояния КТ GaAs на основе результатов измерения внутризонного спектра поглощения



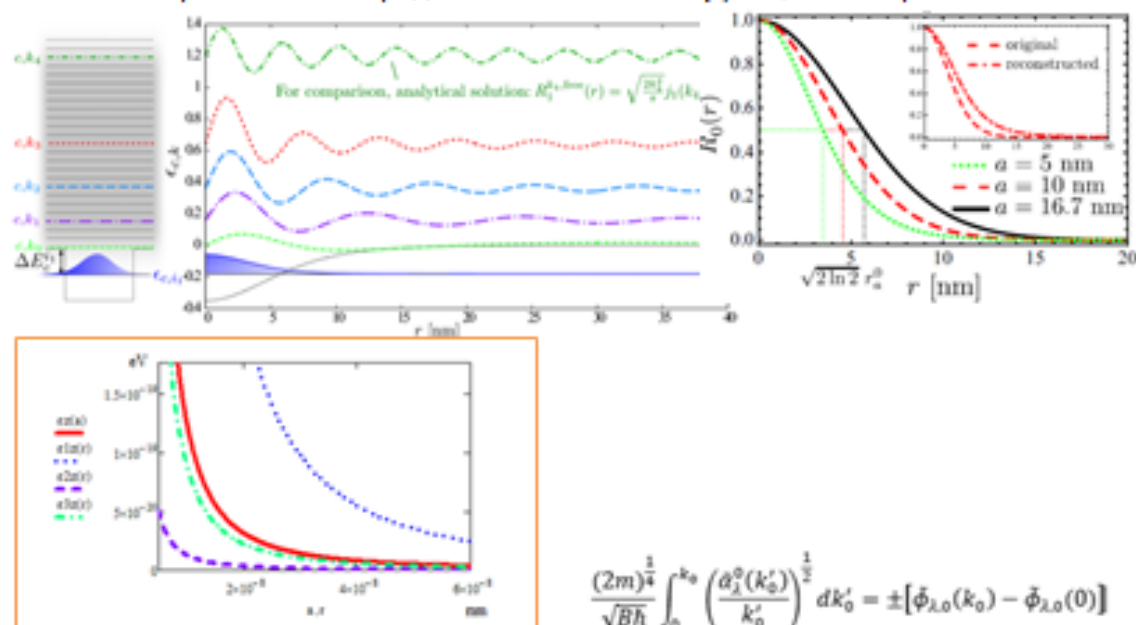
Kuhn S. C. et al. All-optical approach to determine the spatial shape of nanoscale electron wave functions using intraband spectroscopy // *Physical Review B*. – 2014. – T. 89. – No. 20. – С. 201414.

9

Постановка задачи

Методика восстановления волновой функции электрона основного состояния по спектру поглощения

- Численно рассчитанные радиальные волновые функции электрона



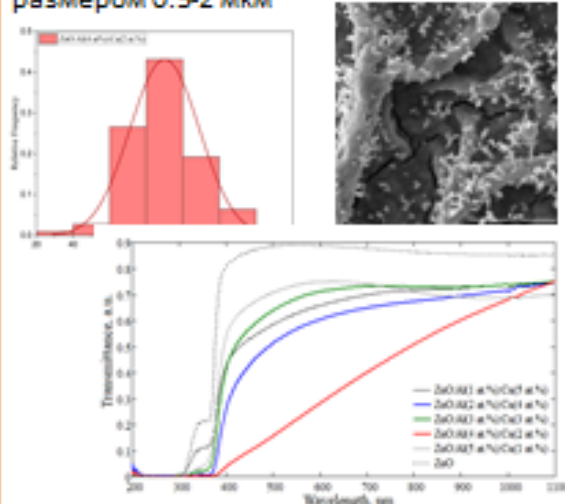
$$\frac{(2m)^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{B\hbar}} \int_0^{k_0} \left(\frac{d_\lambda^0(k_0')}{k_0'} \right)^{\frac{1}{2}} dk_0' = \pm [\phi_{\lambda,0}(k_0) - \phi_{\lambda,0}(0)]$$

Miller B. T. et al. Few-electron ground states of charge-tunable self-assembled quantum dots // *Physical Review B*. – 1997. – T. 56. – №. 11. – С. 6764.

