

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

Факультет
информационных технологий
и электроники
наименование факультета

Кафедра
Нано – и микроэлектроника
наименование кафедры

Направление подготовки

11.03.04. «Электроника и нанoeлектроника»
код и наименование

Профиль

Микроэлектроника и твердотельная электроника
наименование профиля

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

ПензГУ 02. 11.03.04. 001 ПЗ
обозначение, присваиваемое кафедрой

на тему

Теоретическое изучение влияния формы квантовых точек на характеристики солнечных элементов

тема бакалаврской работы

Студент группы 20ПД1
номер группы

Вифф 10.06.24 Винокуров Н.С.
подпись, дата фамилия, иници.

Руководитель доцент
должность

Игошина С.Е.
подпись, дата фамилия, иници.

ПГУ
наименование организации

Нормоконтролер ст. преподаватель
должность

Рыжова Т.Н.
подпись, дата фамилия, иници.

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

Заведующий кафедрой

10.06.24
подпись, дата

Пронин И.А.
фамилия, иници.

Работа защищена с оценкой хор. (протокол ГЭК от 18.06.24г. № 2)

Секретарь ГЭК

18.06.24г.
подпись, дата

Вольсков А.А.
фамилия, иници.

РЕФЕРАТ

Пояснительная записка содержит 55 страниц машинописного текста, включает 16 рисунков, 84 формулы, список использованных источников из 29 наименований.

Ключевые слова: квантовые точки, солнечные элементы, квантовая яма, уравнение Шредингера, нанокристалл, селенид кадмия.

Объект исследования: Квантовые точки на основе селенида кадмия (CdSe)

Цель проведенной работы: Теоретическое исследование влияния геометрических размеров квантовых точек CdSe и, тем самым, влияния формы КТ, которая играет важную роль в определении величины площади поглощения фотоэлемента, на фотофизические свойства солнечных элементов.

Актуальность работы обусловлена тем, что преобразование солнечной энергии в электрическую является одной из самых перспективных областей применения КТ, чем обусловлена важность исследования свойств квантовых точек на основе полупроводниковых соединений в зависимости от их геометрической формы, определяющей площадь поверхности и объем.

Большая площадь поверхности на единицу объема, обеспечиваемая квантовой точкой, имеет значительное преимущество, как для поглощения света, так и для разделения зарядов, которые являются двумя важнейшими этапами преобразования солнечной энергии в электрическую.

Для достижения поставленной цели была поставлена и решена задача по сравнению площади поверхности квантовых точек на единицу объема в зависимости от формы квантовых точек.

Проведенные исследования могут найти применение при разработке наноструктурированных материалов для солнечных элементов с заранее заданными свойствами.

					ПГУ 2. 11.03.04. 001 ПЗ	Лист
						2
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата		

СОДЕРЖАНИЕ

Введение.....	4
1 Квантовые точки в солнечных элементах.....	5
1.1 Теоретические сведения о квантовых точках	5
1.2 История квантовых точек.....	6
1.3 Физика квантовых точек.....	7
1.4 Солнечные элементы на основе квантовых точек	11
1.5 Гибридные солнечные элементы на основе кремния.....	13
2 Квантование энергетического спектра носителей заряда в квантовых точках...	19
2.1 Модель прямоугольной потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками	19
2.2 Модель цилиндрической квантовой ямы.....	21
2.3 Модель сферической потенциальной ямы.....	24
3 Моделирование характеристик солнечных элементов с КТ в зависимости от формы КТ.....	26
3.1 Определение фотоэлектрических свойств селенида кадмия сферической и отличной от сферической геометрии.	26
3.2 Энергетические спектры квантовых точек селенида кадмия	27
3.3 Моделирование влияния поверхностных свойств КТ на электрофизические свойства нанокристаллов.....	31
4 Анализ влияния освещенности научно- исследовательской лаборатории на работу инженера-исследователя.....	38
Заключение.....	49
Список использованных источников.....	50
Приложение А. Задание на выпускную квалификационную работу.....	53
Приложение Б. Заявление и протокол проверки ВКР на оригинальность в системе «Антиплагиат.ВУЗ».....	54
Приложение В. Презентация ВКР.....	55

ВВЕДЕНИЕ

Квантово-ограниченные полупроводниковые наноструктуры представляют собой новый класс функциональных материалов, которые разрабатываются для новых стратегий преобразования солнечной энергии. Одна из самых больших потерь в объемном или тонкопленочном солнечном элементе происходит в течение нескольких пикосекунд после поглощения фотона, так как фотоны с энергией, превышающей запрещенную зону полупроводника, производят носители заряда с избыточной кинетической энергией, которая затем рассеивается посредством фононного излучения. Полупроводниковые наноструктуры, в которых, по крайней мере, одно измерение достаточно мало, чтобы вызвать квантовые эффекты удержания, обеспечивают новые пути управления потоком энергии и, следовательно, обладают потенциалом для повышения эффективности первичной стадии фотоконверсии. В солнечных элементах уникальные системы имеют потенциал для обхода однопереходного предела Шокли-Квайссера для преобразования солнечных фотонов.

Цель проведенной работы: теоретическое исследование влияния геометрических размеров квантовых точек CdSe и, тем самым, удельной поверхности КТ, которая играет важную роль в определении величины площади поглощения фотоэлемента, на фотофизические свойства солнечных элементов.

Преобразование солнечной энергии в электрическую является одной из самых перспективных областей применения КТ, чем обусловлена важность исследования свойств квантовых точек на основе полупроводниковых соединений в зависимости от их геометрической формы, определяющей площадь поверхности и объем.

Большая площадь поверхности на единицу объема, обеспечиваемая квантовой точкой, имеет значительное преимущество как для поглощения света, так и для разделения зарядов, которые являются двумя важнейшими этапами преобразования солнечной энергии в электрическую.

ПГУ 2. 11.03.04. 001 ПЗ				
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата
Разраб.		Винокуров	<i>Вин</i>	
Пров.		Игошина	<i>Иго</i>	
Н.контр.		Рыжова	<i>Рыж</i>	07.06.14
Утв.				
Введение				
		Лит.	Лист	Листов
			4	55
гр. 20ПД1				

1 Квантовые точки в солнечных элементах

1.1 Теоретические сведения о квантовых точках

Квантовые точки - это особый класс полупроводников, которые представляют собой нанокристаллы, состоящие из периодических групп материалов $II-VI$, $III-V$ или $IV-VI$ и способные удерживать электроны (квантовое ограничение). Когда размер квантовой точки приближается к размеру боровского радиуса экситона материала, эффект квантового удержания становится заметным, и уровни энергии электронов больше не могут рассматриваться как непрерывная полоса, они должны рассматриваться как дискретные уровни энергии. Таким образом, квантовые точки можно рассматривать как искусственную молекулу с энергетической щелью и расстоянием между энергетическими уровнями, зависящими от ее размера (радиуса). При увеличении размера КД пик поглощения краснеет из-за сужения полосы пропускания. Регулируемая полоса пропускания квантовых точек позволяет создавать наноструктурированные солнечные элементы, способные собирать большую часть солнечного спектра. Квантовые точки обладают большим собственным дипольным моментом, что может привести к быстрому разделению заряда. Было обнаружено, что квантовые точки испускают до трех электронов на фотон благодаря множественной генерации экситонов (МЭГ), в отличие от одного электрона в стандартном кристаллическом кремниевом солнечном элементе. Теоретически это может повысить эффективность солнечной энергии с 20 % до 65%.

Вообще говоря, есть три важных параметра, которые характеризуют производительность фотоэлектрического элемента. Это напряжение разомкнутой цепи V_{oc} , ток короткого замыкания I_{sc} и коэффициент заполнения FF формула (1). Однако коэффициент заполнения также является функцией V_{oc} и I_{sc} . Поэтому последние два параметра являются ключевыми для определения эффективности преобразования энергии в ячейке. В идеальных условиях каждый падающий на

					ПГУ 2. 11.03.04. 001 ПЗ		
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата			
Разраб.	Винокуров		<i>Вин</i>				
Пров.	Игошина		<i>Иго</i>				
Н.контр.	Рыжова		<i>Рыж</i>	24.06.14			
Утв.							
Квантовые точки в солнечных элементах					Лит.	Лист	Листов
						5	55
					гр. 20ПД1		

ячейку фотон с энергией, превышающей полосовой зазор, приводит к появлению электрона, перетекающего во внешнюю цепь. Коэффициент заполнения определяется из максимального участка I - V характеристики при освещении, а также тока короткого замыкания и напряжения разомкнутой цепи:

$$FF = \frac{V_{mp} \cdot I_{mp}}{V_{oc} \cdot I_{sc}} \quad (1)$$

где V_{mp} и I_{mp} - рабочие точки, при которых выходная мощность максимальна.

В этом случае эффективность преобразования энергии определяется следующим образом:

$$\eta = \frac{V_{oc} \cdot I_{sc} \cdot FF}{P_{in}} \quad (2)$$

где P_{in} - входная мощность.

1.2 История квантовых точек

С начала 1960-х годов в качестве новой структуры полупроводниковых материалов была предложена концепция коллоидных полупроводниковых кристаллитов или квантовых точек. В 1981 году Экимове [1] сообщил о существовании полупроводниковых кристаллитов в стеклянной матрице. В 1985 году Луи Брус разработал квантовую модель сферических квантовых точек, основанную на модели эффективной массы [2]. Термин "квантовая точка" был введен в 1988 году группой Рида [3]. Смит и его коллеги [4] успешно сообщили о росте квантовой пленки путем осаждения трехмерных островков серебра Ag на подложку из арсенида галлия GaAs в двухстадийном процессе. К концу 1990-х годов коммерческое производство коллоидных квантовых точек стало практически осуществимым. В 2004 году исследовательская группа из Лос-Аламоса [5] сообщила, что квантовая точка способна испускать до трех электронов на один фотон, в отличие от одного для стандартных полупроводников с монокристаллическим слоем. В настоящее время хорошо

					ПГУ 2. 11.03.04. 001 ПЗ	Лист
						6
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата		

известно, что при поглощении фотона высокой энергии ($8 \times E_g$) квантовая точка способна генерировать семь фотогенерированных носителей заряда за счет обратной оже-рекомбинации. В настоящее время квантовые точки являются перспективными наноструктурными материалами в фотонике и биомедицинских приложениях.

1.3 Физика квантовых точек

В объемном полупроводнике электроны и дырки свободно перемещаются и не ограничены, поэтому они имеют непрерывные значения энергии, где энергетические уровни расположены так близко друг к другу и упакованы так, что образуются энергетические полосы. Занятые полосы называются валентными, а пустые - полосами проводимости. Самая верхняя зона (валентная) и самая нижняя незанятая зона проводимости. Они разделены так называемым энергетическим зазором. Например, экситон образуется при образовании пары электрон-дырка. Связная электронно-дырочная система (экситон) образует водород, подобный атому. Расстояние между электронами и дырками называется радиусом Бора. В таблице 1 приведены примеры экситонных радиусов Бора для некоторых полупроводников.

Таблица 1 - Экситонный боровский радиус и энергия полосы пропускания некоторых распространенных полупроводников

Полупроводниковая структура	Боровский радиус экситона (нм)	Ширина запрещенной зоны (эВ)
PbS	40.0	0.41
GaAs	28.0	1.43
CdTe	15.0	1.50
CdSe	10.6	1.74
ZnSe	8.4	2.58
CdS	5.6	2.53

Размерность материала определяет, в скольких измерениях носители информации в нем действуют как свободные носители. В объемном полупроводнике непрерывная плотность состояний приводит к появлению как зоны проводимости, так и валентной зоны. Однако, когда число атомов в решетке очень мало, плотность состояний становится дискретной и теряет вид непрерывной "зоны". Вообще говоря, если материал имеет один или несколько размеров, достаточно малых для того, чтобы повлиять на электронную плотность состояний, как показано на рисунке 1, то материал считается ограниченным. Соответственно, мы можем иметь квантовые ямы, квантовые проволоки и квантовые точки. Объемные полупроводниковые материалы являются примером трехмерных систем. Система квантовых ям - это двумерная система, в которой электроны ограничены в одном измерении и поэтому обладают плотностью состояний, подобной ступенчатой. Квантовая проволока - одномерная система, в которой электроны ограничены в двух измерениях. Квантовая точка - это нульмерная система, в которой движение электронов ограничено тремя измерениями.

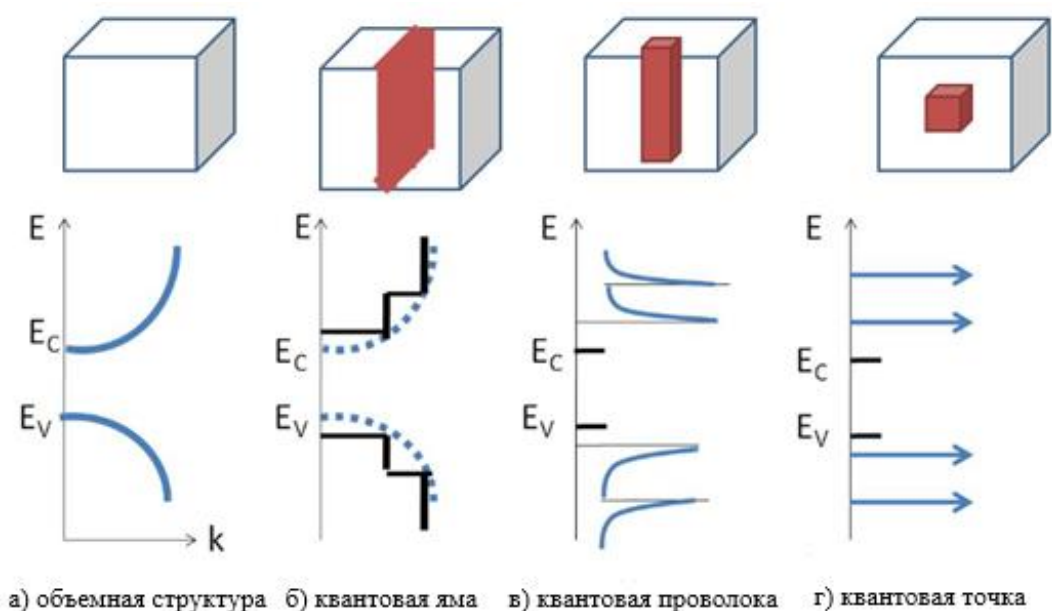


Рисунок 1 - Схема плотности состояний при уменьшении размерности системы

Для того чтобы определить собственные значения энергии электронов и дырок в квантовой точке, хорошим приближением является бесконечный потенциальную яму, показанную на рисунке 2. Поэтому квантовую точку можно представить, как квантовый ящик. Предположим, что $\Psi_n(r)$ - волновая функция n -го состояния. Уравнение Шредингера для электрона, заключенного в одномерном бесконечном квадратном потенциальном колодце размера L , имеет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi_n}{dx^2} + V(x) \psi_n = E_n \psi_n \quad (3)$$

Собственные значения энергии E_n и собственные волновые функции $\Psi_n(r)$ уравнения Шредингера имеют вид:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right) + \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \quad (4)$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 \quad (5)$$

где $n = 1, 2, 3$ и тд.

