

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное бюджетное учреждение
высшего образования
«ПЕНЗЕНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

ОТЗЫВ
на бакалаврскую работу студента

Барабанова Кирилла Сергеевича
(Фамилия, имя и отчество)

Тема бакалаврской работы Барабанова Кирилла Сергеевича: Теоретическое исследование влияния формы квантовых точек антимонида индия на их электрофизические свойства. Работа посвящена постановке задачи расчета волновых функций и энергетического спектра в квантовой точке антимонида индия, а также изучение влияния температуры на их энергетический спектр.

Актуальность выполненной работы обусловлена перспективами использования наноструктурированных материалов InSb для создания устройств нано- и микроэлектроники нового поколения с заранее заданными параметрами. Проведенные исследования могут найти применение при разработке технологии получения наноструктурированных материалов с заранее заданными свойствами, т.к. реальная форма квантовых точек (шаровая и кубическая модели) при одном и том же характерном размере будет заметно влиять на энергетический спектр рассматриваемых объектов.

При работе над выпускной квалификационной работой Барабанов К.С. показал удовлетворительное знание предмета, умение пользоваться научно-технической литературой, проявил самостоятельность при решении конкретных научно-исследовательских задач. Барабанов К.С. изучил особенности квантовых состояний частиц в системах пониженной размерности и особенности квантования энергетического спектра носителей заряда в квантовых точках на основе антимонида индия сопоставление размеров частиц, полученных при анализе спектра поглощения КТ InSb с использованием различных предельных моделей: куб и шар.

Полученные знания он затем применил на практике для теоретического определения размеров квантовой точки в рамках кубической модели. Расчетно-пояснительная записка выполнена в соответствии с техническим заданием и требованиями к бакалаврской работе.

ВКР выполнена грамотно, в соответствии с техническим заданием и заслуживает оценки “хорошо”, а Барабанов К.С. квалификации бакалавра по направлению «Электроника и нанoeлектроника»

Руководитель

к. ф. – м. н., доцент кафедры «НиМЭ»



С.Е.Игошина

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

Факультет информационных
технологий и электроники
наименование факультета

Направление подготовки

Профиль

Кафедра

Нано – и микроэлектроника
наименование кафедры

11.03.04. Электроника
и наноэлектроника
код и наименование

«Микроэлектроника
и твердотельная электроника»
наименование профиля

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

ПензГУ02. 11.03.04. 001ПЗ
обозначение, присваиваемое кафедрой

на тему

Теоретическое исследование влияния формы квантовых точек антимолибдита индия
на их электрофизические свойства
тема бакалаврской работы

Студент группы 22ПД1
номер группы

Бар - 16.06.26
подпись, дата

Барабанов К.С.
фамилия, иниц.

Руководитель доцент каф. НМЭЭ
должность наименование организации

Игошина С.Е.
подпись, дата

Игошина С.Е.
фамилия, иниц.

Нормоконтролер ст. преподаватель
должность

Ры - 16.06.2026
подпись, дата

Рыжова Т.Н.
фамилия, иниц.

Работа допущена к защите в ГЭК (протокол заседания кафедры от 10.06.26 № 10)

Заведующий кафедрой

16.06.26
подпись, дата

Пронин И.А.
фамилия, иниц.

Работа защищена с оценкой удовл. (протокол ГЭК от 18.06.26 № 4)

Секретарь ГЭК

18.06.26
подпись, дата

Вольсков А.А.
фамилия, иниц.

РЕФЕРАТ

Пояснительная записка состоит из 85 страниц, 28 рисунков, 4 таблицы, списка использованных источников из 17 наименований.

Квантовые точки, антимонид индия, модели квантовых точек, сферическая квантовая точка, энергетический спектр, спектр оптического поглощения, кубическая квантовая точка.

Объектом разработки является квантовые точки антимонида индия кубической и сферической формы.

Цели разработки:

Построить теоретическую модель энергетического спектра квантовых точек антимонида индия сферической и кубической формы

Провести анализ теоретической модели энергетического спектра квантовых точек антимонида индия кубической формы в зависимости от температуры.

Показать, что реальная форма квантовых точек (шаровая и кубическая модели) при одном и том же характерном размере будет заметно влиять на энергетический спектр рассматриваемых объектов.

Проведена работа по изучению научно-технической литературы, изучена особенности квантовых состояний частиц в системах пониженной размерности и изучены особенности квантования энергетического спектра носителей заряда в квантовых точках на основе антимонида индия.

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

СОДЕРЖАНИЕ

Введение.....	3
1 Квантовые точки: специфические свойства, способы синтеза и методы исследования.....	5
1.1 Особенности энергетического спектра частиц в системах пониженной размерности.....	5
1.2 Технология получения квантовых точек.....	6
2. Квантование энергетического спектра носителей заряда в квантовых точках.....	22
2.1 Методы анализа энергетического спектра квантовых точек.....	22
2.2. Модель цилиндрической квантовой точки.....	29
2.3. Модель сферической квантовой точки.....	31
2.4. Модель треугольной квантовой точки.....	32
2.5. Модель пирамидальной квантовой точки.....	34
3 Теоретическое исследование энергетического спектра квантовых точек антимонида индия сферической и кубической формы.....	37
3.1 Анализ энергетического спектра квантовых точек антимонида индия при изменении температуры.....	37
3.2 Теоретическое сравнение энергетических спектров квантовых точек.....	43
3.3 Оценка размера КТ антимонида индия (InSb).....	45
3.4 Сравнительный анализ теоретической и экспериментальной зависимости.....	47
4 Анализ влияния освещенности научно-исследовательской лаборатории на работу инженера-исследователя.....	50
Приложение А. Задание на ВКР.....	66
Приложение Б. Заявление и протокол проверки ВКР на оригинальность в системе «Антиплагиат.ВУЗ».....	69
Приложение В. Презентация к ВКР.....	71

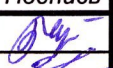
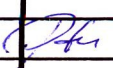
ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время тенденции развития полупроводниковой электроники таковы, что необходимо учитывать влияние особенностей геометрической формы квантовых точек на электронный энергетический спектр, включая примесные состояния. Высокая чувствительность энергии связи носителя на примеси к энергетическому спектру квантовой точки даст возможность проследить за эволюцией энергии связи носителя путем изменения геометрической формы квантовой точки InSb.

В последние годы интерес к InSb возобновился как к материалу, перспективному для нанoeлектроники и для создания транзисторов нового поколения. Активно исследуются магнетотранспортные эффекты в *p*-InSb. В 2003 году в США была принята программа *ABCS (Antimonide Based Compounds Semiconductors)*, что показывает актуальность тематики исследования полупроводниковых соединений на основе сурьмы. В 2006 году компаниями *US microchip* и *Intel* было объявлено о создании прототипа транзистора на основе InSb, обладающего рекордной производительностью энергоэффективностью при азотных температурах и выявлена также лидирующая роль InSb среди соединений типа A_3B_5 при исследовании возможности использования полупроводниковых нанопроволок в качестве рабочего материала в устройствах для термоэлектрического преобразования энергии.