10

Наноструктурная инженерия наноматериалов на основе ZnO

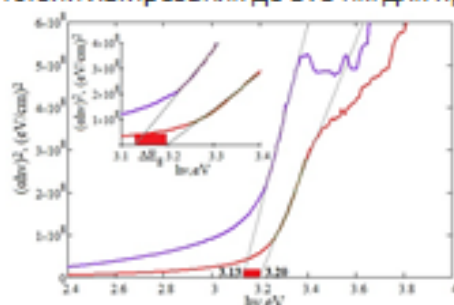
Образец ZnO:Al(4 at.%):Cu(2 at.%) образован переплетенными ветвями из допированного алюминием оксида цинка размером 0.5-2 мкм



Для ZnO:Al(4 at.%):Cu(2 at.%) в спектральном диапазоне 370-1100 нм характерна близкая к линейной зависимость коэффициента пропускания от длины волны и сильное поглощение в УФ области. Данный факт связан с особенностью его морфологии, представленной комбинацией ветвистыми и квазисферическими структурами (в том числе размером менее 40 нм), для которых можно ожидать проявления эффектов размерного квантования

Определение оптической ширины запрещенной зоны наноматериалов на основе оксида цинка, содопированного медью и алюминием

- По интерференционным экстремумам в спектрах пропускания была определена толщина пленок ZnO, соответствующая значению 250 нм.
- Анализ полученных данных позволил определить средний коэффициент пропускания T в видимой области спектра, расположенный на уровне 0.75–0.80
- Полученные результаты установили сдвиг края оптического пропускания пленок ZnO с 350 нм при отсутствии легирования до 375 нм для примесного образца.



Минимальное значение $E_g=3.13$ eV, а максимальное ≈ 3.20 eV;

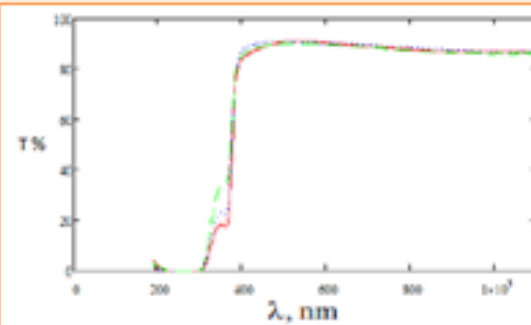
Указанная особенность характерна только для образцов ZnO, содопированных 4 at.% Al и 2 at.% Cu;

Является подтверждением идеи о проявлении эффектов размерного квантования.

Yakusheva N.O., Filippov I. A., Kamanov A. A., Gubich I. A., Pronin I. A. Nanostructured engineering of ZnO: Cu: Al nanomaterials for sensor and photocatalytic applications, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. – 2025. – Т. 18. – №. 1.1. – С. 22-27. 12

Результаты

Спектры пропускания пленок ZnO были получены с помощью спектрофотометра СФ-56 (ОКБ «Спектр») в лаборатории кафедры ННМЭ пгу



Зная спектр поглощения тонких пленок оксида цинка можно получить волновую функцию наночастиц ZnO, составляющих материал, и уточнить их форму с учетом потенциала конраймента различной геометрии.

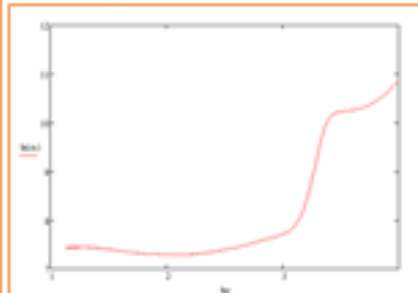
Если известно, что наночастицы ZnO имеют квазисферическую форму, для электронов можно рассчитать волновые функции, решив уравнение Шредингера для сферической потенциальной ямы



Коэффициент поглощения $\alpha(\lambda)$ исследуемых пленок

$$\alpha = \frac{2.303}{d} \log \left(\frac{100}{A(\lambda)} \right)$$

$$h\nu = \frac{1243.125}{\lambda(\text{nm})}$$



Список публикаций

Публикации студента Пронькина Александра Васильевича

- 1. **ИССЛЕДОВАНИЕ ПЕРСПЕКТИВ ПРИМЕНЕНИЯ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК В СОЛНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТАХ**

Мухаев Д.А., Пронькин А.В., Игошина С.Е., Карманов А.А.

В сборнике: Методы, средства и технологии получения и обработки измерительной информации ("Шляндинские чтения - 2024"). Материалы XVI Международной научно-технической конференции с элементами научной школы и конкурсом научно-исследовательских работ для студентов, аспирантов и молодых ученых. Пенза, 2024. С. 218-221.

- 2. **МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ ЭЛЕКТРОНА В НАНОЧАСТИЦАХ ZnO С УЧЕТОМ ГЕОМЕТРИИ И ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ**

Пронькин А.В., Игошина С.Е., Карманов А.А.

XI Всероссийская научно-практическая конференция «Информационные технологии в науке и образовании, проблемы и перспективы» (ВНПК-2025), 12 марта 2025 г.

Спасибо за внимание!