Если расширить ограничения электрона в трехмерный потенциальной яме (ящик с размерами L_x , L_y и L_z), его импульс и энергия будут квантованы во всех измерениях, и мы имеем:

$$E_{n_{x,y,z}} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right) \quad (6)$$

Если квантовая точка (кубический ящик) имеет размер стороны $L_x=L_y=L_z=L$, то E_n записывается как:

$$E_{n_{x,y,z}} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 \quad (7)$$

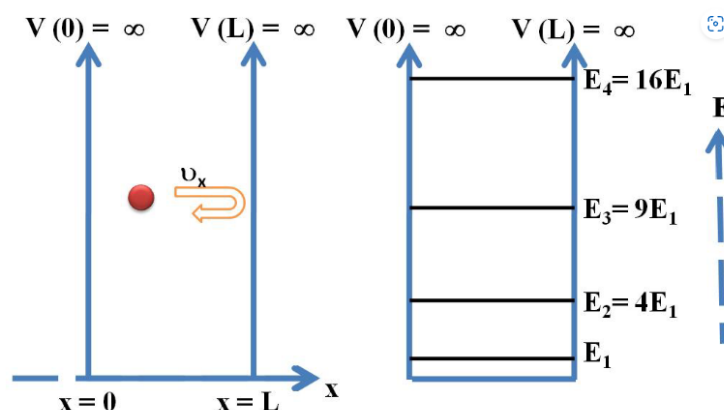


Рисунок 2 - Модель бесконечной квантовой ямы

На рисунке 3 представлено несколько примеров известных квантовых точек:

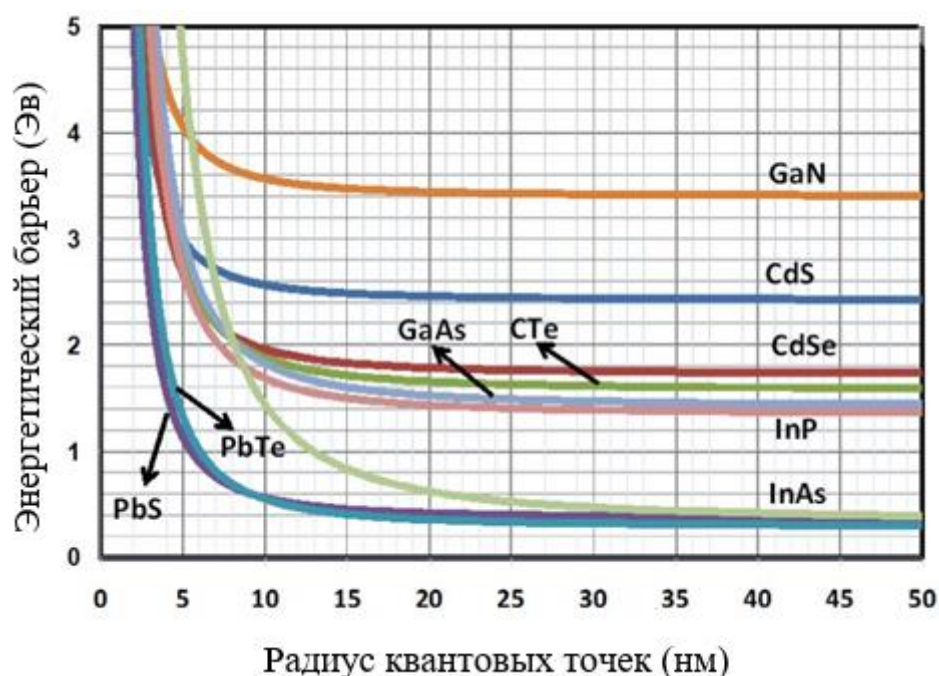


Рисунок 3 - Изменение энергетического зазора квантовой точки в зависимости от размера точки для некоторых распространенных полупроводников

Рисунок 4 показывает измеренное поглощение трех различных размеров квантовых точек сульфида свинца, взвешенных в толуоле, с помощью двухлучевого спектрофотометра. Поскольку полоса пропускания квантовой точки перестраивается в зависимости от ее размера, чем меньше квантовая точка, тем больше энергии требуется для удержания экситонов в ее объеме. Кроме того,

энергетические уровни увеличиваются по величине и сильнее разбегаются. Поэтому пик характеристики экситона смещается в синюю сторону.

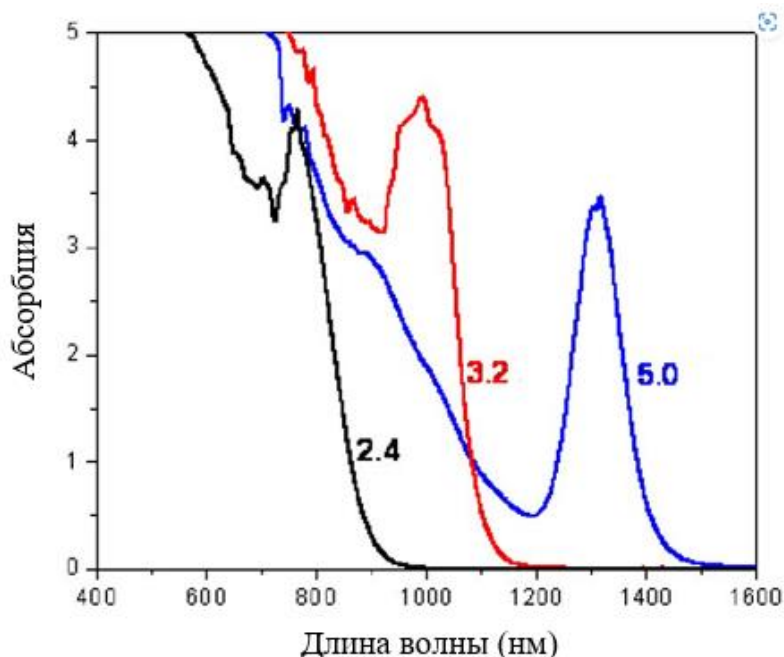


Рисунок 4 - Измеренная абсорбция трех квантовых точек PbS разных размеров, суспендированных в толуоле

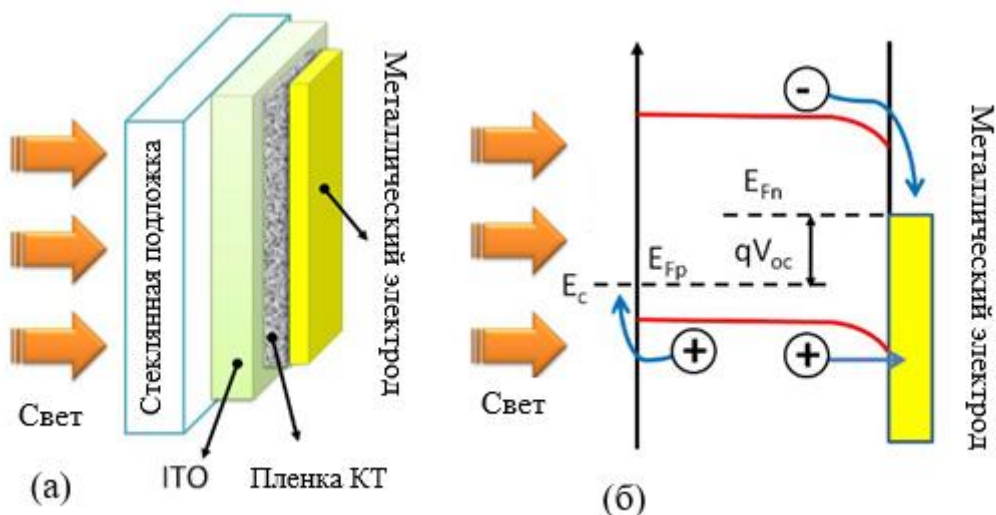
1.4 Солнечные элементы на основе квантовых точек

Существует множество реалистичных солнечных элементов на основе квантовых точек. В этом разделе мы классифицируем их по семи стратегиям, просто как подход к выполнению основной цели этой главы - представлению солнечных элементов на основе квантовых точек. Например, [7] соединения металл-полупроводник, полимер-полупроводник и полупроводник-полупроводник являются хорошо известными стратегиями солнечных элементов на основе квантовых точек. Кроме того, были исследованы квантовые точки, прикрепленные к композитным кластерам или солнечные элементы на основе одно- и многостенных углеродных нанотрубок.

Солнечный элемент с переходом металл-полупроводник

На рисунке 5а схематически показана структура солнечного элемента на основе перехода металл-полупроводник, который также называют солнечным элементом на основе квантовых точек с барьером Шоттки. В основном он изготовлен из слоев квантовых точек (пленки нанокристаллов), помещенных

между металлическим электродом и контрэлектродом *ITO*, нанесенным на прозрачную стеклянную подложку для работы в качестве фотоэлектрода. На диаграмме полос, показанной на рисунке 5б, область обеднения возникает из-за переноса заряда на пленку квантовых точек. Из-за высокой плотности электронов в металле (10^{22} см^{-3}) обеднение на его стороне ячейки пренебрежимо мало.



- а) - Схема солнечного элемента на основе квантовых точек с барьером Шоттки,
 б) - полосовая диаграмма солнечного элемента на основе квантовых точек Шоттки

Рисунок 5 – Схема и полосовая диаграмма солнечного элемента на основе квантовых точек

Послойное изготовление пленки квантовых точек осуществляется путем послойного нанесения покрытия на подложку. Например, при послойном изготовлении пленок квантовых точек PbSe пленка квантовых точек готовится методом окунания, чередуя PbSe NCs в гексане, а затем 0,1 M EDT в безводном кетонитриле, давая пленке высохнуть между каждым слоем [8]. Устройство с пленкой квантовой точки толщиной 140 нм достигло эффективности ~2,2 %. Гетеропереходный солнечный элемент был исследован путем напыления 150 нм слоя ZnO и растущих слоев квантовых точек PbS, изготовленных на воздухе (4,1 мг/мл концентрация НК PbS 820 нм в гексанах; 1 мм раствор 1,2-этандитиола в кетонитриле послойное осаждение в течение 20 циклов (~ 120 нм толщина пленки

PbS). Протестированные устройства показали хорошую стабильность на воздухе в течение 1 000 часов с энергоэффективностью ячейки 1,53 %.

Было обнаружено [9], что напряжение разомкнутой цепи в ячейке Шоттки ограничено из-за закрепления уровня Ферми в результате образования дефектных состояний на границе металл-полупроводник. Более того, как показано на рисунке 5а, фотоэлектроны сначала генерируются вблизи *ITO* (омический контакт) и должны пройти длинный путь до металлического электрода. Поэтому многие фотоэлектроны сталкиваются с высокой вероятностью рекомбинации. Также при начале фотоэлектрического действия инжекция дырочного тока в металлический контакт не уменьшается, поскольку барьер для инжекции дырок становится менее эффективным, как показано на рисунке 5б. *Gao J. et. Al* [10]. сообщили о методе устранения этого недостатка путем вставки слоя оксида переходного металла (ТМО) между слоем квантовой точки и металлическим электродом. Использование оксида переходного металла *n*-типа, такого как оксид молибдена (MoO_x) и оксид ванадия (V_2O_x), в качестве слоя для извлечения дырок в солнечных элементах на квантовых точках PbS привело к эффективности преобразования энергии = 4,4%. Образование диполя на границе раздела MoO_x и PbS усиливает связывание полос и, следовательно, позволяет эффективно извлекать дырки из валентной полосы пленки PbS с помощью MoO_x .

1.5 Гибридные солнечные элементы на основе кремния

Килимов и его коллеги [11] продемонстрировали возможность создания гибридных фотоэлектрических устройств, сочетающих преимущества зрелых технологий производства кремния с уникальными электронными свойствами полупроводниковых *QD*. Гибридные солнечные элементы на основе кремния/PbS *QD* пленки (нанокристаллы) демонстрируют внешнюю квантовую эффективность 7% в инфракрасном диапазоне энергий и 50% в видимом диапазоне, а эффективность преобразования энергии достигает 0,9%.

Солнечный элемент с *P-i-n* структурой

					ПГУ 2. 11.03.04. 001 ПЗ	Лист
						13
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата		

Достижения в области солнечных элементов с несколькими квантовыми ямами, и значительное повышение эффективности таких конфигураций $p-i-n$ структур за счет эффективного управления фотогенерируемыми переносами побудили исследователей заменить структуры квантовых ям во внутренней области полупроводников $III-V$ квантовыми точками. Нозик и его коллеги [12] предложили общую конфигурацию $p-i-n$ -перехода для включения массива квантовых точек в солнечные элементы. Массив квантовых точек образует активную среду ячейки (внутреннюю область). При таком расположении квантовые размерные эффекты не должны ослабевать из-за архитектуры ячейки, экситоны должны быть разделены до оже-рекомбинации, а при поглощении фотонов экситоны должны быть разделены на свободные носители заряда и транспортированы к соответствующим электродам. На рисунке 6 показаны слои квантовых точек, образующие i -область солнечного элемента.

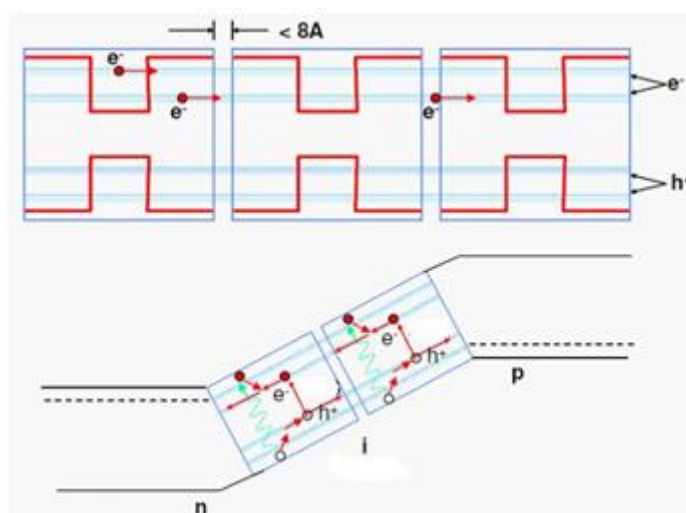


Рисунок 6 – Схемы $p-i-n$ квантовых точек для солнечных элементов

Квантовые точки электронно связаны друг с другом, чтобы поддерживать переход электронов и дырок. Кроме того, образуются мини-зоны, что может способствовать формированию промежуточной зоны [13]. Промежуточная энергетическая зона - это полоса поглощения энергии, которая может принимать электронные возбуждения из валентной зоны и затем переходят в зону проводимости. В солнечных элементах на квантовых точках с промежуточными

зонами фотоны с энергией ниже, чем у полосы пропускания, в основном поглощаются, а фотоны высокой энергии создают горячие заряды. Сбор заряженных носителей, пока они горячие, повышает напряжение ячейки. С другой стороны, усиление фототока может быть достигнуто за счет увеличения количества горячих носителей за счет обратной оже-рекомбинации (ударной ионизации), приводящей к множественной генерации экситонов *MEG*. Необходимо учитывать механизм туннелирования электронов между квантовыми точками. Исследование, проведенное группой Нозика, показало [14], что при сравнении характеристик солнечного элемента на основе GaAs с элементом, включающим внутреннюю область InAs/GaAs квантовых точек, зажатую между *p* и *n* GaAs эмиттерами, элемент демонстрирует расширенный отклик для энергий фотонов, меньших, чем ширина запрещенной зоны GaAs. Вклад в суммарный ток ячейки, полученный в результате сбора фотонов с энергией ниже энергии зазоров, незначителен.

Конфигурация структуры полимер-полупроводник

В 2002 году исследовали фотовольтаическое действие в гибридных наностержневых полимерных солнечных элементах и в условиях глобальной солнечной активности 1,5 воздушной массы получили эффективность преобразования энергии 1,7 %. Эта и другие работы подтолкнули многие группы к исследованию встраивания квантовых точек в полимеры. Квантовые точки диспергируются в органическо-полупроводниковых полимерных матрицах. Например, в дырочном проводящем полимере, таком как *MEH-PPV* (поли(2-метокси,5-(2-этил)-гексилоксихлоридвинилиден синтезированы неупорядоченные массивы квантовых точек CdSe. Когда ячейка освещается, поглощенные фотоны приводят к фотогенерируемым носителям. Фотогенерированные дырки попадают в полимерную фазу *MEH-PPV*, которая находится в контакте с металлическим электродом для облегчения их сбора. *Sun et al.* в 2003 году сообщили, что эффективность преобразования солнечной энергии в 1,8 % была достигнута при освещении AM1.5 для устройства, содержащего 86 % квантовых точек.

Сенсибилизированные квантовые точки солнечного элемента

Структура и принцип работы сенсибилизированных квантовых точек фотоэлектрического элемента практически идентичны сенсибилизированным красителями элементам, за исключением того, что теперь квантовые точки являются источником инжекции тока. Квантовые точки могут быть без труда адсорбированы из коллоидного раствора КД.

Сенсибилизированные красителем квантовые точки солнечных элементов.

Инкорпорация красителя с квантовыми точками в качестве сенсибилизатора широкозонных полупроводников привлекает внимание многих исследовательских групп. Например, мы обнаружили, что некоторые природные красители повышают эффективность преобразования энергии, а другие - нет. На рисунке 7 показан пример I - V характеристик первого исследования собранных ячеек, освещенных коллимированным лучом от лампы с горячей нитью накаливания.