Датчики инфракрасного излучения на основе антимонида индия применяются с 50-х годов прошлого века. Детекторы, в которых InSb используется в качестве рабочего вещества, получили широкое распространение в медицине, астрономии и военной отрасли. Рабочий диапазон датчиков заключен в интервале длин волн 2-7 мкм, который является одним из важнейших для большого числа фотоприемных устройств.

ПГУ 2. 11.03.04 001 ПЗ

Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата	Введение		
Разраб.		Барабанов К.С.		25.06.26			
Провер.		Игошина С.Е.		15.06.26	гр. 22ПД1		
Н. Контр.		Рыжова Т.Н.		15.06.26			
Утверд.							
					Лит.	Лист	Листов
						3	85

Рекордные значения подвижности обусловили применение InSb в приборах, основанных на гальваномагнитных эффектах. Антимонид индия используют в высокочувствительных датчиках магнитного поля, работающих на основе эффектов Холла и магнетосопротивления. Термоэлектрические свойства InSb также исследовались, но значимого применения в качестве рабочего материала в устройствах для термоэлектрического преобразования энергии InSb не нашел, так как его характеристики уступают параметрам таких термоэлектрических материалов как соединения Bi₂Te₃, PbTe или сплавы Ge-Si.

Выявлена также лидирующая роль InSb среди соединений типа A₃B₅ при исследовании возможности использования полупроводниковых нанопроволок в качестве рабочего материала в устройствах для термоэлектрического преобразования энергии.

Таким образом, актуальность работы заключается в использовании наноструктурированных материалов InSb для создания устройств нано- и микроэлектроники нового поколения с заранее заданными параметрами.

Цели работы:

Построить теоретическую модель энергетического спектра квантовых точек антимонида индия сферической и кубической формы

Провести анализ теоретической модели энергетического спектра квантовых точек антимонида индия кубической формы в зависимости от температуры.

Показать, что реальная форма квантовых точек (шаровая и кубическая модели) при одном и том же характерном размере будет заметно влиять на энергетический спектр рассматриваемых объектов

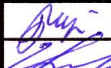
1 Квантовые точки: специфические свойства, способы синтеза и методы исследования

1.1 Особенности энергетического спектра частиц в системах пониженной размерности

Перспективы расширения применения квантовых точек в электронике связаны в первую очередь с расширением исследований в инфракрасном (ИК) и терагерцовом (ТГц) спектральных диапазонах, где требуются полупроводники с узкой запрещённой зоной. В этом отношении полупроводниковые соединения A_3B_5 представляют интерес благодаря обладанию самым широким спектром свойств, демонстрации лучших характеристик квантового ограничения и предоставлению широкого выбора для удовлетворения различных требований.

Антимонид индия ($InSb$) является хорошо известным представителем полупроводников A_3B_5 . Используется в полупроводниковых, инфракрасных фоточувствительных датчиках, например, инфракрасных головках самонаведения (ИКГСН), для самонаведения ракет по ИК-излучению цели, в инфракрасной астрономии. Антимонид индия имеет вид темно-серого серебристого металла или порошка со стекловидным блеском и используется в инфракрасных фотодетекторах. Недостатком является высокая нестабильность: характеристики детектора, как правило, дрейфуют во времени.

Основная особенность энергетической структуры полупроводниковых коллоидных квантовых точек – квантование энергетического спектра (квантование размеров). Указанная особенность проявляется как синий сдвиг спектра оптического поглощения при уменьшения линейного размера частицы до нескольких нанометров.

					ПГУ 2. 11.03.04 001 ПЗ			
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата	Квантовые точки: специфические свойства, способы синтеза и методы исследования	Лит.	Лист	Листов
Разраб.		Барабанов К.С.		15.06.20				
Провер.		Игошина С.Е.		15.06.20			5	85
Н. Контр.		Рыжова Т.Н.		15.06.20		гр. 22ПД1		
Утверд.								

На эффективность оптоэлектронных свойств материала влияют его форма и химическая среда, поэтому необходимо проводить описание эффективности этих свойств в диапазоне реалистичных условий.

В связи с интересом к материалам на основе квантовых точек InSb возникает необходимость измерения образцов в виде пленок с анизотропными профилями излучения. Сразу же возникает проблема, поскольку угловая зависимость излучения становится сильно зависимой от показателей преломления образца и подложки, а также от таких дефектов, как шероховатость и неравномерная толщина. Для таких образцов необходим способ учета угловой зависимости излучения.

Множество взаимосвязанных факторов, влияющих на измерение, означает, что при планировании эксперимента необходимо проявлять особую осторожность, чтобы получить значимые результаты. При недостаточном внимании правильные значения могут быть получены только в узком спектральном диапазоне возбуждения и/или излучения. Кроме того, правильное значение может быть получено лишь случайно, за счет компенсации конкурирующих систематических ошибок. Это создает потенциал для вводящей в заблуждение проверки неверно полученных значений путем наивного согласования с измерениями, имеющимися в литературе, или с измерениями, выполненными различными методами.

1.2 Технология получения квантовых точек

На рисунке 1.1 представлен синтез КТ в стеклянной матрице, после закалки стекло представляет собой бесцветную прозрачную матрицу с равномерно распределёнными ионами металла (M) и халькогена (X).

Образование КТ в аморфной стеклянной матрице основано на термодинамическом осадке из перенасыщенного раствора (рисунок 1.1). Изоляция полупроводниковой фазы в стеклянной матрице обусловлена её низкой растворимостью при низких температурах, которая контролируется ионной диффузией и достигается путем термообработки стекла в диапазоне температур стеклования.

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

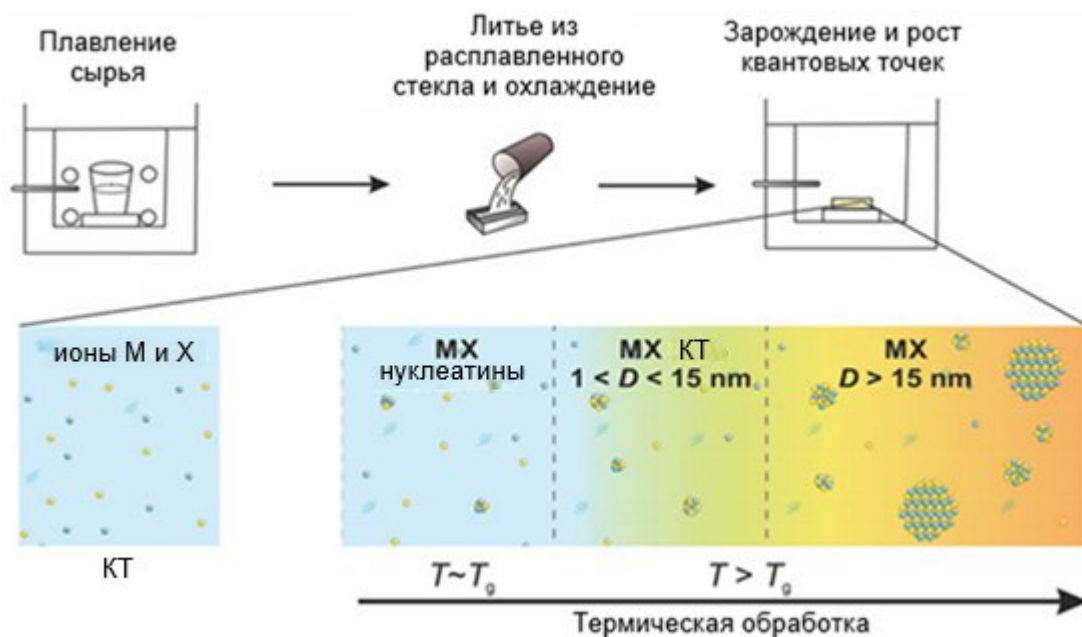


Рисунок 1.1 - Базовая схема КТ типа MX ($M = \text{Cd}, \text{Cu}, \text{Pb}$; $X = \text{S}, \text{Se}, \text{Cl}, \text{Br}, \text{Te}$) синтез в стеклянной матрице

Эту систему можно представить как раствор, в котором стеклянная матрица является растворителем, а ионы, образующие квантовые вещества - растворённые вещества. При высоких температурах, где стекло находится в виде расплава, этот раствор не перенасыщается. Однако при снижении температуры, при охлаждении расплава, раствор становится перенасыщенным. Вязкость стекла при комнатной температуре слишком высока для образования квантовых факторов при движении ионов. Достаточная диффузия ионов и их активное движение начинается при температуре стеклования T_g .

Благодаря возможности достижения высокой оптической равномерности полупроводниковых образцов КТ в стеклах и коллоидных растворах, обнаруженной ещё в первых экспериментах, оптическая абсорбционная спектроскопия стала наиболее активно используемым аналитическим методом для изучения эффекта квантового размера [1].

Типичное изображение *FESEM* (сканирующая электронная микроскопия с полевой эмиссией), показанное на рисунке 1.2 а, указывает на

то, что нанопроволоки InSb многочисленны, хорошо выровнены и равномерно распределены на слое Au, с диаметром примерно 200 нм, что соответствует размеру пор мембраны AAO. Их длина достигала нескольких десятков микрометров.

На рисунке 1.2 *b* показан рентгеновский дифракционный (*XRD*) рисунок охарактеризованной кристаллической структуры синтезированных продуктов. Дифракционные пики можно было индексировать для структуры сфалерита InSb (*JCPDS* 06-0208) с параметрами решетки 0,64 нм. На образце не наблюдалось пиков In и Sb, за исключением структуры высокочистого InSb.

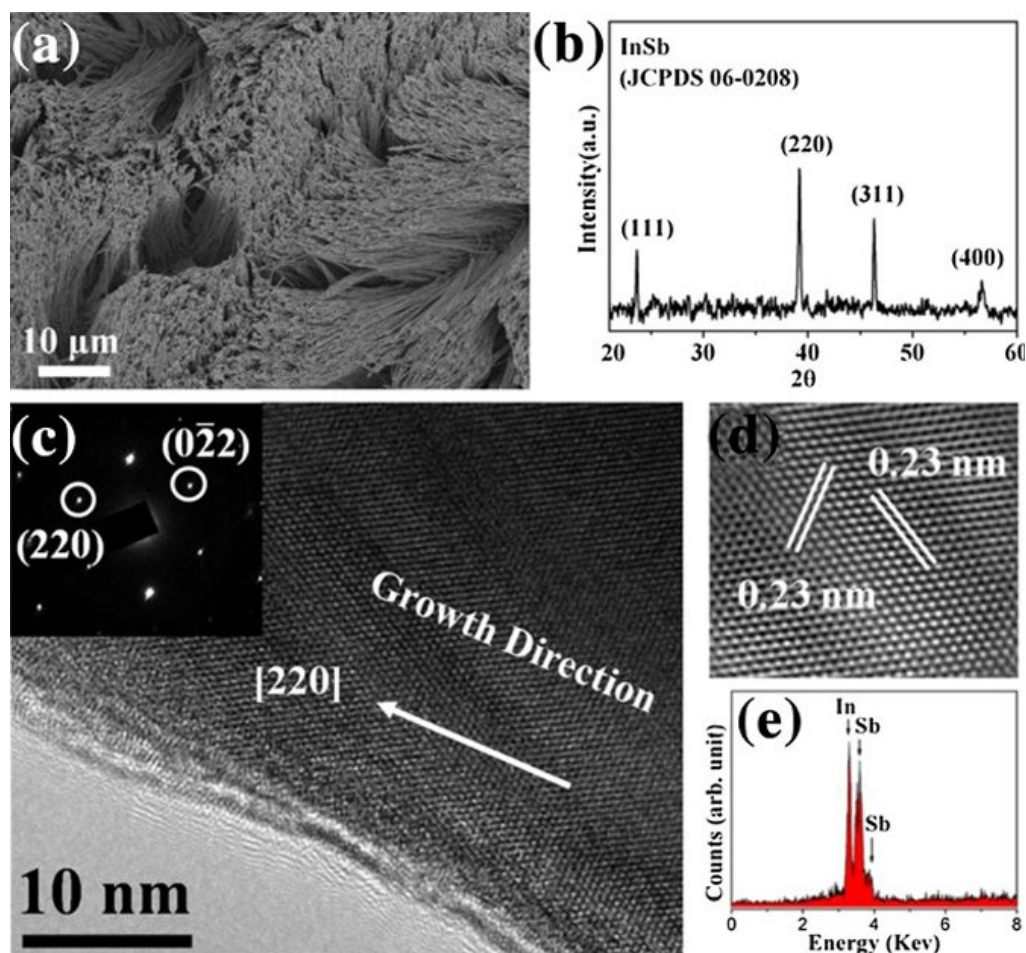


Рисунок 1.2 - *SEM*-изображение, рентгенограмма (*XRD*), *TEM* и *HRTEM* изображения, а также ЭДС-спектр синтезированных нанопроволок InSb

На рисунке 1.2: *a*) *SEM*-изображение показывает хорошо выровненные и плотные КТ InSb, диаметр нанопроволок InSb 200 нм; *b*) *XRD*-образец