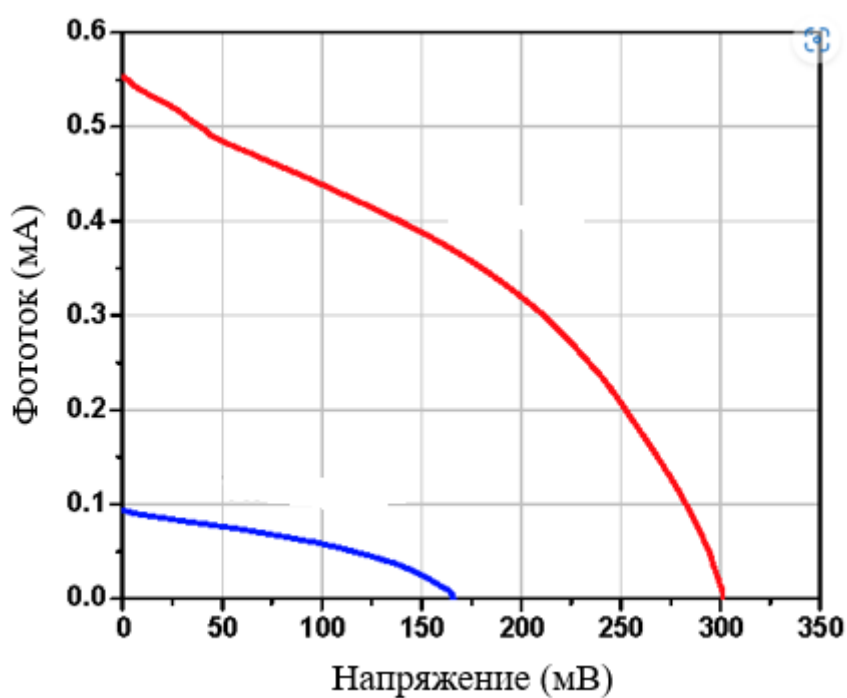


Рисунок 7 - I - V характеристики типичного собранного солнечного элемента, сенсибилизированного квантовыми точками и красителем. Квантовые точки среднего размера 2,4 нм и экстракт гранатового красителя использовались в качестве сенсибилизаторов нанопористого слоя TiO_2

Новая конфигурация на основе бислойных сенсibilизированных солнечных элементов с квантовыми точками и красителем была продемонстрирована Забаном и соавторами. Ячейка с бисенсибилизирующим слоем состоит из нанокристаллического TiO_2/CdS квантовых точек и аморфного $\text{TiO}_2/\text{N}_{719}$ красителя. Основной целью было создание конфигурации с повышенной эффективностью разделения зарядов за счет замедления процессов межфазной рекомбинации зарядов, что привело к увеличению эффективности ячейки на 250 % по сравнению с монослойной ячейкой.

Конфигурация, исследованная Забаном и соавторами [15], основана на создании коллоидных квантовых точек (CdSe/CdS/ZnS core/shell/shell QD), которые служат в качестве антенн. За счет нерадиационного переноса энергии поглощенный свет направляется к молекулам красителя, разделяющим заряды (молекулы красителя SQ_{02}). Коллоидные доноры квантовых точек встраиваются в твердый фотозлектрод TiO_2 , что приводит к высокой эффективности переноса энергии и значительному повышению стабильности ячейки. При таком подходе процессы поглощения света могут быть отделены от инжекции носителей заряда. Таким образом, этот подход позволяет оптимизировать каждый из них по отдельности. Измерения люминесценции с временным разрешением связывают значительный вклад квантовых точек в спектральный отклик ячейки в присутствии красителя с резонансным переносом энергии Фёрстера от квантовых точек к молекулам красителя.

Эффективность солнечных батарей может быть повышена путем объединения квантовых точек с каким-либо красителем, используемым в качестве сенсibilизатора. Мы предлагаем провести дальнейшие исследования, чтобы понять систему квантовая точка-краситель. Эффективность солнечных элементов, сенсibilизированных красителем или квантовыми точками, может быть увеличена путем оптимизации технологии приготовления, использования различных типов электролита, применения различных наноструктур (например, стержней, звезд) и замены TiO_2 на другие типы широкозонных полупроводников, таких как оксид цинка ZnO .

					ПГУ 2. 11.03.04. 001 ПЗ	Лист
						17
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата		

Кристаллические полупроводниковые солнечные элементы не только обладают низкой эффективностью из-за их ограничения по полосе пропускания предел Шокли-Куиссера [16], но и дороги с точки зрения стоимости производства в расчете на ватт вырабатываемой электроэнергии. В однопереходных громоздких полупроводниковых солнечных элементах фотоны с энергией, меньшей, чем полосовая щель, расходуются впустую, поскольку ни один из них не поглощается. Более того, избыточная энергия фотонов с энергией больше, чем у полосовой щели, теряется в виде тепла в результате термализации горячих носителей. Квантовая точка - это кристаллическая полупроводниковая наночастица. Примерами хорошо изученных структур квантовых точек являются CdS, CdSe, PbS и PbSe. Принцип работы сенсibilизированного квантовыми точками солнечного элемента аналогичен принципу работы сенсibilизированных красителем солнечных элементов *DSSCs*. В квантовой точке эффект конфинмента возникает из-за эффекта размера, когда размер частицы меньше или сопоставим с боровским радиусом экситона. При уменьшении размера квантовой точки ее характерный экситонный клюв становится синим.

2 Квантование энергетического спектра носителей заряда в квантовых точках

2.1 Модель прямоугольной потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками

Квантовая точка представляет собой квантовую систему, в которой движение электронов ограничено в трех направлениях. Энергетический спектр квантовых точек является дискретным, аналогично спектру атома. Из-за этого квантовые точки иногда называют искусственными атомами, несмотря на то, что они состоят из тысяч или даже сотен тысяч атомов.

Квантовая точка в форме прямоугольного параллелепипеда с непроницаемыми границами обладает наиболее простыми по форме волновыми функциями и энергетическим спектром. Если потенциальная яма, моделирующая такую точку, занимает определенную область пространства.

$$QD = \begin{bmatrix} 0 \leq x \leq L_x \\ 0 \leq y \leq L_y \\ 0 \leq z \leq L_z \end{bmatrix}, \quad (8)$$

где L_u - длина ребра параллелепипеда в u -м направлении, то потенциал $V(r)$ можно представить в виде:

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r \in QD, \\ \infty, & r \notin QD. \end{cases} \quad (9)$$

Однако, вне ямы QD связанные состояния носителей заряда отсутствуют. А внутри потенциальной ямы уравнение Шредингера, записанное в декартовых координатах, решается разделением переменных.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z). \quad (10)$$

Следует условиться, что

$$\psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z). \quad (11)$$

При этом функции X, Y и Z будут удовлетворять уравнениям типа гармонического осциллятора.

					ПГУ 2. 11.03.04. 001 ПЗ		
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата			
Разраб.		Винокуров	<i>Вин</i>		Лит.	Лист	Листов
Пров.		Игошина	<i>Иго</i>			19	55
Н.контр.		Рыжова	<i>Рж</i>	14.06.04.	Квантование энергетического спектра носителей заряда в квантовых точках гр. 20ПД1		
Утв.							

$$\frac{d^2 F}{du^2} + k_u^2 F = 0, \quad F = X, Y, Z, \quad u = x, y, z, \quad (12)$$

где k_u определяют полную энергию частицы.

$$E = \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2). \quad (13)$$

Тогда, уравнение (12) приобретет вид:

$$F(u) = A_u \sin(k_u u) + B_u \cos(k_u u). \quad (14)$$

Необходимым условием будет - обращение в нуль функции ψ на границах потенциальной ямы $u=0$ и $u=L_u$ дает $B_u=0$ и $k_u=\pi n_u/L_u$, а квантовые числа n_u будут- целые значения. Константы A_u будут определяться так, чтобы функции $F(u)$ были нормированы на единицу следующим образом:

$$\int_0^{L_u} F(u) du = 1. \quad (15)$$

Волновая функция и энергетический спектр носителей заряда в КТ будут представлены в виде:

$$\psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}} \sin\left(\frac{\pi n_x}{L_x} x\right) \sin\left(\frac{\pi n_y}{L_y} y\right) \sin\left(\frac{\pi n_z}{L_z} z\right), \quad (16)$$

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \pi^2 \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right), \quad (17)$$

Однако, бывают случаи, когда глубина потенциальной ямы QD является конечной. Тогда, аналитическое решение задачи отсутствует.

Из уравнений (16) и (17) следует, что трехмерное пространственное ограничение движения носителей заряда в квантовой точке приводит к расщеплению их непрерывного энергетического спектра на дискретные уровни размерного квантования $E_{n_x n_y n_z}^{c(u)}$.

$$E_{c(u)}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{c(u)}^*}, \quad (18)$$

Дискретный спектр наблюдается в ограниченных потенциальными стенками объемах, однако его проявление практически возможно лишь при небольших размерах объекта. Это обусловлено тем, что явления декогеренции

приводят к размытию энергетических уровней, что делает энергетический спектр воспринимаемым как непрерывный.

Энергия дискретных уровней обратно пропорциональна квадрату характерного размера квантовой точки. Например, для кубической квантовой точки с длиной ребра L данная зависимость имеет вид:

$$E_{n_x n_y n_z} \propto L^{-2}. \quad (19)$$

Эта особенность энергетического спектра имеет место и для других типов квантовых точек. При $L_x \neq L_y \neq L_z$ уровни в спектре невырождены. Иначе часть уровней оказываются вырожденными. Если в квантовой точке за начало отсчета энергии электронов принять потолок валентной зоны, то электронный спектр будет представлен в виде:

$$\varepsilon_{n_x n_y n_z}^{(c)} = E_g + E_{n_x n_y n_z}, \quad (20)$$

$$\varepsilon_{n'_x n'_y n'_z}^{(v)} = E_g + E_{n'_x n'_y n'_z}, \quad (21)$$

где E_g - ширина запрещенной зоны в объемном материале.

2.2 Модель цилиндрической квантовой ямы

Одними из наиболее перспективных методов создания наноструктур являются технологии, основанные на самоорганизации нанокристаллов на различных поверхностях. Самоорганизация металлических, полупроводниковых и диэлектрических наночастиц предоставляет уникальные возможности для формирования ансамблей с высокой степенью упорядочения, которые часто обладают новыми неожиданными свойствами и могут служить потенциальными элементами различных устройств.

Цилиндрически симметричная (цилиндрическая) квантовая точка широко используется для моделирования полупроводниковых нанокристаллов, полученных методом самоорганизации. Этот метод позволяет получать нанокристаллы в форме призм с практически округлыми основаниями. Волновые функции и энергетический спектр цилиндрической квантовой точки могут быть найдены аналитически только в предположении о наличии бесконечно высокого

потенциального барьера для носителей заряда. Если его принять, то потенциал $V(\mathbf{r})$ определится выражением (8), в котором

$$QD = \begin{bmatrix} 0 \leq \rho \leq \rho_0 \\ 0 \leq \varphi \leq 2\pi \\ 0 \leq z \leq h \end{bmatrix}, \quad (22)$$

где ρ_0 и h - соответственно радиус основания и высота квантовой точки.

Внутри квантовой точки уравнение Шредингера в цилиндрических координатах принимает вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(\rho, \varphi, z) = E \psi(\rho, \varphi, z). \quad (23)$$

А для определения волновых функций и спектра носителей, необходимо подставить в (16) $\psi(\rho, \varphi, z)$ в виде произведения $R(\rho)\Phi(\varphi)Z(z)$. Тогда уравнения примут вид:

$$\frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{dR}{d\rho} \right) + \left[(k^2 - \mu^2) \rho - \frac{\lambda^2}{\rho} \right] R = 0, \quad (24)$$

$$\frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} + \lambda^2 \Phi = 0, \quad (25)$$

$$\frac{d^2 Z}{dz^2} + \mu^2 Z = 0, \quad (26)$$

где

$$k^2 = 2m^*E/\hbar^2. \quad (27)$$

Заменой

$$\rho = u/\sqrt{k^2 - \mu^2}, \quad (28)$$

В таком случае уравнение (24) приобретет следующий вид:

$$\frac{d^2 R}{du^2} + \frac{1}{u} \frac{dR}{du} + \left(1 - \frac{\lambda^2}{u^2} \right) R = 0. \quad (29)$$

Ограниченным в нуле решением данного уравнения является цилиндрическая функция Бесселя $J_\lambda(u)$. Цилиндрические функции - это частные решения уравнения Бесселя. Они принимают любые вещественные или комплексные значения.

Введем постоянную:

$$\zeta^2 = \rho_0^2(k^2 - \mu^2), \quad (30)$$

При условии $R(\rho_0) = 0$ и условии нормировки $\int_0^{\rho_0} R^2 \rho d\rho = 1$, получим интересующее нас решение уравнения (24).

$$R_{n\lambda}(\rho) = \frac{\sqrt{2} J_\lambda(\zeta_{n\lambda} \rho / \rho_0)}{\rho_0 J_{\lambda+1}(\zeta_{n\lambda})}, \quad (31)$$

где $\zeta_{n\lambda}$ - n -й корень функции Бесселя λ -го порядка [$J_\lambda(\zeta_{n\lambda})=0$].

Решение уравнения (25) лучше представить в комплексной форме $\Phi_0 \exp(i\lambda\varphi)$ а решение уравнения (26) - в виде (14). Тогда оправданные условия $\Phi(2\pi)$ и $Z(0) = Z(h) = 0$, дадут нам:

$$\lambda = l \in N, B_z = 0 \text{ и } \pi m/h,$$

где $m=1,2,3,\dots$. В результате, нормированные составляющие волновой функции ψ , примут следующий вид:

$$\Phi_l(\varphi) = \frac{e^{il\varphi}}{\sqrt{2\pi}}, \quad Z_m(z) = \sqrt{\frac{2}{h}} \sin\left(\frac{\pi m}{h} z\right). \quad (32)$$

В итоге для волновой функции и энергетического спектра носителей заряда в цилиндрической квантовой точке мы имеем:

$$\psi_{nlm}(\rho, \varphi, z) = \sqrt{\frac{2}{\pi h \rho_0^2}} \frac{J_l(\zeta_{nl} \rho / \rho_0)}{J_{l+1}(\zeta_{nl})} \sin\left(\frac{\pi m}{h} z\right) e^{il\varphi} \quad (33)$$

$$E_{nlm} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\zeta_{nl}^2}{\rho_0^2} + \frac{\pi^2 m^2}{h^2} \right) \quad (34)$$

Волновая функция ψ_{nlm} нормирована в следующем образом:

$$\int_{QD} \psi_{n'l'm'}^*(r) \psi_{nlm}(r) dr = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \quad (35)$$

Однако, т.к. $J_{-l}(u) = (-1)^l J_l(u)$, то все состояния (33) и (34) с $l \neq 0$ дважды вырождены по энергии.

2.3 Модель сферической потенциальной ямы

Сферическая квантовая точка моделируется с использованием сферически симметричной потенциальной ямы. Благодаря сферической симметрии задачи переменные в уравнении Шредингера разделяются для всех потенциалов вида $V(|r|)$. Вводятся два условия: во-первых, потенциальная яма $V(|r|)$ имеет бесконечно высокие стенки, например, когда полупроводниковая квантовая точка находится в диэлектрике или жидкости. Во-вторых, квантовая точка представляет собой сферу радиуса R . Таким образом, потенциальная яма, создаваемая квантовой точкой, имеет следующий вид:

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r \leq R, \\ \infty, & r \geq R. \end{cases} \quad (36)$$

Записанное в сферических координатах уравнение Шредингера внутри квантовой точки будет определяться следующим образом:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{l}^2}{r^2} \right] \psi(r, \vartheta, \varphi) = E \psi(r, \vartheta, \varphi) \quad (37)$$

где

$$\hat{l}^2 = -\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}, \quad (38)$$

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

$$\hat{l}^2 Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = l(l+1) Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad (39)$$

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi}, \quad (40)$$

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots,$$

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

$P_l^m(\cos \vartheta)$ - полиномы Лежандра. В силу (39), уравнение (37) допускает разделение радиальной и угловых переменных. Полагая, что $\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ для радиальной части волновой функции получаем

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R = 0, \quad (41)$$

где

$$k^2 = 2m^*E/\hbar^2. \quad (42)$$

конечным в нуле решением данного уравнения будет функция

$$R_l(r) = C_l j_l(kr) \quad (43)$$

$j_l(u) = (\pi/2u)^{1/2} J_{l+1/2}(u)$ - сферическая функция Бесселя. Постоянная C_l определяется условием нормировки, а условие $R_l(R) = 0$ определяет спектр энергии носителей.

Таким образом, для волновых функций и энергетического спектра носителей заряда запишем следующие выражения:

$$\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{2}{R^3}} \frac{j_l\left(\frac{\xi_{nl}r}{R}\right)}{j_{l+1}(\xi_{nl})} Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad (44)$$

$$E_{nl} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\xi_{nl}^2}{R^2}, \quad (45)$$

где n , l и m - главное квантовое число, угловой момент и его проекция, соответственно, $\xi_{nl} = k_{nl}R$ - n -й корень функции Бесселя l -го порядка [$j_l(\xi_{nl}) = 0$].

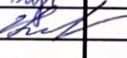
Так как $j_0(x) = \sin x/x$, то $\xi_{n0} = \pi n$. При $l \neq 0$ аналитическое выражение для ξ_{nl} отсутствует.

Из вышесказанного следует, что энергия дискретных уровней обратно пропорциональна квадрату радиуса квантовой точки. Поскольку энергия носителей заряда в квантовой точке не зависит от квантового числа m , все состояния с $l \neq 0$ вырождены по энергии с кратностью $2l+1$ [17].