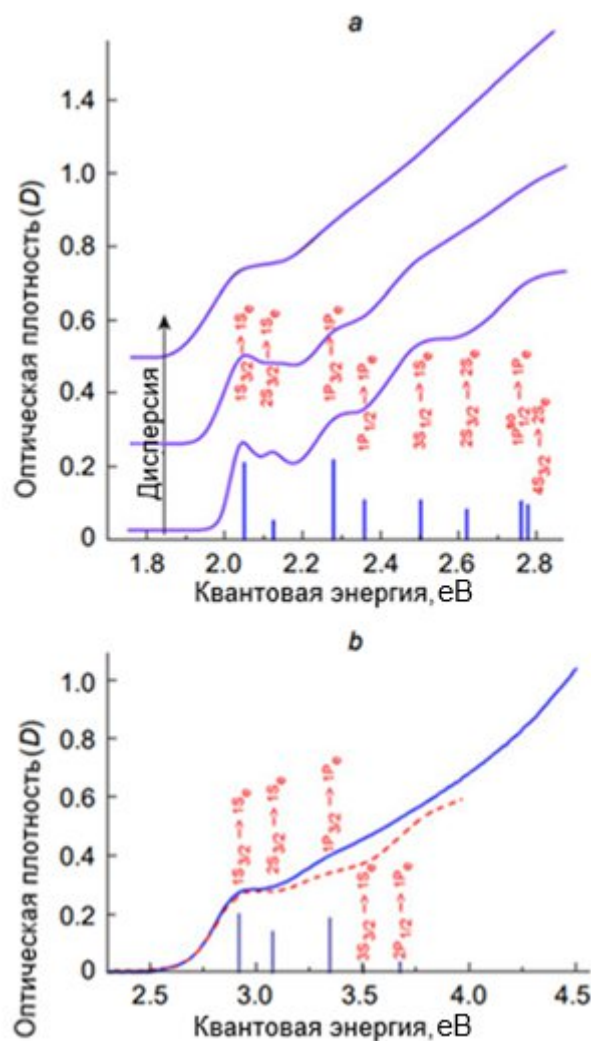
синтезированных нанопроволок InSb; *c*) *HRTEM* – изображение нанопроволок InSb показывает предпочтительную ориентацию вдоль роста. Вставка - изображение дифракции электронов в выбранной области (*SAED*); *d*) увеличенное *HRTEM* - изображение показывает четкое расстояние между атомными плоскостями; *e*) *EDX* - спектр показывает состав синтезированной нанопроволоки InSb

В анализе структура дефектов и кристалличность синтезированных нанопроволок были более подробно изучены с использованием *HRTEM* (Просвечивающая электронная микроскопия). На рисунке 1.2 *c* показано *HRTEM* - изображение одного нанопроволоки InSb и соответствующая дифракционная картина в выбранной области (*SAED*) в виде вставки. Как дифракционная картина *SAED*, так и *HRTEM*-изображение подтверждают, что синтезированные нанопроволоки InSb имеют монокристаллическую нуклеацию.

Увеличенное изображение *HRTEM* на рисунке 1.2 *d* показало четкое расстояние между решетками атомных плоскостей приблизительно 0,23нм, соответствующее плоскости InSb. Согласно спектру *EDX*, состав синтезированных нанопроволок включал только In и Sb. Соотношение компонентов In/Sb было примерно 1:1, как показано на рисунке 1.2 *e* [3].

Нанопроволоки InSb были сформированы с использованием электрохимического метода при комнатной температуре.

На рисунке 1.3 показана зависимость квантования КТ от размера структуры в оптическом спектре поглощения КТ и объясняется дискретной системой энергетических уровней. То есть эффект размерного квантования может быть инструментом для управления оптической областью поглощения и люминесценции от инфракрасного диапазона (ИК) до ультрафиолетового (УФ).



a) *CdSe*;

b) *CdS*

Рисунок 1.3 - Оптические спектры поглощения *CdSe* и *CdS* КТ
и их интерпретация

Форма и размеры наночастиц изучались методами сканирующей электронной микроскопии (СЭМ) на приборе *TescanMira II LMU* и методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) на микроскопе *Libra 120*. Кривые распределения размеров квантовых точек (КТ) синтезированных образцов и образцов после длительного хранения в коллоидном растворе, были измерены методом динамического светорассеяния (*DLS*) с использованием прибора *Malvern Zetasizer*.

Специфической особенностью экситона в квантовых единицах размером в несколько нанометров, то есть сопоставимой с радиусом экситона Ванне–Мотта в соответствующем веществе, является его преобладающая

пространственная локализация внутри нанокристалла, то есть удержание и увеличение кулоновского взаимодействия в неравновесном состоянии, которое сохраняет это элементарное возбуждение до аннигиляции. Это основное различие КТ от квантового провода или квантовой ямы, а также от объёмного кристалла, который имеет, как минимум, одну-две координаты, вдоль которых носители заряда не имеют фиксации и могут находиться на расстояниях, значительно превышающих радиус экситона Ванне–Мотта.

Квантовые точки (КТ) из антимонида индия (InSb) представляют особый интерес, поскольку InSb обладает рядом уникальных свойств: малой шириной запрещённой зоны ($\sim 0,18\text{эВ}$), малой эффективной массой электрона ($m^* \sim 0,013m_0$, где m_0 — масса свободного электрона) и большой длиной волны де Бройля для электронов (до 55нм).

InSb является полупроводником с узкой запрещённой зоной, обладающим высокой подвижностью электронов $\mu \geq 60000 \text{ см}^2/(\text{В}\cdot\text{с})$ и собственной концентрацией электронов $2 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$ при $T = 300\text{К}$.

Когда InSb используется в качестве активного слоя, изменение температуры на один градус приводит к относительному изменению концентрации носителей на 2,2%; полупроводники с более широкой запрещённой зоной показывают большее относительное изменение концентрации носителей в процентах (например, для Si это 8,3% на градус). Таким образом, благодаря высокой подвижности и слабой температурной зависимости концентрации собственных электронов, InSb широко используется при производстве датчиков магнитного поля [1].

Полученные образцы изучались с использованием просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) на микроскопе *Libra 120*, сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) с помощью сканирующего зондового микроскопа *SOLVERNANO* и сканирующей электронной микроскопии на полевой эмиссионной микроскопе *MIRA 2 LMU*. Также использовался лазерный анализатор размеров частиц *Zetasizer Nano ZS*.

ТЕМ изображение синтезированных наночастиц, размер которых оценивался примерно в 10–15 нм, представлено на рисунке 1.4 и подтверждает квантово-размерную природу наночастиц InSb, что предполагает наличие уникальных электрофизических свойств.

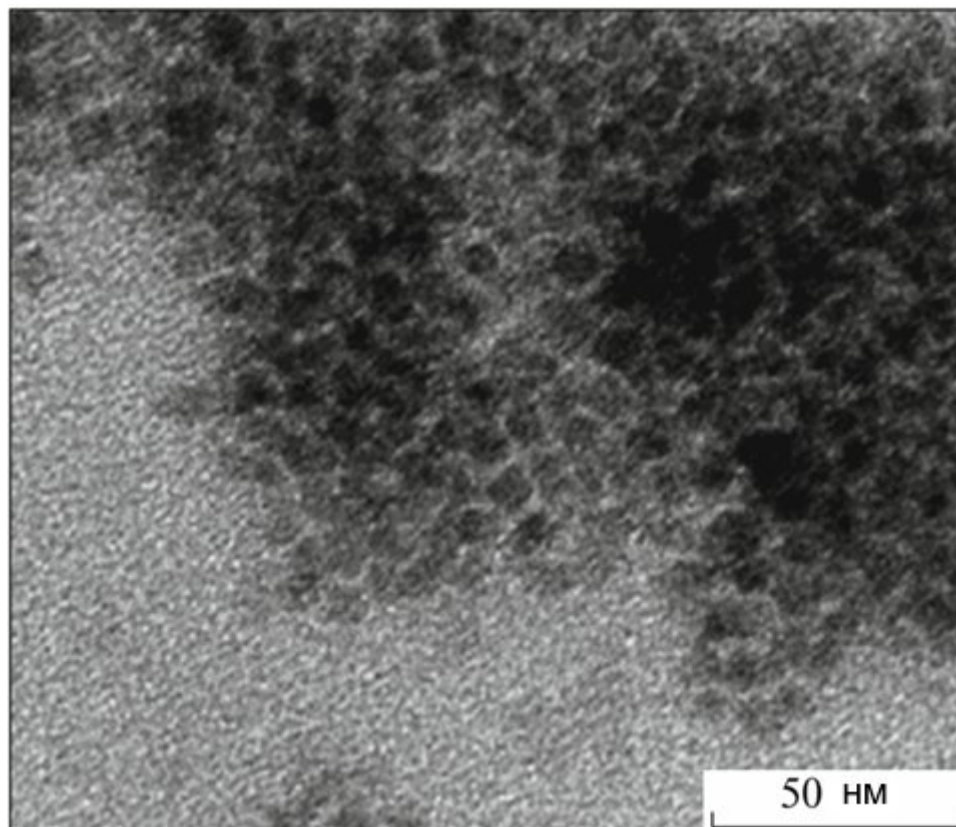


Рисунок 1.4 - ТЕМ изображение квантовых точек InSb

Эпитаксиальный рост проводился в горизонтальной установке *LPE*, оснащённой обычной графитовой лодочкой с ползунком, при очищенном потоке H_2 на подложке InAs (001) в широком температурном диапазоне $T = 425\text{--}445^\circ\text{C}$.

Подложки готовили к осаждению методом влажного химического полирования. Осаждение InSb выполняли из расплава In, в котором бинарное соединение InSb было расплавлено в качестве источника сурьмы. Формирование квантовых точек InSb осуществлялось во время равномерного скольжения подложки InAs под расплавом при заданной температуре. Подробности роста квантовых точек были изложены в других работах.

Рельеф поверхности исследуемых образцов изучали в условиях комнатной температуры с помощью атомно-силовой микроскопии (АСМ) на

					ПГУ 2. 11.03.04 001 ПЗ	Лист
						12
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дат		

микроскопе *Solver P47H* и сканирующем пробном комплексе *Integra-Aura*. Измерения проводили в режиме «таппинг» с использованием кремниевых кантилеверов *NSG-01* с резонансной частотой $f = 150$ кГц. Средняя ударная сила не превышала $F = 0,5$ нН, чтобы избежать разрушения поверхности образца.

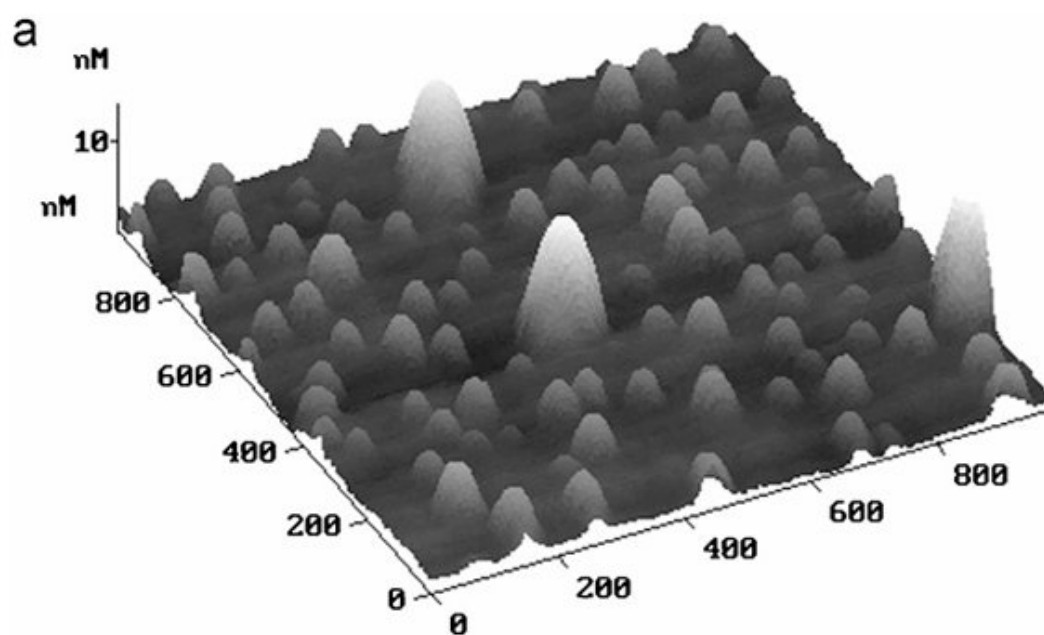
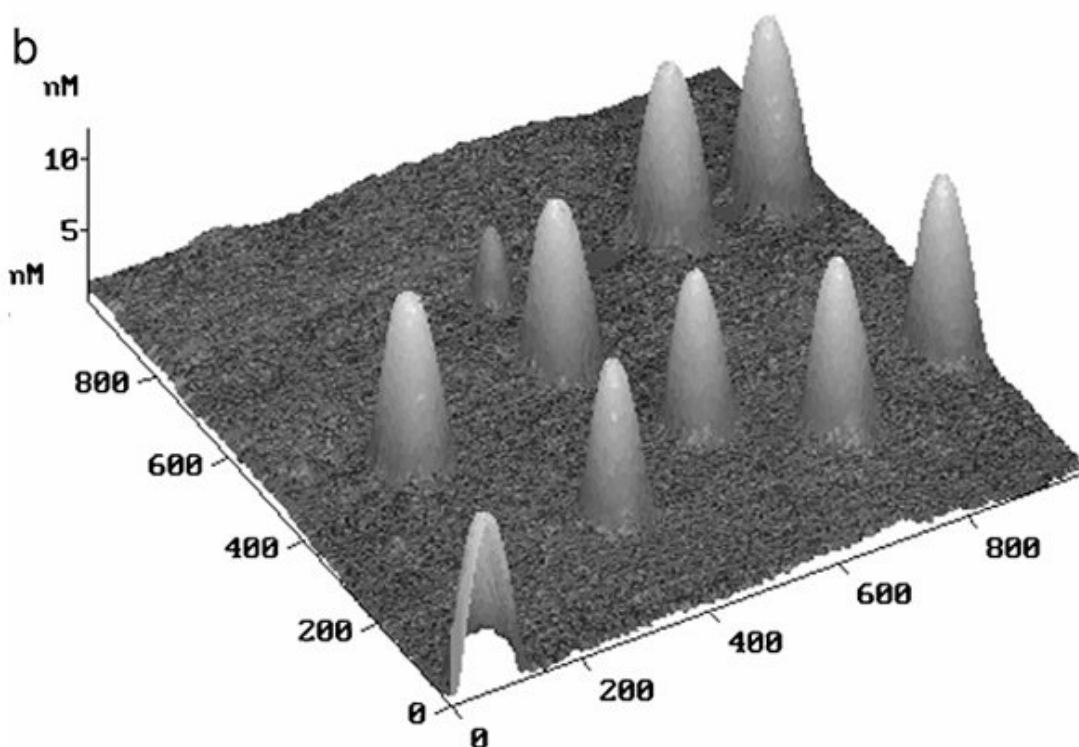
Исследование методом просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) проводили на микроскопе *JEOL JEM2100FEG* при ускоряющем напряжении 200кВ. Использовали как дифракционный контраст, так и режимы высокоразрешающей визуализации (*HREM*). Образцы для ПЭМ готовили традиционным способом: шлифовка, углубление и финальное ионное травление Ar^+ при энергии 4кэВ.