3 Моделирование характеристик солнечных элементов с КТ в зависимости от формы КТ

3.1 Определение фотоэлектрических свойств селенида кадмия сферической и отличной от сферической геометрии.

Благодаря легкости получения высококачественных образцов соединения *II-VI*, *CdSe*, стала системой, которая широко используется для фундаментальных исследований электронных и оптических свойств *NQD*. *CdSe NQ* можно надежно получить путем пиролиза различных предшественников кадмия, включая кадмиевые соединения (например, диметилкадмий) и различные соли кадмия (например, оксид кадмия, ацетат кадмия и карбонат кадмия), в сочетании с предшественником селена, полученным из порошка селена, растворенного в триоктилфосфине (*TOP*) или трибутилфосфине (*TBP*). Изначально использовалась комбинация растворителей для поверхностно-активных веществ, технического оксида триоктилфосфина (*TOPO*) и *TOP*, где эффективность *tech-TOPO* была зависима от партии из-за случайного присутствия посторонних примесей. Совсем недавно *tech-TOPO* был заменен на "чистый" *TOPO*, в который были добавлены фосфоновые кислоты для контролируемого имитирования присутствия примесей технического качества. Кроме того, *TOPO* был заменен различными жирными кислотами, такими как стеариновая и лауриновая кислоты, в которых алкильная цепь короче длины, что обеспечивает более быстрый рост частиц. Системы жирных кислот совместимы со всем спектром предшественников кадмия, но наиболее подходят для выращивания более крупных *NQD* (>6 нм в диаметре) по сравнению с системой *TOPO/TOP*. Алкиламины также успешно использовались в качестве среды для выращивания *CdSe*. Несовместимыми системами являются те, которые содержат анион сильной кислоты и системы на основе тиола. Возможно, наиболее успешная система с точки зрения получения высоких квантовых выходов (*QY*) в эмиссии и в монодисперсных образцах использует более сложную

					ПГУ 2. 11.03.04. 001 ПЗ		
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата			
Разраб.		Винокуров			Лит.	Лист	Листов
Пров.		Игошина				26	55
Н.контр.		Рыжова		27.06.14	Моделирование характеристик солнечных элементов с КТ в зависимости от формы КТ гр. 20ПД1		
Утв.							

смесь поверхностно-активных веществ: стеариновую кислоту, *ТОРО*, гексадециламин (*HDA*), *TBP* и диоктиламин. Разделение зарядов между возбужденными полупроводниковыми квантовыми точками CdSe и углеродными нанотрубками (*SCCNT*) успешно использовалось для генерации фототока в сенсibilизированном квантовыми точками солнечном элементе (*QDSC*). Мы использовали метод электрофоретического осаждения для создания композитных пленок *SCCNT*–CdSe на оптически прозрачных электродах (*OTE*). Гашение излучения CdSe и измерения переходного поглощения подтверждают быстрый перенос электронов на *SCCNT*. Константа скорости переноса электронов увеличивается с уменьшением размера наночастиц CdSe. Способность *SCCNT* собирать и транспортировать электроны от возбужденного CdSe была установлена с помощью фототоковых измерений. Морфологические свойства и свойства возбужденного состояния композитов *SCCNT*–CdSe демонстрируют их полезность в устройствах преобразования энергии.

Фотоэлектрические характеристики CdSe *QD*-сенсibilизированных элементов сравниваются со стандартными солнечными элементами, сенсibilизированными красителем, и показывают около половины эффективности последних. Из кинетики переноса заряда, контролируемой спектроскопическими измерениями переходных процессов и затухания напряжения в CdSe *QD*-сенсibilизированной ячейке, было обнаружено, что выход регенерации окисленных *QD* близок к единице, а время жизни электронов в CdSe *QD*-сенсibilизированном элементе больше, чем в сенсibilизированном красителем солнечном элементе.

3.2 Энергетические спектры квантовых точек селенида кадмия

При уменьшении размеров частиц нанокристаллов поверхностные свойства становятся все более существенными для определения их структурных и оптических характеристик. Увеличение отношения поверхности к объему при уменьшении размера частиц приводит к усилению влияния состояния поверхностных ловушек на фотолюминесцентные свойства, включая эффективность излучения, форму спектра, положение и динамику. Кроме того,

поверхности полупроводниковых нанокристаллов часто взаимодействуют со своим окружением как растворимые частицы в органических растворах, реагенты в органических реакциях, центры полимеризации, биологические метки, доноры или акцепторы электронов и дырок. Контроль химического состава поверхности неорганических и органических соединений является ключевым аспектом управления физическими и химическими свойствами нанокристаллов, делающими их уникальными по сравнению с аналогами на основе эпитаксиальных квантовых точек.

Нанесение эпитаксиальных слоев из ZnS или CdS на высокомонодисперсные CdSe нанокристаллы стало распространенной практикой, что обычно приводит к значительному повышению эффективности фотолюминесценции почти на порядок по сравнению с нанокристаллами, покрытыми исключительно органическими соединениями. Улучшение квантовой эффективности достигается за счет улучшения координации поверхностных связей и увеличения концентрации носителей заряда в ядре частицы. Этот эффект возникает при условии, что ширина запрещенной зоны материала оболочки больше, чем ширина запрещенной зоны материала сердцевинки, как, например, в случае с частицами (CdSe)ZnS и (CdSe)CdS. Также было успешно нанесено покрытие на полупроводники III-V классов. Различные препараты обладают различными синтетическими свойствами. Оптимальные результаты достигаются при начальном узком распределении частиц по размерам, так как процесс роста оболочки приводит к некоторому расширению распределения. Спектры поглощения остаются относительно неизменными по свойствам поверхности и могут быть использованы для контроля стабильности сердцевинки нанокристалла во время и после роста оболочки.

Кроме того, если смещение зоны проводимости между материалами сердцевинки и оболочки достаточно велико (т.е. велико по сравнению с энергией удержания электронов), то значительного красного смещения края полосы поглощения происходить не должно, поскольку волновая функция электронов остается ограниченной сердцевинкой (рисунок 9). Большое красное смещение в

системах оболочки (ядра), имеющее достаточно большие смещения (определяемые идентичностью материалов ядра/оболочки и эффективными массами электронов и дырок) указывают на рост частиц ядра в процессе подготовки оболочки. Небольшое увеличение коэффициента поглощения является обычным явлением и является результатом некоторого увеличения дисперсии частиц по размерам (рисунок 9). Если бы это произошло, на спектрах поглощения также было бы заметно сплавление или смешивание компонентов оболочки с внутренней частью сердцевины. Край полосы сместился бы к какому-то промежуточному значению энергии между энергиями зон соответствующих материалов, содержащих разрешенную наночастицу. Спектры *PL* могут быть использованы для определения того, была ли достигнута эффективная пассивация поверхностных ловушек. В плохо пассивированных нанокристаллах излучение с глубокими ловушками проявляется в виде широкого хвоста или выпуклости в красном спектральном сигнале с более резким краем полосы. Широкий сигнал ловушки исчезнет, а резкое свечение по краям полосы усилится после успешного роста оболочки (рисунок 8). На рисунке 8 диаметры сердцевины (а) составляют 2,3, (б) 4,2, (в) 4,8 и (г) 5,5 нм. Значения *PL* (ядра) оболочки составляют (а) 40, (б) 50, (в) 35 и (г) 30%. Излучение в состоянии ловушки проявляется в спектре ФЛ частиц ядра (а) в виде широкой полосы, приближающейся к красному краю полосы, и отсутствует в соответствующем спектре оболочки (ядра)

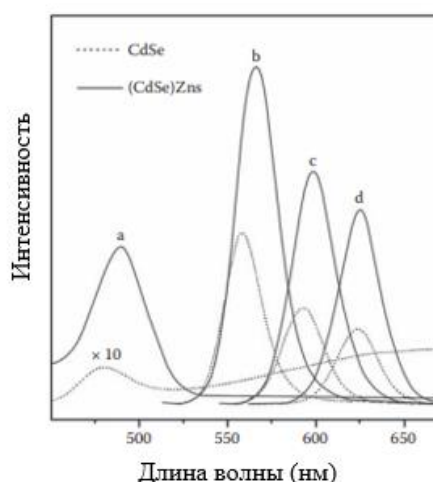


Рисунок 8 - Спектры *PL* для *KT* CdSe и (CdSe) оболочечных *KT* ZnS

Процессы гомогенного зарождения и роста материала оболочки в виде отдельных наночастиц могут конкурировать с гетерогенным зарождением и ростом на поверхности частиц сердцевин. Для предотвращения образования отдельных частиц обычно применяется комбинация относительно низких концентраций предшественников и низких температур реакции. Низкие концентрации предшественников способствуют условиям недостаточного насыщения раствора, стимулируя рост оболочек через гетерогенное зарождение. Добавление исходных веществ, таких как диэтилцинк и бис(триметилсилил)сульфид, каплями при низких температурах, предотвращает накопление и перенасыщение непрореагировавших мономеров-предшественников в растворе для выращивания. Использование низких температур реакции помогает избежать роста исходных частиц ядра. Например, оболочки ZnS могут формироваться и расти кристаллически при температурах до 140°C, а оболочки CdS успешно получены из диметилкадмия и бис(триметилсилила)сульфида при 100°C, что помогает избежать проблем с образованием однородных зародышей и ростом частиц в сердцевине. Другие стратегии для предотвращения роста частиц в материале оболочки включают использование органических покрывающих лигандов с высоким сродством к металлу оболочки. Присутствие сильного связующего вещества способствует более контролируемому росту оболочки. Например, замена *TOP* на *ТОРО* при росте оболочки CdSe на ядрах InAs позволяет более эффективно контролировать процесс роста. Наконец, соотношение катионных и анионных предшественников может быть использовано для предотвращения образования однородных зародышей в материале оболочки. Например, увеличение концентрации халькогенида в смеси предшественников кадмия и серы помогает предотвратить образование нежелательных частиц CdS. На рисунке 9 спектры оболочки (ядра) более широкие и слегка смещены в красную сторону по сравнению с аналогами ядра. Диаметры оболочки составляют (a) 2,3, (b) 4,2, (c) 4,8 и (d) 5,5 нм.

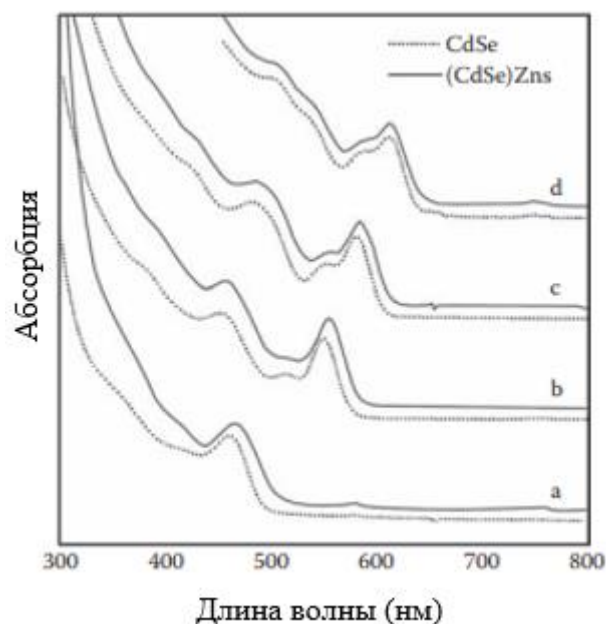


Рисунок 9 - Спектры поглощения для обычных (пунктирные линии) и 1-2-слойных КТ, покрытых ZnS (сплошные линии) КТ CdSe

3.3 Моделирование влияния поверхностных свойств КТ на электрофизические свойства нанокристаллов.

Важной характеристикой квантовых точек, ответственной за их поведение, является поверхностный эффект. Таким образом, отношение площади поверхности к объему материала или субстанции, изготовленных из наночастиц, оказывает значительное влияние на свойства материала. КТ имеют относительно большую площадь поверхности по сравнению с той же массой материала в насыпном виде. Это делает их более химически активными, что оказывает значительное влияние на их прочность и электрические свойства. Были рассмотрены сферическая, кубическая и тетраподная формы КТ и применены основные математические формулы, основанные на геометрии, чтобы установить фундаментальное соотношение площади поверхности к объему частиц.

Для полупроводникового нанокристалла сферической формы уравнение для площадей поверхности сферы радиуса r описывается формулой:

$$S = 4 \cdot \pi \cdot r^2 \quad (46)$$

Объем сферы V определяется как:

$$V = \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot r^3 \quad (47)$$

Тогда отношение площади поверхности к объему становится:

$$\alpha = \frac{4 \cdot \pi \cdot r^2}{\frac{4}{3} \cdot \pi \cdot r^3} = \frac{3}{r} \quad (48)$$

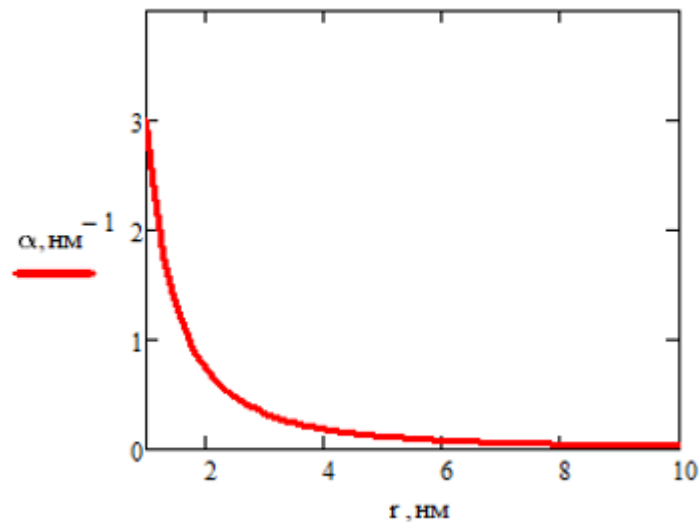


Рисунок 10 – Моделирование изменения удельной поверхности КТ при различных размерах квантовых точек сферической формы

Аналогично, для полупроводникового нанокристалла кубической формы с длиной стороны L уравнение площадей поверхности куба имеет вид:

$$S = 6 \cdot L^2 \quad (49)$$

Объем куба V равен:

$$V = L^3 \quad (50)$$

Тогда отношение площади поверхности к объему для куба становится:

$$\alpha = \frac{6 \cdot L^2}{L^3} \quad (51)$$

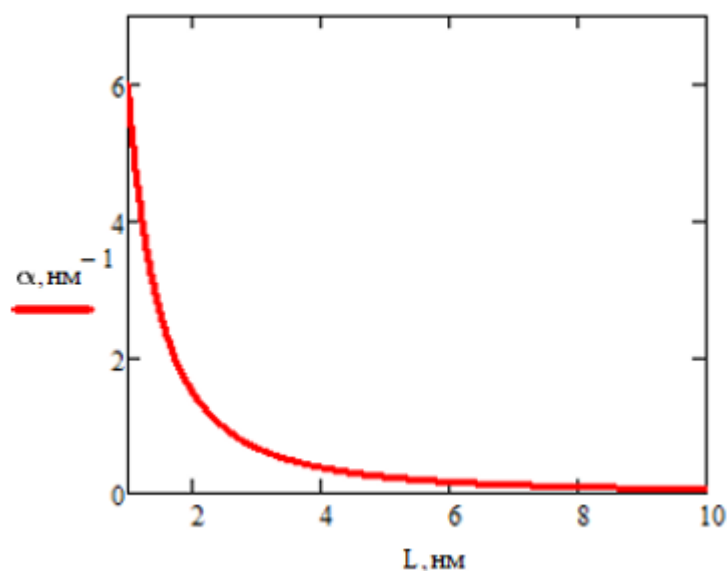


Рисунок 11 – Моделирование изменения удельной поверхности КТ при различных размерах квантовых точек кубической формы