Изменяя температуру роста в диапазоне от 425°C до 440°C, на бинарной поверхности InAs одновременно были обнаружены два типа квантовых точек InSb - большие и маленькие (рисунок 1.5 *a*). Малые квантовые точки InSb имели высоту 2–5нм, боковой размер 20–40нм и показывали высокую поверхностную плотность около $1 \times 10^{10} \text{см}^{-2}$ по порядку величины, в то время как большие КТ с высотой 12–14нм и боковым размером 50–60нм появлялись с гораздо меньшей плотностью примерно $3 \times 10^8 \text{см}^{-2}$.

Увеличение температуры роста приводило к снижению плотности малых КТ до их полного исчезновения при критической температуре $T = 445^\circ\text{C}$, тогда как большие оставались на поверхности матрицы и увеличивали свою плотность до 10^9см^{-2} (рисунок 1.5 *b*).

Для анализа поверхности КТ InSb использовался сканирующий зондовый микроскоп высокого разрешения (АФМ), способный определять рельеф поверхности с разрешением от нанометра и выше.

В отличие от сканирующего туннельного микроскопа с помощью атомно-силового микроскопа можно исследовать как проводящие, так и непроводящие поверхности.



a) $T = 430^{\circ}\text{C}$ (плотность квантовых точек $1 \times 10^{10} \text{ см}^{-2}$); *b)* $T = 445^{\circ}\text{C}$
(плотность квантовых точек $1 \times 10^9 \text{ см}^{-2}$)

Рисунок 1.5 - АФМ-топографические изображения поверхности образцов размером $1 \text{ нм} \times 1 \text{ нм}$ с квантовыми точками InSb, выращенными на подложке InAs (001)

Для более детального исследования морфологии квантовых точек InSb использовалась просвечивающая электронная микроскопия. На рисунке 1.6

представлены изображения двух отдельных квантовых точек, демонстрирующие интерференционные полосы, проходящие вдоль заданного направления. Известно, что полосы появляются на изображении свободно стоящей квантовой точки из-за различий в межпланарных расстояниях в точке и в подложке. Для когерентной свободно стоящей квантовой точки это различие вызвано эффектом Пуассона.