Аналогично, для полупроводникового нанокристалла формы тетраэдра с длиной стороны L уравнение площадей поверхности тетраэдра будет иметь вид:

$$S = \sqrt{3} \cdot L^2 \quad (52)$$

Объем тетраэдра V равен:

$$V = \frac{L^3 \cdot \sqrt{2}}{12} \quad (53)$$

Тогда отношение площади поверхности к объему для тетраэдра становится:

$$\alpha = \frac{6 \cdot \sqrt{6}}{L} \quad (54)$$

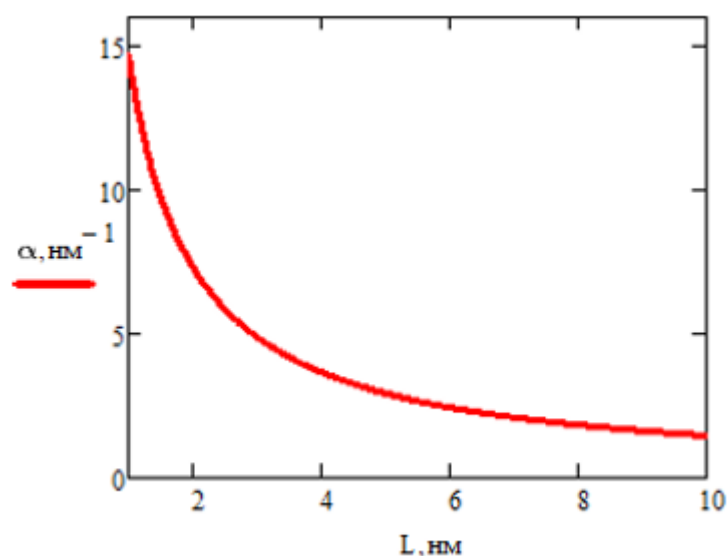


Рисунок 12 – Моделирование изменения удельной поверхности КТ при различных размерах квантовых точек в форме тетраэдра

Аналогично, для полупроводникового нанокристалла формы цилиндра с радиусом r и высотой h уравнение площадей поверхности цилиндра будет иметь вид:

$$S = 2 \cdot \pi \cdot r(r + h) \quad (55)$$

Объем цилиндра V равен:

$$V = \pi \cdot r^2 \cdot h \quad (56)$$

Тогда отношение площади поверхности к объему для цилиндра становится:

$$\alpha = \frac{2 \cdot \pi \cdot r(r + h)}{\pi \cdot r^2 \cdot h} = \frac{2 \cdot r + 2 \cdot h}{r \cdot h} \quad (57)$$

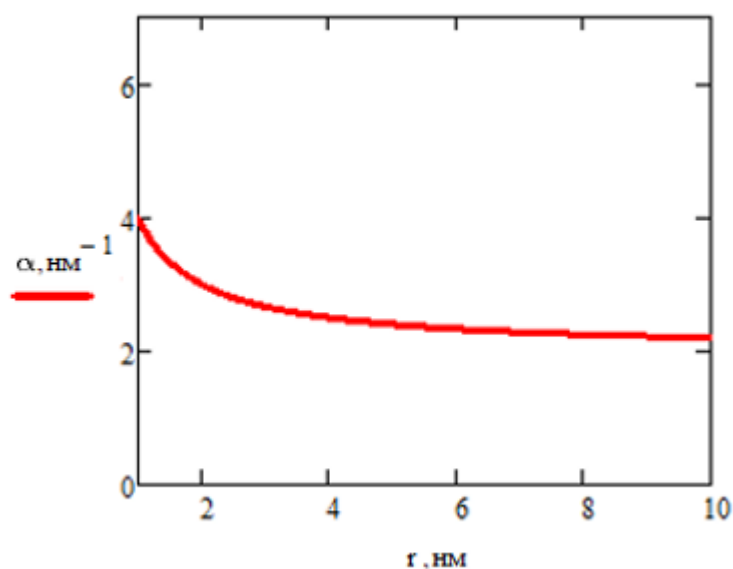


Рисунок 12 – Моделирование изменения удельной поверхности КТ при различных размерах квантовых точек цилиндрической формы

В зависимости от формы кристалла, отношение площади поверхности к объему указывает на то, что площадь поверхности увеличивается быстрее, чем объем, при уменьшении размера кристалла. Это свидетельствует о том, что при состоянии материала из более мелких частиц поверхностная площадь также увеличивается. Максимальная площадь открытой поверхности обеспечивает повышенную реакционную способность, что приводит к большему проценту атомов материала, подверженных потенциальной реакции. Уравнения площади поверхности на единицу объема для разных форм кристаллов с одинаковым объемом показывают различную поверхностную площадь. Поэтому важны не только размеры частиц квантовых точек, но и их форма. Таким образом, форма квантовых точек играет решающую роль в определении площади поверхности материала и его свойств.

На рисунке 14 показана площадь поверхности на единицу объема для различных форм кристаллов. Исследования показали, что отношение площади поверхности к объему масштабируется согласно обратному степенному закону. Это означает, что отношение площади поверхности к объему увеличивается с уменьшением размера частицы и наоборот. Кроме того, для материала с тем же

объемом, но состоящего из более мелких частиц, площадь поверхности увеличивается, что приводит к относительно большей поверхностной площади по сравнению с материалом, состоящим из более крупных частиц.

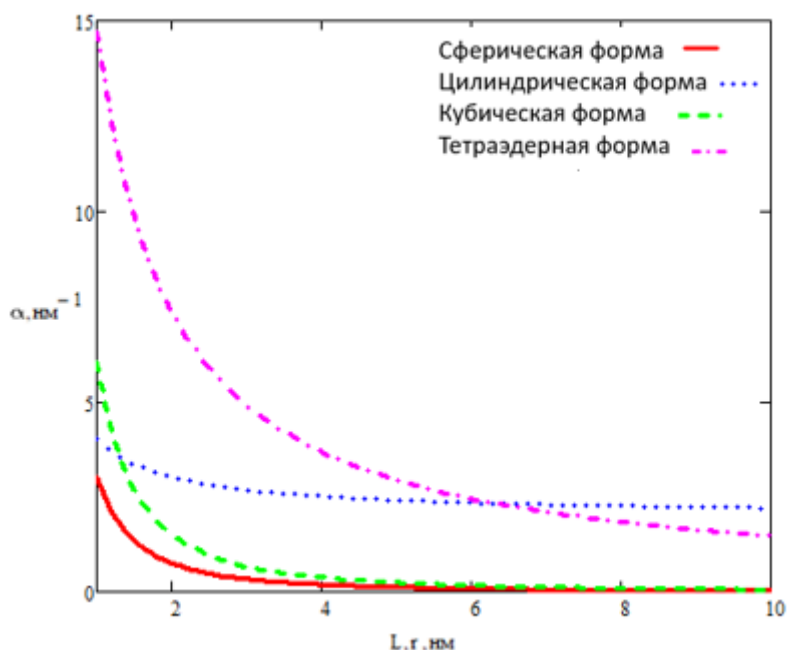


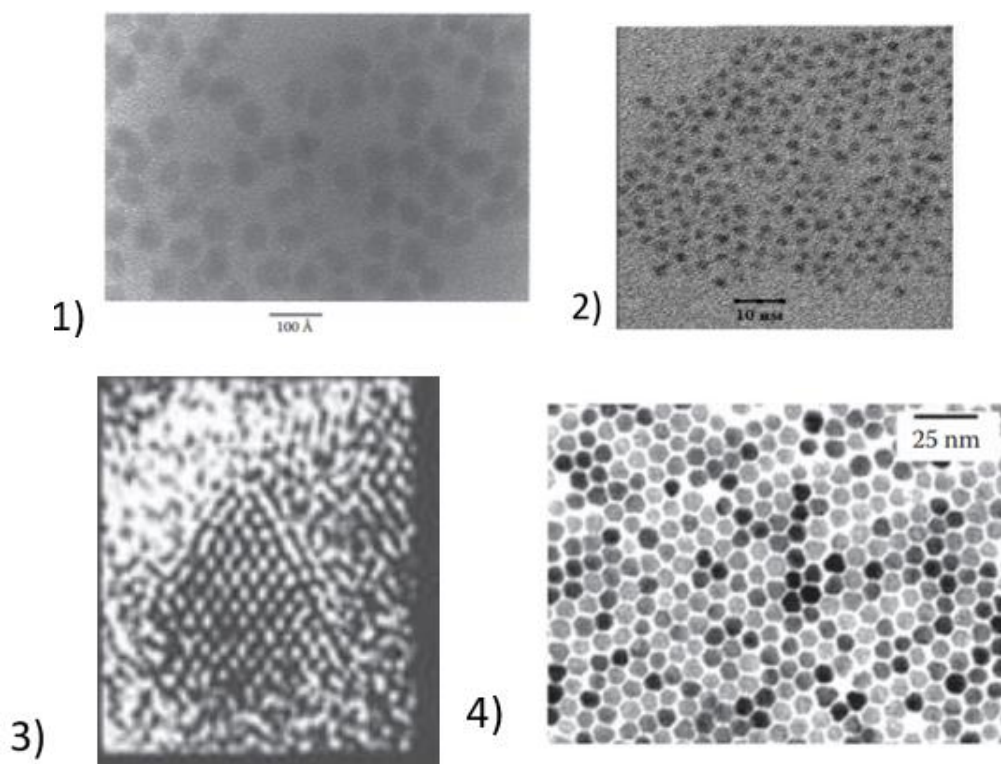
Рисунок 14 – Сравнительный анализ изменения удельной поверхности КТ, занимаемой квантовыми точками различной геометрической формы

Большая площадь поверхности на единицу объема, обеспечиваемая квантовыми точками, имеет значительное преимущество для поглощения света и разделения зарядов - двух важных этапов преобразования солнечной энергии в электрическую энергию. Увеличение площади поверхности способствует более эффективному поглощению света, поскольку фотоны проходят через больше материала и имеют больше шансов быть поглощенными. Кроме того, такая архитектура создает большую межфазную область, что позволяет электронам и дыркам, образующимся при поглощении фотонов, перемещаться на небольшие расстояния перед разделением. Это снижает вероятность рекомбинации и увеличивает количество собранных зарядов, генерируемых фотонами.

Большая площадь поверхности также означает большое количество поверхностных атомов. В наноразмерных полупроводниках это приводит к их высокой химической активности. Химические реакции между частицами на

поверхности играют важную роль, и масса наноматериала на поверхности является более реакционноспособной по сравнению с той же массой материала, состоящего из крупных частиц. В целом физические и химические свойства материала в значительной степени зависят от поверхностных атомов. Большое количество атомов на поверхности нанокристаллов оказывает огромное влияние на реакции, происходящие на границе раздела (поверхности), такие как катализ и детектирование реакций.

Реальные размеры квантовых точек CdSe разной формы, снятых с помощью средств электронной микроскопии представлены на рисунке 15:



1) КТ CdSe кубической формы, 2) КТ CdSe сферической формы, 3) КТ CdSe тетраэдрной формы, 4) КТ CdSe цилиндрической формы.

Рисунок 15 - Типичное ПЭМ-изображение КТ CdSe

В работе проводилось сравнение свойств от формы нанокристалла КТ CdSe с использованием различных предельных моделей: куб, сфера, тетраэдр, цилиндр.

Реальная форма КТ при определенном размере будет заметно влиять на электронный спектр рассматриваемых объектов и на электрофизические и оптические свойства.

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

Работа инженера-исследователя в области нанотехнологии предполагает разработку методов получения, исследования и контроля параметров наноструктур, требующую использования различного технологического и исследовательского оборудования. Для обеспечения необходимых условий труда следует уделить внимание организации рабочего пространства инженера-исследователя.

В лаборатории, где деятельностью занимается инженер-исследователь, стены окрашены в бежевый цвет, потолок покрашен в белый цвет, а пол покрыт линолеумом. Однако размеры помещения должны соответствовать количеству работающих и размещенному в нем оборудованию для обеспечения необходимых условий труда. Согласно санитарно-гигиеническим нормам, на каждого работающего должно приходиться определенное пространство: объем помещения не менее 19.5 м³, площадь помещения не менее 6 м². Помещение должно соответствовать стандартам чистоты воздуха, температуры, освещения, изоляции от шума и другим аспектам охраны труда.

Важно отметить, что создание оптимальных условий труда для научной работы в области нанотехнологии играет важную роль в повышении эффективности работы инженера-исследователя и его научных достижений. Рабочее место инженера-исследователя является ключевым элементом производственной цепочки, поэтому его планировка должна соответствовать стандартам, обеспечивающим не только комфорт и удобство работы, но и экономию времени и энергии оператора.

Основным требованием к рабочему месту является использование стандартных размеров рабочего стола (1100 x 650 мм), на котором размещается

					ПГУ 2. 11.03.04. 001 ПЗ		
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата			
Разраб.	Винокуров		<i>Винокуров</i>		Лит.	Лист	Листов
Пров.	Игошина		<i>Игошина</i>			38	55
Н.контр.	Рыжова		<i>Рыжова</i>	12.06.24	гр. 20ПД1		
Утв.							
Анализ влияния освещенности научно- исследовательской лаборатории на работу инженера-исследователя							

необходимое оборудование. Рациональное использование производственных площадей, удобство обслуживания компьютерных устройств и соблюдение правил охраны труда также крайне важны. Недостаток должных условий на рабочем месте может привести к серьезным последствиям, что недопустимо при выполнении исследовательских задач.

Ключевым аспектом рабочего места инженера-исследователя является комплект оборудования, размещенный на стандартном рабочем столе. Этот комплект включает в себя компьютер, состоящий из системного блока, жидкокристаллического монитора, клавиатуры и мыши, а также экрана и классной доски. Для повышения эффективности выполнения задач рабочее место руководителя лаборатории оснащено четырьмя персональными компьютерами. Важно учитывать, что планировка рабочего места должна соответствовать стандартам для обеспечения комфортной работы, экономии энергии и времени оператора, рационального использования производственных мощностей, а также обеспечения простоты обслуживания и соблюдения правил охраны труда.

Для обеспечения комфортных и безопасных условий работы оператора-исследователя необходимо адекватно оборудовать его рабочее место.

Первая зона работы инженера-исследователя связана с измерением вольт-фарадных характеристик. Рабочее место должно быть оснащено компьютером, включающим системный блок, монитор, клавиатуру и мышь, а также измерительную установку.

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

Третья зона работы связана с изучением многослойных печатных плат. Рабочее место должно быть оснащено универсальным вольтметром, осциллографом и блоком питания. Такой набор оборудования необходим для

					ПГУ 2. 11.03.04. 001 ПЗ	Лист
						39
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата		

анализа работы многослойных печатных плат и выявления возможных неисправностей. Работа в лаборатории требует концентрации и внимательности. Адекватное оборудование рабочего места позволит оператору-исследователю выполнять свои задачи более эффективно и снизит риск возможного вредного воздействия на здоровье.

Естественное или искусственное освещение рабочего места, повышенная или пониженная влажность, недостаточная или повышенная температура воздуха, превышение допустимого уровня шума и электромагнитного излучения, перенапряжение зрительного аппарата, чрезмерная запыленность воздуха и уровень статического электричества, превышающий установленные нормы, представляют собой факторы, способные негативно повлиять на рабочее состояние человека и его производительность. Анализ этих факторов и определение их уровня являются существенной задачей для улучшения условий труда и защиты здоровья работников. Например, правильная настройка освещения, оптимизация температуры и влажности, снижение уровня шума и электромагнитного излучения, контроль чистоты воздуха и уровня статического электричества могут помочь уменьшить риски для работников и повысить производительность. Соблюдение стандартов и предписаний, применимых к этим аспектам, является необходимым для обеспечения безопасности и комфорта персонала. Для обеспечения безопасности и комфорта работников также требуется принятие защитных и профилактических мер, таких как мониторинг шума и электромагнитного излучения, очистка воздуха с использованием фильтров и систем вентиляции, а также обеспечение соответствующего освещения и температурного режима.

Лаборатории представляют собой места проведения научных экспериментов и исследований в различных областях знания. Однако работа в таких помещениях требует учета рисков для здоровья и безопасности персонала. Особое внимание следует уделить уровням ионизирующего излучения, которые, согласно ГОСТ Р (52241-2004), могут представлять опасность для здоровья человека при превышении допустимых пределов этого параметра, что требует

					ПГУ 2. 11.03.04. 001 ПЗ	Лист
						40
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата		

принятия соответствующих защитных мер. Работники научных лабораторий также подвергаются риску поражения электрическим током при работе с электрооборудованием; ГОСТ (12.4.026-2015) определяет необходимые меры для предотвращения подобных инцидентов.

Стресс также может стать причиной заболеваний и психических расстройств среди лаборантов в научных лабораториях. В то же время умственное переутомление может негативно отразиться на качестве и точности проводимых исследований.

Важным аспектом безопасности в научных лабораториях является риск возникновения пожаров, который регулируется стандартом ГОСТ 12.1.044-2018, предусматривающим различные меры по предотвращению и тушению пожаров в рабочих зонах. Также следует отметить, что безопасность персонала в научных лабораториях тесно связана с соблюдением определенных параметров микроклимата. Работа в условиях повышенной температуры воздуха или в сильно запыленной среде может представлять риски для здоровья согласно ГОСТу 1.1.005-88, который устанавливает предельно допустимые параметры микроклимата для научных лабораторий.

Рабочие зоны инженеров института соответствуют нормам по уровню шума не превышающим 60 дБА, что соответствует требованиям ГОСТ 12.1.012-90. Оценка воздействия электромагнитных полей на человека проводится в соответствии с действующими стандартами, определяемыми ГОСТом Р 54148-2010. Для обеспечения электробезопасности лаборатории применяются меры, соответствующие требованиям ГОСТ 12.4.026-2015.

Рабочие места инженеров-исследователей оснащены 17-дюймовыми ЖК-мониторами *Samsung 710N* с разрешением 1280×724 пикселей и частотой обновления 75 Гц, соответствующими стандартам ТСО-99, обеспечивая необходимый уровень электромагнитного излучения. Устройства питаются от сети переменного тока с напряжением 220 В и имеют номинальное напряжение до 1000 В благодаря заземлению.

					ПГУ 2. 11.03.04. 001 ПЗ	Лист
						41
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата		

Институт обеспечивает высокий уровень электробезопасности персонала, следуя инструкциям и техническим требованиям, что позволяет минимизировать риски для здоровья и обеспечить безопасные условия труда в научных лабораториях.

В соответствии с ГОСТ 12.1.030-81, компьютер подключается к сети переменного тока напряжением 220 вольт через трехконтактную вилку, третий контакт которой заземлен. При проведении исследований, эксплуатации, ремонте и обслуживании компьютера необходимо строго соблюдать определенные правила. Запрещается изменять вилку любого электрического оборудования, подключенного к сети. Также запрещается обслуживать или открывать корпус компьютера при наличии напряжения, чтобы избежать возможных несчастных случаев. Работа с неизвестным электрооборудованием или с ненадежно заземленным оборудованием не рекомендуется.

При выполнении научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в лаборатории следует учитывать возможность пожара. Согласно статистике, наиболее распространенными причинами пожаров являются неисправное электрооборудование, неисправные электрические сети и нарушение правил эксплуатации и пожарной безопасности. Для уменьшения вероятности возникновения пожара ГОСТ 12.1.044-2018 предусматривает различные меры, такие как использование автоматических выключателей прямого доступа для оперативного отключения оборудования в случае неисправности.

Кроме того, для тушения пожаров технологического оборудования применяются огнетушители заряженного ОТВ массой 2 кг, которые комплектуются в соответствии с техническими требованиями. Аварийные выходы также являются важной мерой безопасности, обеспечивающей быструю эвакуацию из лаборатории в случае пожара. Рекомендуется проводить инструктаж по пожарной безопасности, чтобы информировать персонал о мерах предотвращения пожаров и правильном поведении в случае возникновения чрезвычайной ситуации.

					ПГУ 2. 11.03.04. 001 ПЗ	Лист
						42
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата		

Освещение в лаборатории играет значительную роль для работы инженеров-исследователей. Его рациональная организация требует соблюдения гигиенических, технических и экономических норм. Правильно спроектированное освещение благоприятно влияет на производительность труда, работоспособность и общее самочувствие персонала.

Недостаточное освещение или недостаток естественного света могут отрицательно сказываться на визуальном восприятии и функционировании центральной нервной системы, вызывая головные боли, раздражительность и снижение концентрации внимания. Это также может привести к ухудшению производительности труда и затруднению восприятия информации. С другой стороны, избыточное освещение на рабочем месте может вызвать блики и оказывать раздражающее воздействие на глаза. Неправильно направленный свет может создавать резкие тени и блики на мониторах, что затрудняет восприятие информации.

В свете изложенного, обеспечение должного освещения в лабораториях является необходимым. Это достигается путем правильного размещения и использования естественного и искусственного освещения, а также соблюдения соответствующих стандартов. Это позволяет повысить эффективность работы исследователей. При выборе системы освещения для рабочей зоны в лаборатории следует учитывать требования, предусмотренные в СНиП 23 – 05-95. Один из ключевых параметров – это освещенность, которая должна соответствовать виду выполняемой работы, особенно визуальной. Кроме того, необходимо обеспечить постоянство освещения, равномерное распределение яркости на рабочей поверхности и оптимальное освещение лампами от светильников.

Электробезопасность, пожаробезопасность, удобство использования, долговечность, экономичность и эффективность системы освещения также являются важными факторами.

При проведении исследований наноструктурированных материалов техники-исследователи должны быть осторожны при работе с компьютерными мониторами и составлении научно-технической документации. В соответствии с

					ПГУ 2. 11.03.04. 001 ПЗ	Лист
						43
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата		

рекомендациями СНиП 23–05–95, для рабочей зоны рекомендуется использование комбинированного освещения с уровнем освещенности не менее 200 люкс. Для поддержания постоянной яркости может быть установлено дополнительное искусственное освещение, которое можно использовать как в светлое время суток, так и в темных помещениях. Одностороннее естественное освещение является предпочтительным для лабораторий. Однако при работе с компьютерными экранами следует учитывать, что прямые солнечные лучи и отраженный свет могут вызывать усталость глаз и ухудшить зрение. По возможности рекомендуется располагать экраны компьютеров напротив окна или под углом к нему для минимизации воздействия естественного излучения. В лабораториях стены окрашены в светло-бежевые цвета с высокой отражательной способностью для обеспечения равномерного распределения света.

Люминесцентные лампы G13 устанавливаются в лаборатории, они используются в качестве искусственных источников света с более рассеянным светом, чем точечные источники, такие как лампы накаливания и другие подобные лампы. G13 характеризуются высокой светоотдачей, длительным сроком службы (около 10 лет) и спектральным составом излучаемого света, близким к естественному.

Для обеспечения соответствия системы освещения требованиям СНиП 23-05-95 освещенность рассчитывается точечным методом. Этот метод позволяет рассчитать точные значения освещенности в различных точках в рабочей зоне, что позволяет контролировать и регулировать уровень освещенности, уровень зависит от задач, выполняемых на рабочем месте.

Освещенность рабочего места (E) определяется уравнением:

$$E = \frac{F \cdot t \cdot e \cdot p \cdot Y}{1000 \cdot K_3 \cdot h} \quad (58)$$

где F – световой поток светильника, лм;

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

					ПГУ 2. 11.03.04. 001 ПЗ	Лист
						44
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата		

$e = e_1 + e_2 + \dots + e_i$ – 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 загрязнение светильников и износ источников света (1,2 – 2);

h – высота подвеса светильника над расчетной поверхностью, м.

Лаборатория имеет длину 8,8 м, ширину 5,6 м и высоту 3,3 м и оснащена девятью источниками света. Каждый светильник оснащен двумя люминесцентными лампами G13 со световым потоком 1350 лм, следовательно $F = 2 \cdot 1350 = 2700$ лм. Расположение ламп в помещении показано на рисунке 14.

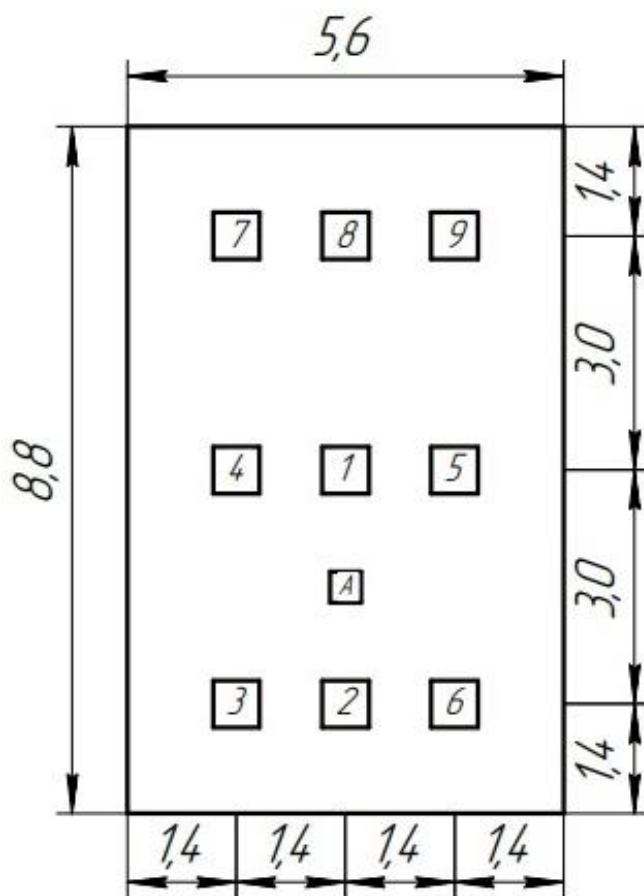


Рисунок 16 – Расположение светильников в научно-исследовательской лаборатории

Коэффициент $m = 1,2$ для люминесцентных ламп учитывает отраженную составляющую света и влияние удаленных светильников. Поскольку лаборатория является помещением с низким уровнем запыленности, коэффициент безопасности светильника для люминесцентных ламп составляет $K_3 = 1,2$. Поверхность, на которую должен падать свет, находится на высоте $0,7$ м от пола, поэтому высота ламп, подвешенных над рабочей поверхностью, составляет: $h = 3,3 \text{ м} - 0,7 \text{ м} = 2,6 \text{ м}$

Контрольная освещенность, получаемая при установке ламп мощностью 1000 люкс, может быть определена по следующей формуле:

$$e_i = \frac{I_\alpha \cos^3 \alpha_i}{h^2}, \quad (59)$$

где I_α – сила света по направлению к точке;

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

$$\alpha_i = \arctg\left(\frac{d_i}{h}\right), \quad (60)$$

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

$$d_1 = d_2 = \sqrt{1,5^2 + 1^2} = 1,8 \text{ м}, \quad (61)$$

$$d_3 = d_4 = d_5 = d_6 = \sqrt{1,5^2 + 1,4^2} = 2,05 \text{ м}, \quad (62)$$

$$d_7 = d_9 = \sqrt{4,5^2 + 1,4^2} = 4,71 \text{ м}, \quad (63)$$

$$d_8 = \sqrt{4,5^2 + 1^2} = 4,61 \text{ м}, \quad (64)$$

Определим α_i :

$$\alpha_1 = \alpha_2 = \arctg\left(\frac{1,8}{2,6}\right) = 34^\circ, \quad (65)$$

$$\alpha_3 = \alpha_4 = \alpha_5 = \alpha_6 = \arctg\left(\frac{2,05}{2,6}\right) = 38^\circ, \quad (66)$$

$$\alpha_7 = \alpha_9 = \arctg\left(\frac{4,71}{2,6}\right) = 61^\circ, \quad (67)$$

$$\alpha_8 = \arctg\left(\frac{4,61}{2,6}\right) = 60^\circ. \quad (68)$$

Определим e :

$$I_1=I_2=132 \text{ кД}, \quad (69)$$

$$I_3=I_4=I_5=I_6=93 \text{ кД}, \quad (70)$$

$$I_7=I_9=65 \text{ кД}, \quad (71)$$

$$I_8=80 \text{ кД}, \quad (72)$$

$$e_1 = e_2 = \frac{132 \text{ кД} \cos^3 34^\circ}{(2,6 \text{ м})^2} = 11,1 \text{ лк}, \quad (73)$$

$$e_3 = e_4 = e_5 = e_6 = \frac{93 \text{ кД} \cos^3 38^\circ}{(2,6 \text{ м})^2} = 6,7 \text{ лк}, \quad (74)$$

$$e_7 = e_9 = \frac{65 \text{ кД} \cos^3 61^\circ}{(2,6 \text{ м})^2} = 1,6 \text{ лк}, \quad (75)$$

$$e_8 = \frac{80 \text{ кД} \cos^3 60^\circ}{(2,6 \text{ м})^2} = 1,7 \text{ лк}. \quad (76)$$

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

$$e = e_1 + e_2 + e_3 + e_4 + e_5 + e_6 + e_7 + e_8 + e_9 = 53,9 \text{ лк} \quad (77)$$

Рассчитаем Y_i , по выражению:

$$Y_i = \cos\theta + \frac{d_i}{h} \sin\theta, \quad (78)$$

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

$$Y_1 = Y_2 = 0,7, \quad (79)$$

$$Y_3 = Y_4 = Y_5 = Y_6 = 0,8, \quad (80)$$

$$Y_7 = Y_9 = 1,8, \quad (81)$$

$$Y_8 = 1,7. \quad (82)$$

$$Y = Y_1 + Y_2 + Y_3 + Y_4 + Y_5 + Y_6 + Y_7 + Y_8 + Y_9 = 9,9 \quad (83)$$

С учетом всего выше изложенного, рассчитаем освещенность рабочего места инженера исследователя по выражению (57):

					ПГУ 2. 11.03.04. 001 ПЗ	Лист
						47
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата		

$$E = \frac{2700 \cdot 1,1 \cdot 53,9 \cdot 1 \cdot 9,9}{1000 \cdot 1,5 \cdot 2,6} = 406 \text{лк} \quad (84)$$

Результаты расчетов показывают, что система освещения в лаборатории соответствует требованиям безопасности и комфорта на рабочем месте согласно СНиП 23-05-95. Анализ, проведенный на основе расчетов, позволяет сделать вывод, что условия труда в данном помещении соответствуют требованиям ГОСТ 12.1.003-83 и СНиП 23-05-95 для данного типа помещений. Помещение, в котором проводились работы, не относится к помещениям с высоким риском поражения электрическим током. Оборудование в этом помещении находится под напряжением от сети переменного тока промышленной частотой 50 Гц и напряжением 220 В. Приняты меры пожарной безопасности в соответствии с требованиями ГОСТ 12.1.004-91. К ним относятся выключатели прямого доступа, огнетушители ОХП-10 и ОХПВ-10 и аварийные выходы для быстрой эвакуации в случае пожара.

					ПГУ 2. 11.03.04. 001 ПЗ	Лист
						48
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата		

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Многокомпонентные наноструктуры могут принимать совершенно причудливые формы шариков, гантель, стержней и тетраподов. Эти формы зависят от поверхностной энергии, рассогласования решеток и условий реакции синтеза. Использование в качестве центров кристаллизации анизотропные структуры на основе тетраподов и стержней позволяет доращивать их другими аналогичными структурами и получать наночастицы совершенно новых типов с разнообразными разветвленными формами. Для кристаллов самых малых размеров кристаллографические грани оказываются на поверхности, и количество атомов поверхности начинает превышать число атомов объема частицы. Поэтому вклад поверхностных атомов и, в частности, граней в общую энергию НК оказывается весьма существенным. Обычно в процессе синтеза нанокристаллов происходит уменьшение площади, и, следовательно, энергии поверхности, что приводит к образованию почти сферических наночастиц.

Таким образом, в работе рассмотрена теоретическая модель влияния поверхностных свойств квантовых точек на характеристики солнечных элементов, построенные на их основе. Для этого предложены модели одиночной КТ сферической формы радиусом r , кубической и тетраподной формы со стороной a .

Показано, что реальная форма КТ при одном и том же размере будет различно влиять на электрофизические и оптические свойства, что наряду с материалом и размером может рассматриваться как эффективный фактор управления.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. *Ekimov A.I. and Onushchenko A.A. Quantum size effect in three-dimensional microscopic semiconductor crystals. JETP Lett. 1981; 34 345–349.*
2. *Brus L. E. Electronic wave functions in semiconductor clusters: experiment and theory. J. Phys. Chem. 1986; 90 2555-2560.*
3. *Reed M.A., Randall J.N., Aggarwal R.J., Matyi R.J., Moore T.M., and Wetsel A.E. Observation of discrete electronic states in a zero-dimensional semiconductor nanostructure. Phys Rev Lett. 1988; 60 (6) 535–537.*
4. *Smith A.R., Chao K.-J., Niu Q., and Shih C.-K. Formation of atomically flat silver film on GaAs with a 'silver-mean' quasiperiodicity. Science 1996; 273 226-228.*
5. *Schaller R.D., and Klimov V.I. High Efficiency Carrier Multiplication in PbSe Nanocrystals: Implications for Solar Energy Conversion. Phys. Rev. Letts 2004; 92 186601-186614.*
6. *Schaller R.D., Sykora M., Pietryga J.M., and Klimov V.I. Seven Excitons at a Cost of One: Redefining the Limits for Conversion Efficiency of Photons into Charge Carriers. Nano Letters 2006; 6 424-429.*
7. *Saleh, B., and Teich, M. Fundamentals of Photonics, ch.15. John Wiley & Sons, Inc. ISBNs: 0-471-83965-5 1991.*
8. *Sargent E.H. Infrared Quantum Dots. Adv. Mat. 2005; 17 515-522.*
9. *Jasim, K.E. Dye Sensitized Solar Cells-Working Principles, Challenges and Opportunities. In: Solar Cells-Dye-Sensitized Devices, Leonid A. Kosyachenko, (Ed),, Book Published by InTech Open Access Publisher, ISBN 978-953-307-735-2. 2011. Chapter 8, pp. 171-204.*
10. *Gaponenko S.V. Strong Confinement Approximation in Optical Properties of Semiconductor Nanocrystals. New York: Cambridge University Press; 1998.*
11. *Nozik, A.J. Quantum dot solar cells. Physica E 2002;14 115-120.*
12. *Nozik A.J. Multiple exciton generation in semiconductor quantum dots. Chemical Physics Letters 2008; 457 3-11.*
13. *Nozik A.J. Nanoscience and Nanostructures for Photovoltaics and Solar Fuels. Nano Lett. 2010; 10 2735-2741.*

14. 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.
15. Kamat P.V. Quantum Dot Solar Cells. Semiconductor Nanocrystals as Light Harvesters. *J. Phys. Chem. C* 2008; 112 18737-18753.
16. Sheeney-Haj-Kia L., Basnar B., Willner I. Efficient Generation of Photocurrents by using CdS/Carbon nanotube Assemblies on Electrodes. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2005; 44 78-83.
17. 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 Санкт-Петербург 2014
18. Pattantyus-Abraham A.G., Kramer I.J., Barkhouse A.R., Wang X., Konstantatos G., Debnath R., Levina L., Raabe I., Nazeeruddin M.K., Gratzel M., and Sargent E.H. Depleted-Heterojunction Colloidal Quantum Dot Solar Cells. *ACSNano* 4 (6) 3374–3380.
19. Luther J.M., Law M. et al. Structural, Optical, and Electrical Properties of Self-Assembled Films of PbSe Nanocrystals Treated with 1,2-Ethanedithiol. *ACS Nano*. 2008; 2 271.
20. Luther M., Gao J., Lloyd M.T., Semonin O.E., Beard M.C., and Nozik A.J. Stability... solar cell. *Advanced Materials* 2010; 22 (33) 3704–3707.
21. Jasim K. E. Quantum dots solar cells //Solar cells-new approaches and reviews. – 2015. – Т. 1.
22. Ikeri H. I., Onyia A. I., Adokor V. M. Theoretical Models and Technologies for Quantum Dots Based Third Generation Solar Cells
23. Huang Q., and Gao L. Synthesis and Characterization of CdS/multiwalled carbon nanotube heterojunctions. *Nanotechnol* 2004; 15 1855-1860.
24. 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.