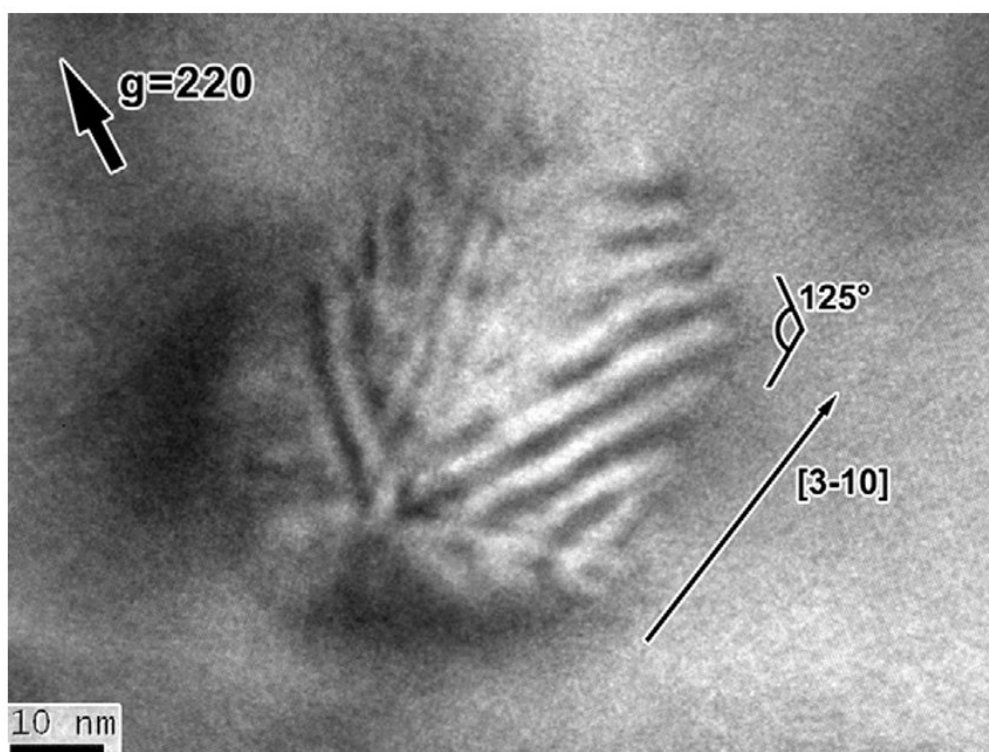
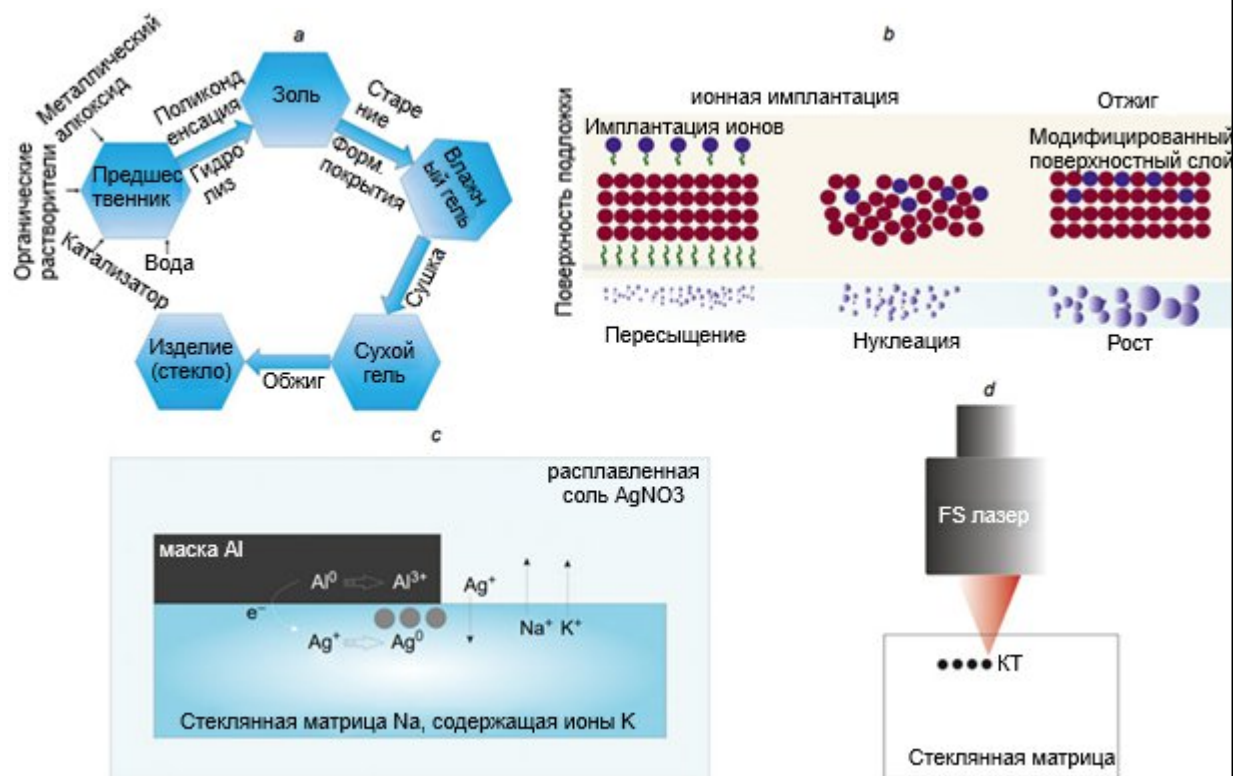


Рисунок 1.6 - ПЭМ изображение двух отдельных квантовых точек InSb, выращенных при $T=430^{\circ}\text{C}$ на поверхности InAs (001)

Метод золь-гель основан на использовании соединений высокой чистоты, которые однородно смешиваются в жидкой фазе, что позволяет получать композиты на основе квантового контроля в виде тонких пленок.



а) метод золь-гель; б) ионная имплантация; в) ионный обмен;

г) фемтосекундное лазерное облучение

Рисунок 1.7 - Основные диаграммы синтеза квантовых факторов в твердой матрице

Исследования кинетики нуклеации и роста кристаллов чаще всего ограничены стеклокерамическими системами, в которых основной стекланный компонент кристаллизуется при термической обработке, но мало что известно о нуклеации и росте частиц мелких компонентов или микроэлементов в стекле. Поэтому последующие исследования были посвящены механизмам роста КТ, вложенных в аморфную матрицу, а также их атомной структуре и оптических свойств. На образце не наблюдалось пиков In и Sb, за исключением структуры высокочистого InSb.

Экспериментальные вольт-амперные характеристики (ВАХ) были проанализированы с использованием нормализованных дифференциальных туннельных ВАХ (зависимости $(dI/dV)/(I/V)$ от напряжения V). Эти нормализованные дифференциальные туннельные ВАХ были исследованы при отрицательном потенциале смещения подложки относительно зонда (рисунок 1.8).

В этом случае электроны туннелируют с проводящей подложки (электрода ИТО(электрод на основе оксида индия-олова)) через дискретные уровни квантовых точек к зондовому микроскопу. Этот эффект отчасти похож на резонансно-туннелирование. Пики, связанные с туннелированием электронов через размерно-квантованные энергетические состояния квантовых точек, наблюдаются в нормализованных дифференциальных туннельных ВАХ (стрелки на рисунке 1.8).

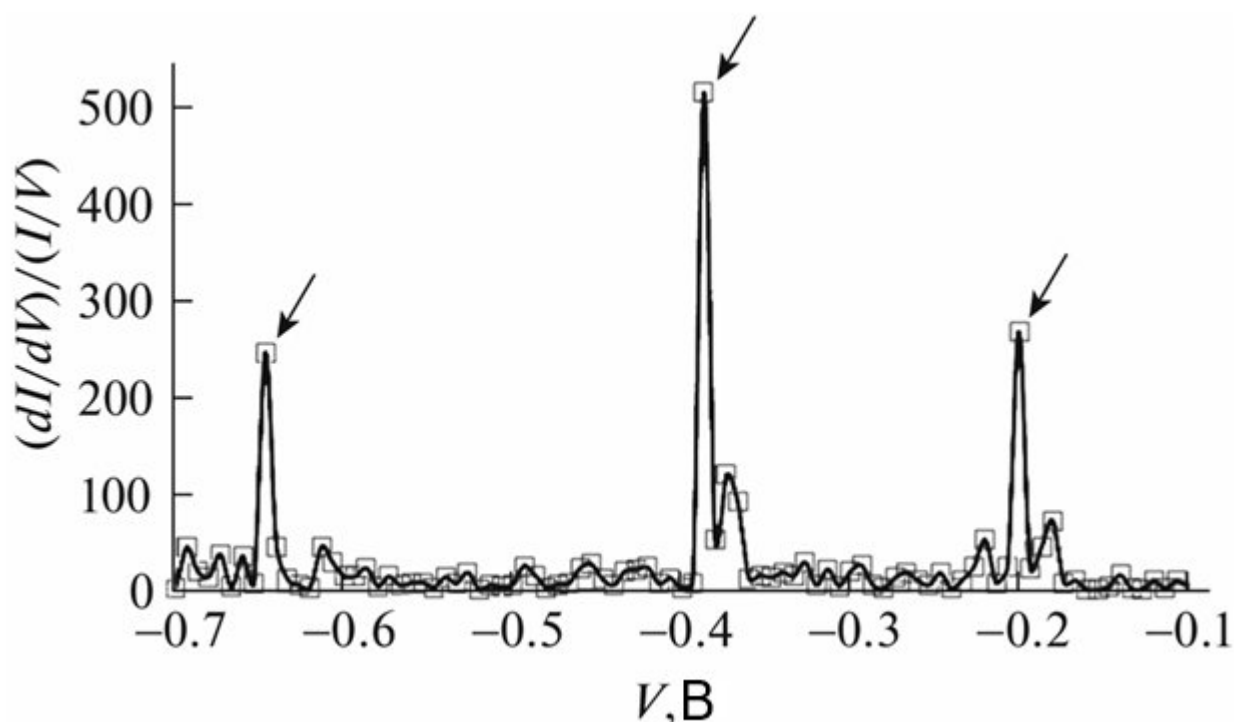


Рисунок 1.8 – Типичные нормированные дифференциальные туннельные ВАХ кривые образцов КТ InSb