25. Bang J. H., Kamat P. V. CdSe quantum dot–fullerene hybrid nanocomposite for solar energy conversion: electron transfer and photoelectrochemistry //ACS nano. – 2011. – T. 5. – №. 12. – С. 9421-9427.
26. Lee H. J. et al. CdSe quantum dot-sensitized solar cells exceeding efficiency 1% at full-sun intensity //The Journal of Physical Chemistry C. – 2008. – T. 112. – №. 30. – С. 11600-11608.
27. Farrow B., Kamat P. V. CdSe quantum dot sensitized solar cells. Shuttling electrons through stacked carbon nanocups //Journal of the American Chemical Society. – 2009. – T. 131. – №. 31. – С. 11124-11131.
28. Kondrotas R. et al. Low-dimensional materials for photovoltaic application //Journal of Semiconductors. – 2021. – T. 42. – №. 3. – С. 031701.
29. Green M. A. Prospects for photovoltaic efficiency enhancement using low-dimensional structures //Nanotechnology. – 2000. – T. 11. – №. 4. – С. 401.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

(обязательное)

Задание на выпускную квалификационную работу

					ПГУ 2. 11.03.04. 001 ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата		53

«Утверждаю»

Зав. кафедрой НимЭ

Пронин И.А.

(фамилия, инициалы)

«05» июня 2024 г.

З А Д А Н И Е
на бакалаврскую работу

1. Студент(ка) гр. 20ПД1 факультета информационных технологий и электроники

Направление подготовки 11.03.04. «Электроника и наноэлектроника»

Профиль Микроэлектроника и твердотельная электроника

Винокуров Николай Сергеевич

(фамилия, имя, отчество)

2. Руководитель Игошина Светлана Евгеньевна

(фамилия, имя, отчество)

3. Тема бакалаврской работы Теоретическое изучение влияния формы
квантовых точек на характеристики солнечных элементов

Тема утверждена приказом ПГУ № 396а/о от «17» 04 2024 г.

4. Техническое задание на бакалаврскую работу (вид работы: разработка, проектирование, исследование, и т.д.; назначение; основные параметры; условия функционирования и т.д.)

4.1. Анализ литературных источников с целью изучения физико-химических свойств
выбранных в качестве объектов исследования полупроводниковых квантовых точек
сферической, кубической, цилиндрической, тетраэдральной формы;

4.2 Анализ методов исследования электронной структуры и физических процессов в
полупроводниковых квантовых точках различной геометрической формы;

4.3. Исследование влияния поверхностной плотности квантовых точек, определяемой
геометрическими размерами отдельной квантовой точки, на эффективность
преобразования солнечного элемента.

Объект исследований: Квантовые точки на основе селенида кадмия CdSe

5. Объем и содержание основной части бакалаврской работы

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

1. Квантовые точки в солнечных элементах

1.1 Теоретические сведения о квантовых точках

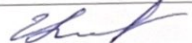
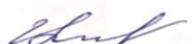
1.2 История квантовых точек

1.3 Физика квантовых точек

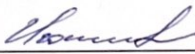
1.4 Солнечные элементы на основе квантовых точек

1.5 Гибридные солнечные элементы на основе кремния	
2. Квантование энергетического спектра носителей заряда в квантовых точках	
2.1 Модель прямоугольной потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками	
2.2 Модель цилиндрической квантовой ямы	
2.3 Модель сферической потенциальной ямы	
3. Моделирование характеристик солнечных элементов с КТ в зависимости от формы КТ	
3.1 Квантовые точки селенида кадмия	
3.2 Энергетические спектры квантовых точек селенида кадмия	
3.3 Моделирование влияния поверхностных свойств КТ на электрофизические свойства нанокристаллов	
5.2. Иллюстративная часть (перечень и содержание чертежей и слайдов презентации)	
1. Титульный слайд	Слайд 1
2. Актуальность работы, цели, задачи	Слайд 2,3
3. Полупроводниковые нанокристаллы различной геометрии на основе CdSe	Слайд 4
4. Спектры фотолюминисценции КТ CdSe	Слайд 5
5. Математические модели квантовых точек	Слайд 6,7,8
6. Анализ величины поверхностной плотности квантовых точек различной формы, определяемой геометрическими размерами отдельной квантовой точки CdSe	Слайд 9,10,11,12
7. Сравнительный анализ зависимости площади поверхности нанокристаллов различной формы от его единицы объема	Слайд 13
8. Представление результатов и выводы	Слайд 14,15
6. Консультанты и содержание дополнительных разделов	
6.1. Анализ влияния освещенности научно-исследовательской лаборатории на работу инженера-исследователя	
Консультант _____	

7. Календарный график по выполнению бакалаврской работы

Наименование этапов работы	Объем работы	Срок выполнения	Подпись руководителя, консультанта
Квантовые точки в солнечных элементах	20%	5.06	
Квантование энергетического спектра носителей заряда в квантовых точках	16%	6.06	
Моделирование характеристик солнечных элементов с КТ в зависимости от формы КТ	20%	6.06	
Анализ влияния освещенности научно-исследовательской лаборатории на работу инженера-исследователя	20%	7.06	
Иллюстративная часть	12%	8.06	
Оформление пояснительной записки	12%	8.06	

Руководитель бакалаврской работы


подпись

Игошина С.Е.

фамилия, инициалы

Дата выдачи задания

«05» июня 2024 г.

Задание к исполнению принял


подпись

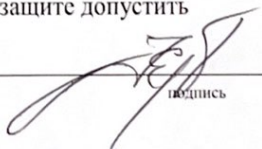
Винокуров Н.С.

фамилия, инициалы

«05» июня 2024 г.

Бакалаврскую работу к защите допустить

Декан факультета


подпись

Кревчик В.Д.

фамилия, инициалы

«14» июня 2024 г.

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

(обязательное)

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

					ПГУ 2. 11.03.04. 001 ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата		54

Ректору Пензенского
государственного университета
А. Д. Гулякову
студента 4 курса
очной формы обучения
Винокурова Николая Сергеевича

ЗАЯВЛЕНИЕ

Я, Винокуров Николай Сергеевич, студент 4 курса очной формы обучения направления подготовки 11.03.04 Электроника и наноэлектроника, профиль «Микроэлектроника и твердотельная электроника», прошу провести проверку с использованием системы «Антиплагиат ВУЗ» выпускной квалификационной работы на тему « Теоретическое изучение влияния формы квантовых точек на характеристики солнечных элементов», 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.

Студент Вин Винокуров Н.С.

ВКР представлена на проверку 10.06.24

Руководитель ВКР Игошина Игошина С.Е.

Протокол

проверки на оригинальность в системе «Антиплагиат.ВУЗ» выпускной
бакалаврской работы на тему «Теоретическое изучение влияния формы
квантовых точек на характеристики солнечных элементов»
студента 4 курса Винокурова Николая Сергеевича
направления подготовки 11.03.04 «Электроника и нанoeлектроника»,
профиль «Микроэлектроника и твердотельная электроника»
Руководитель ВКР Игошина Светлана Евгеньевна



СПРАВКА

Пензенский государственный университет

о результатах проверки текстового документа
на наличие заимствований

ПРОВЕРКА ВЫПОЛНЕНА В СИСТЕМЕ АНТИПЛАГИАТ.ВУЗ

Автор работы: Винокуров Николай Сергеевич
Самоцитирование
рассчитано для: Винокуров Николай Сергеевич
Название работы: Теоретическое изучение влияния формы квантовых точек на характеристики солнечных элементов
Тип работы: Выпускная квалификационная работа
Подразделение: Кафедра 'Нано- и микроэлектроника'

РЕЗУЛЬТАТЫ

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

СОВПАДЕНИЯ	<div></div>	37.78%	СОВПАДЕНИЯ	<div></div>	37.78%
ОРИГИНАЛЬНОСТЬ	<div></div>	55.74%	ОРИГИНАЛЬНОСТЬ	<div></div>	55.74%
ЦИТИРОВАНИЯ	<div></div>	6.48%	ЦИТИРОВАНИЯ	<div></div>	6.48%
САМОЦИТИРОВАНИЯ	<div></div>	0%	САМОЦИТИРОВАНИЯ	<div></div>	0%

ДАТА ПОСЛЕДНЕЙ ПРОВЕРКИ: 10.06.2024

ДАТА И ВРЕМЯ КОРРЕКТИРОВКИ: 10.06.2024 15:21

« 10 » 06 2024 год

подпись

Игошина С.Е.
фамилия, инициалы



АНТИПЛАГИАТ
ОБНАРУЖЕНИЕ ЗАИМСТВОВАНИЙ

СПРАВКА

Пензенский государственный университет

о результатах проверки текстового документа
на наличие заимствований

ПРОВЕРКА ВЫПОЛНЕНА В СИСТЕМЕ АНТИПЛАГИАТ.ВУЗ

Автор работы: Винокуров Николай Сергеевич
Самоцитирование
рассчитано для: Винокуров Николай Сергеевич
Название работы: Теоретическое изучение влияния формы квантовых точек на характеристики солнечных элементов
Тип работы: Выпускная квалификационная работа
Подразделение: Кафедра "Нано- и микроэлектроника"

РЕЗУЛЬТАТЫ

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

СОВПАДЕНИЯ	37.78%	СОВПАДЕНИЯ	37.78%
ОРИГИНАЛЬНОСТЬ	55.74%	ОРИГИНАЛЬНОСТЬ	55.74%
ЦИТИРОВАНИЯ	6.48%	ЦИТИРОВАНИЯ	6.48%
САМОЦИТИРОВАНИЯ	0%	САМОЦИТИРОВАНИЯ	0%

ДАТА ПОСЛЕДНЕЙ ПРОВЕРКИ: 10.06.2024

ДАТА И ВРЕМЯ КОРРЕКТИРОВКИ: 10.06.2024 15:21

Структура документа: Проверенные разделы: библиография с.47-50, титульный лист с.1, содержание с.2, 6, основная часть с.3-5, 7-47
Модули поиска: Цитирование; Переводные заимствования*; Библиография; ИПС Адилет; Шаблонные фразы; Коллекция НБУ; СПС ГАРАНТ: нормативно-правовая документация; Диссертации НББ; Перефразирования по Интернету (EN); IEEE; Перефразирования по коллекции IEEE; Переводные заимствования по коллекции Гарант: аналитика; Медицина; Публикации eLIBRARY; СПС ГАРАНТ: аналитика; Переводные заимствования (RuEn); Кольцо вузов; Перефразирования по Интернету; Патенты СССР, РФ, СНГ; Публикации РГБ; Публикации eLIBRARY (переводы и перефразирования); СМИ России и СНГ; Сводная коллекция ЭБС; Переводные заимствования по Интернету (EnRu); Перефразирования по СПС ГАРАНТ: аналитика; Перефразированные заимствования по коллекции Интернет в русском сегменте; Публикации РГБ (переводы и перефразирования);

Работу проверил: Головяшкин Алексей Николаевич

ФИО проверяющего

Дата подписи: 10.06.24

Подпись проверяющего



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

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

ПРИЛОЖЕНИЕ В
(обязательное)
Презентация ВКР

					ПГУ 2. 11.03.04. 001 ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата		55



Теоретическое изучение влияния формы
квантовых точек на характеристики солнечных
элементов

Выполнил: студент гр. 20ПД1

Винокуров Н.С.

Руководитель: доцент, к.ф.-м.н.

Игошина С.Е.

Актуальность работы

Преобразование солнечной энергии в электрическую является одной из самых перспективных областей применения КТ, чем обусловлена важность исследования свойств квантовых точек на основе полупроводниковых соединений в зависимости от их геометрической формы, определяющей площадь поверхности и объем.

Большая площадь поверхности на единицу объема, обеспечиваемая квантовой точкой, имеет значительное преимущество как для поглощения света, так и для разделения зарядов, которые являются двумя важнейшими этапами преобразования солнечной энергии в электрическую.

Постановка задачи

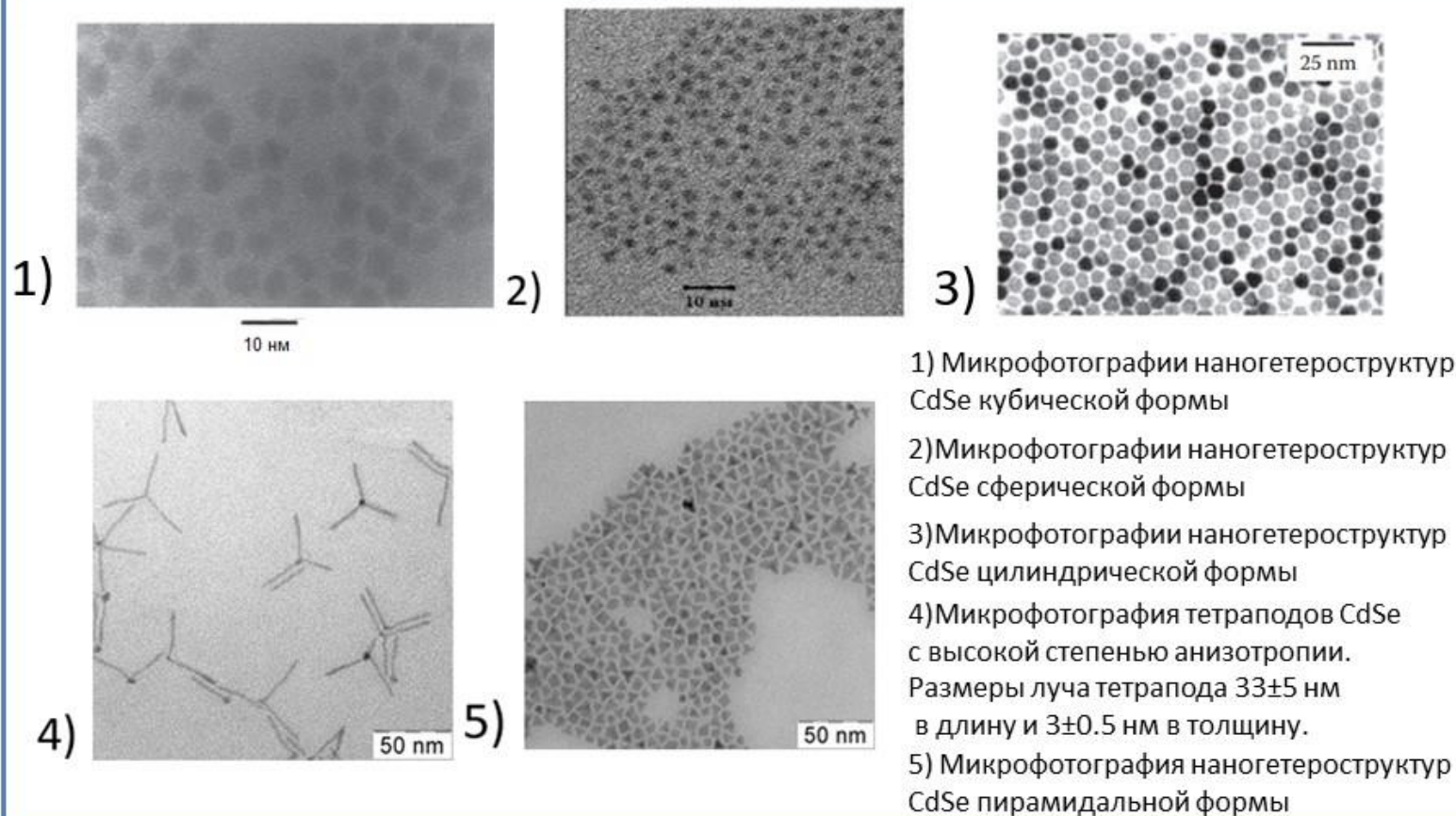
- Объект исследования:

Квантовые точки на основе селенида кадмия (CdSe)

- Цель работы:

Теоретическое исследование влияния геометрических размеров квантовых точек CdSe и, тем самым, удельной поверхности КТ, которая играет важную роль в определении величины площади поглощения фотоэлемента, на фотофизические свойства солнечных элементов.

Возможные формы квантовых точек CdSe



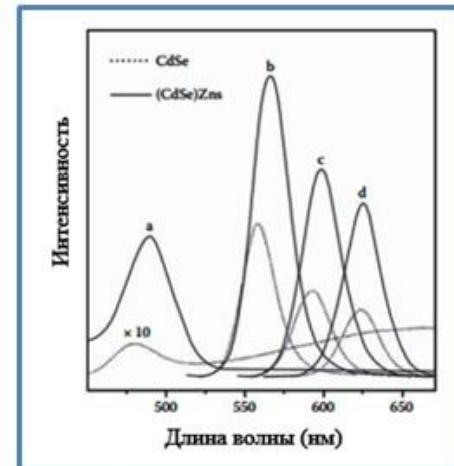
Reprinted with permission from Dabbousi, B. O., J. Rodriguez-Viejo, F. V. Mikulec, J. R. Heine, H. Mattoussi, R. Ober, K. F. Jensen, and M. G. Bawendi, *J. Phys. Chem. B*, 101, 9463, 1997

Спектры фотолюминесценции КТ CdSe

- Спектры фотолюминесценции могут быть использованы для определения механизмов возбуждения и рекомбинации неравновесных носителей заряда в КТ и влияния на них размерного квантования. Пик фотолюминесценции обычно больше в нанокристаллах меньшего размера (с большей относительной площадью поверхности), чем в более крупных наночастицах.

Размер нанокристаллов составляет:

- a) 2,3 нм
- b) 4,2 нм
- c) 4,8 нм
- d) 5,5 нм



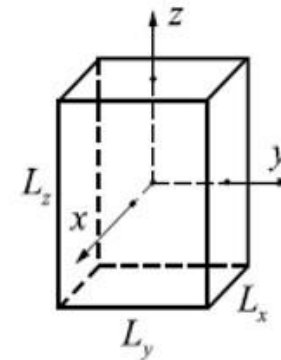
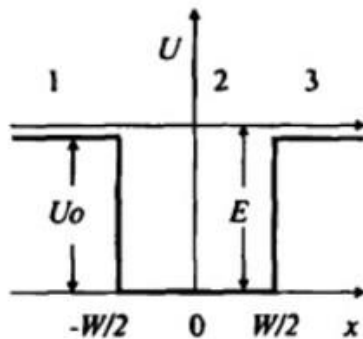
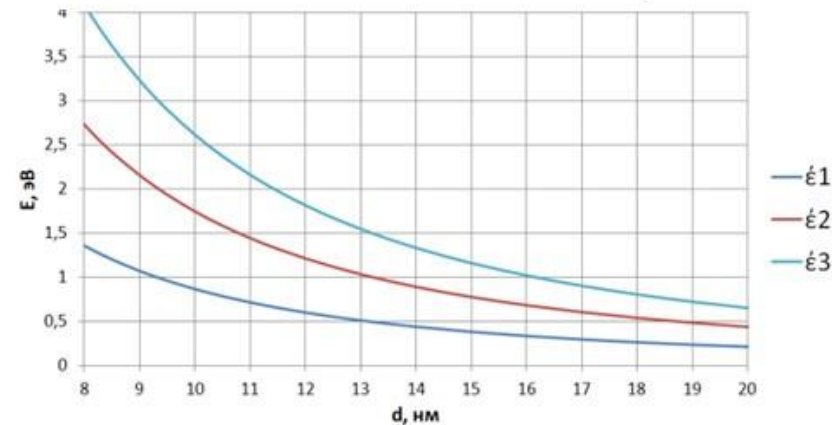
Для данного объема материала, состоящего из более мелких частиц, площадь поверхности материала увеличивается и, таким образом, он имеет относительно большую площадь поверхности по сравнению с тем же объемом материала, состоящего из более крупных частиц.

Модель прямоугольной потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками

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

$$\psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}} \sin\left(\frac{\pi n_x}{L_x} x\right) \sin\left(\frac{\pi n_y}{L_y} y\right) \sin\left(\frac{\pi n_z}{L_z} z\right)$$

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \pi^2 \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right)$$



- В.П. Драгунов, И.Г. Неизвестный, В.А. Гридчин. *Основы наноэлектроники* (М., Логос, 2006).

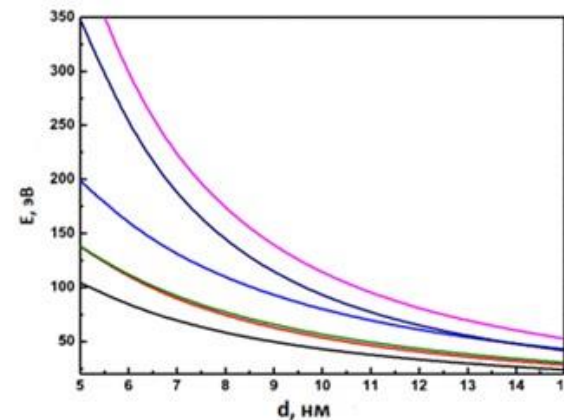
Модель цилиндрической симметричной потенциальной ямы

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \frac{\rho}{m(\rho)} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) f(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})f(\mathbf{r}) = E f(\mathbf{r})$$

$$U(\mathbf{r}) = U(\rho) = \begin{cases} 0, & 0 \leq \rho \leq R, \\ W, & \rho > R, \end{cases}$$

$$\psi_{nlm}(\rho, \varphi, z) = \sqrt{\frac{2}{\pi \hbar \rho_0^2}} \frac{J_l(\zeta_{nl} \rho / \rho_0)}{J_{l+1}(\zeta_{nl})} \sin\left(\frac{\pi m}{h} z\right) e^{il\varphi}$$

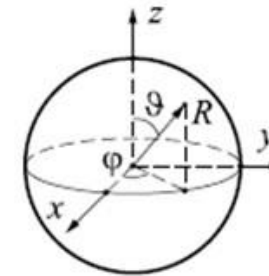
$$E_{nlm} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\zeta_{nl}^2}{\rho_0^2} + \frac{\pi^2 m^2}{h^2} \right)$$



- В.П. Драгунов, И.Г. Неизвестный, В.А. Гридчин. *Основы наноэлектроники* (М., Логос, 2006).

Модель сферически симметричной потенциальной ямы

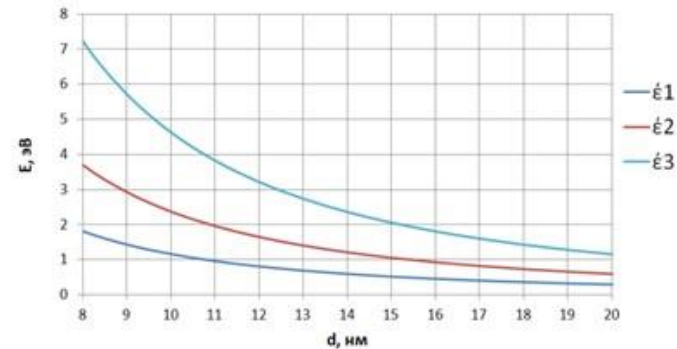
$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right)\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad V(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0, & \mathbf{r} \in \text{QD}, \\ \infty, & \mathbf{r} \notin \text{QD}. \end{cases}$$



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

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

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



В.П. Драгунов, И.Г. Неизвестный, В.А. Гридчин. *Основы наноэлектроники* (М., Логос, 2006).

Моделирование изменения удельной поверхности КТ при различных размерах квантовых точек сферической формы

Площадь поверхности сферы:

$$S = 4 \cdot \pi \cdot r^2$$

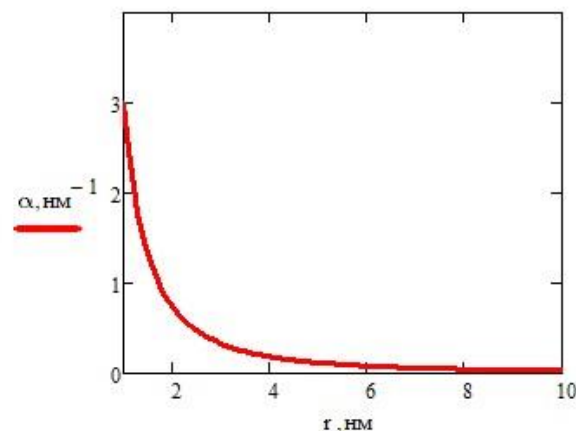
где r – радиус сферы

Объем сферы определяется как:

$$V = \frac{4}{3} \cdot \pi \cdot r^3$$

Отношение площади поверхности к объему:

$$\alpha = \frac{4 \cdot \pi \cdot r^2}{\frac{4}{3} \cdot \pi \cdot r^3} = \frac{3}{r}$$



где α – отношение площади поверхности к объему (нм^{-1})
 r – радиус сферы (нм)

Моделирование изменения удельной поверхности КТ при различных размерах квантовых точек кубической формы

Площадь поверхности куба:

$$S = 6 \cdot L^2$$

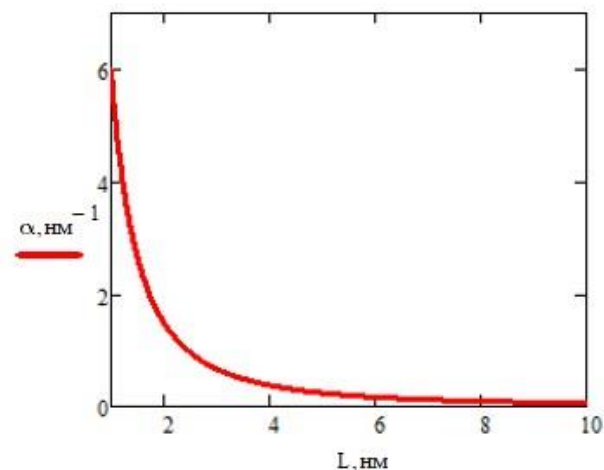
где L – длина стороны куба

Объем куба определяется как:

$$V = L^3$$

Отношение площади поверхности к объему:

$$\alpha = \frac{6 \cdot L^2}{L^3}$$



где α – отношение площади поверхности к объему (нм⁻¹)
 L – ребро куба (нм)

Моделирование изменения удельной поверхности КТ при различных размерах квантовых точек цилиндрической формы

Площадь поверхности цилиндра:

$$S = 2 \cdot \pi \cdot r(r + h)$$

где r – радиус цилиндра

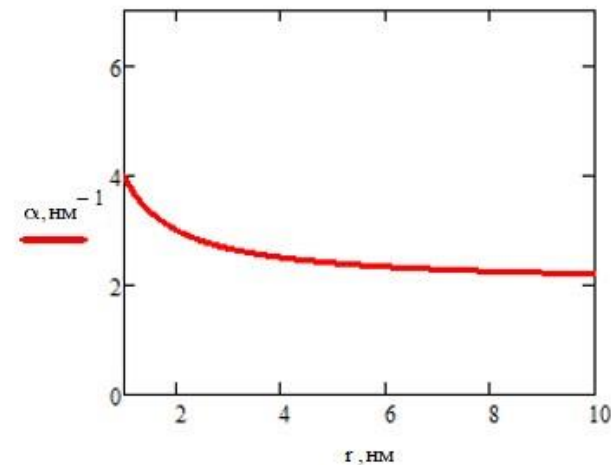
h – высота цилиндра

Объем куба определяется как:

$$V = \pi \cdot r^2 \cdot h$$

Отношение площади поверхности к объему:

$$\alpha = \frac{2 \cdot \pi \cdot r(r + h)}{\pi \cdot r^2 \cdot h} = \frac{2 \cdot r + 2 \cdot h}{r \cdot h}$$



где α – отношение площади поверхности к объему (nm^{-1})

r – радиус цилиндра (nm)

Моделирование изменения удельной поверхности КТ при различных размерах квантовых точек в форме тетраэдра

Площадь поверхности тетраэдра:

$$S = \sqrt{3} \cdot L^2$$

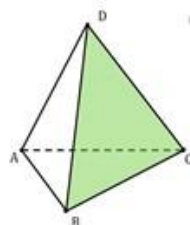
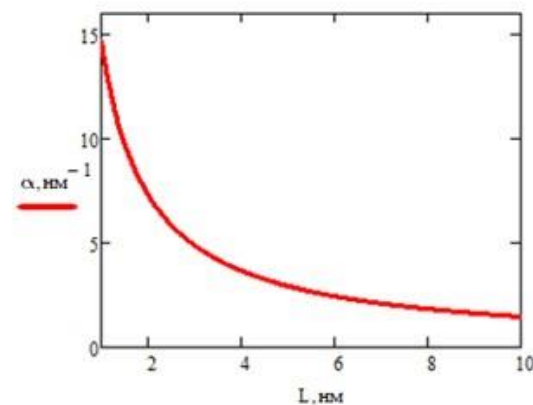
где L – ребро тетраэдра

Объем тетраэдра определяется как:

$$V = \frac{L^3 \cdot \sqrt{2}}{12}$$

Отношение площади поверхности к объему:

$$\alpha = \frac{6 \cdot L^2}{L^3}$$



где α – отношение площади поверхности к объему (нм^{-1})
 L – ребро тетраэдра (нм)

Сравнительный анализ изменения удельной поверхности КТ , занимаемой квантовыми точками различной геометрической формы

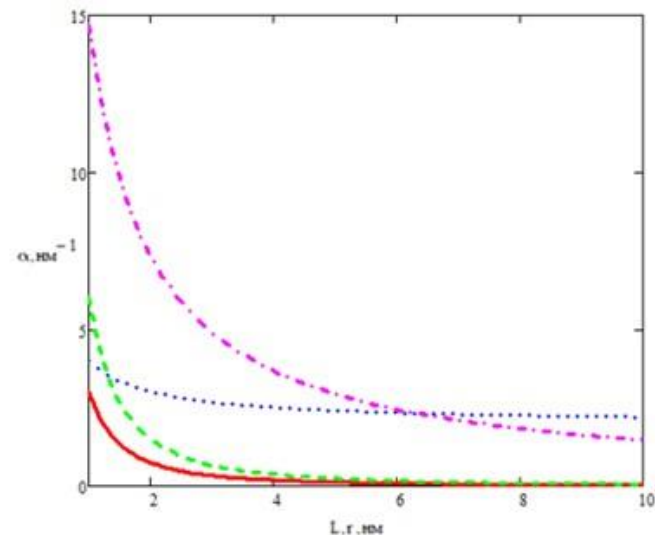
На данном графике видно, что при сравнении квантовых точек разной формы площадь поверхности уменьшается для КТ близким к сферической форме, а отношение площади поверхности к объему уменьшается с увеличением объема.

- 1) Сферическая форма —
- 2) Цилиндрическая форма
- 3) Кубическая форма - - -
- 4) Тетраэдральная форма - . -

где α – отношение площади
поверхности к объему (нм^{-1})

L – длина ребра (нм)

r – радиус (нм)



Представление результатов

Большая площадь поверхности на единицу объема, обеспечиваемая квантовыми точками, имеет значительное преимущество для поглощения света и разделения зарядов - двух важных этапов преобразования солнечной энергии в электрическую энергию.

Выводы

- Рассмотрены математические модели КТ различной геометрии
- Рассмотрена теоретическая модель для изучения влияния на свойства квантовых точек их формы при одинаковом объеме.
- Показано, что отношение площади поверхности к объему масштабируется согласно обратному степенному закону, это означает что отношение площади поверхности к объему увеличивается с уменьшением размера частицы и наоборот.

Спасибо за внимание!