Процесс эмиссии электронов из металла в вакуум описан формулой Фаулера–Нордгейма, где плотность тока полевой эмиссии записывается как

$$j = \frac{e^3}{8\pi h} \frac{\varepsilon^2}{\varphi t^2(\varepsilon, \varphi)} \exp \left[-\frac{8\pi\sqrt{2m}}{3he} \frac{\varphi^{3/2}}{\varepsilon} \theta(\varepsilon, \varphi) \right] \quad (1.1)$$

и теорией Моргулиса–Стрэттона для эмиссии поля из полупроводников, где плотность тока определяется

$$j_s = qn \left(\frac{kT}{2\pi m_0} \right)^{1/2} \exp \left[\frac{8\pi\sqrt{2m_0} A_s^3}{3hqE} \right]. \quad (1.2)$$

Эти формулы были использованы для интерпретации экспериментальных ВАХ в области относительно высоких напряжённости электрического поля.

В (1.1), (1.2) m_0 - масса электрона, θ - значения функции Нордгейма, ϕ и A_s – работы выхода из металла и полупроводника, E - локальная интенсивность электрического поля, t - специальная функция, которая учитывает влияние степени понижения треугольного потенциального барьера на ток, n - плотность электронов, а q - модуль заряда электрона.

Эти модельные представления использовались для анализа механизма переноса тока с учетом слоя квантовых точек InSb и оценки некоторых характеристик объекта квантового размера.

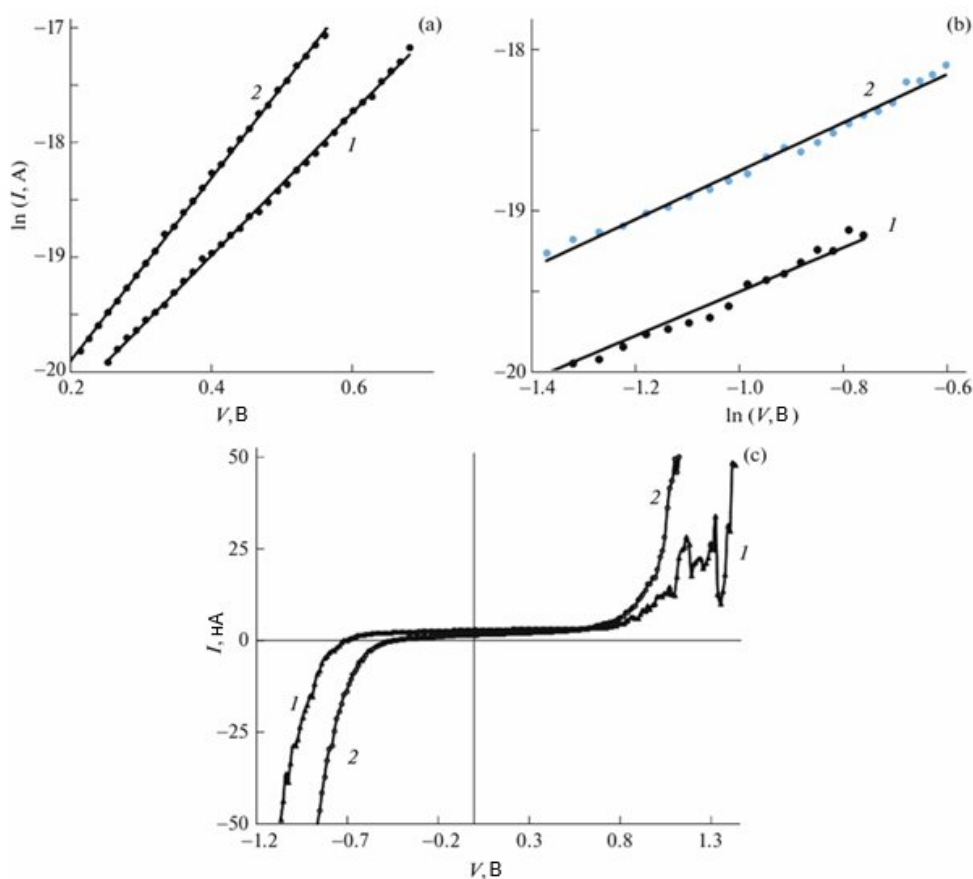
InSb характеризуется исключительно малыми эффективными массами электронов и дырок. Это определяет относительно большой радиус возбужденного состояния бора (до 60 нм), что объясняет важное практическое преимущество - большой размер квантовых точек, в которых может реализовываться режим сильного квантового ограничения носителей (а не квантование экситонов в целом). Однако увеличение размера КТ также может привести к возрастанию вероятности деформации кристаллической решетки во время синтеза и, следовательно, к ослаблению эффектов квантового ограничения.

Совершенство кристаллической структуры контролируется обычно методом рентгено-дифракционного анализа. Для нанокристаллов, однако, такие исследования практически затруднительны, что обусловлено технологическими проблемами подготовки подходящих для метода образцов. Вместо них обычно проводится рентгеноспектральный микроанализ по пикам рентгенограммы, сопоставляемым со справочными данными. Кроме того, совершенство нанокристаллов косвенно оценивается по их полигональной форме на ТЕМ-снимках высокого разрешения и по свойствам электронной проводимости, зависящей от эффективной массы электрона – важного параметра совершенной структуры монокристалла.

					ПГУ 2. 11.03.04 001 ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дат		18

Ток–напряжение (I – V) характеристики КТ обоих типов, измеренные многократно и усредненные, функционально идентичны (рисунок 1.9). Наблюдаемые различия определялись различиями в параметрах аппроксимации, связанных с долей падения напряжения на квантовом точечном объекте в зависимости от размера квантового точечного объекта.

Линейный характер этих кривых, построенных в координатах $\ln I$ – V , может указывать на эмиссионный характер тока, тогда как линейность в координатах $\ln I$ – $\ln V$ может быть свидетельством инжекции электронов в КЯ и тока, ограниченного объемным зарядом.

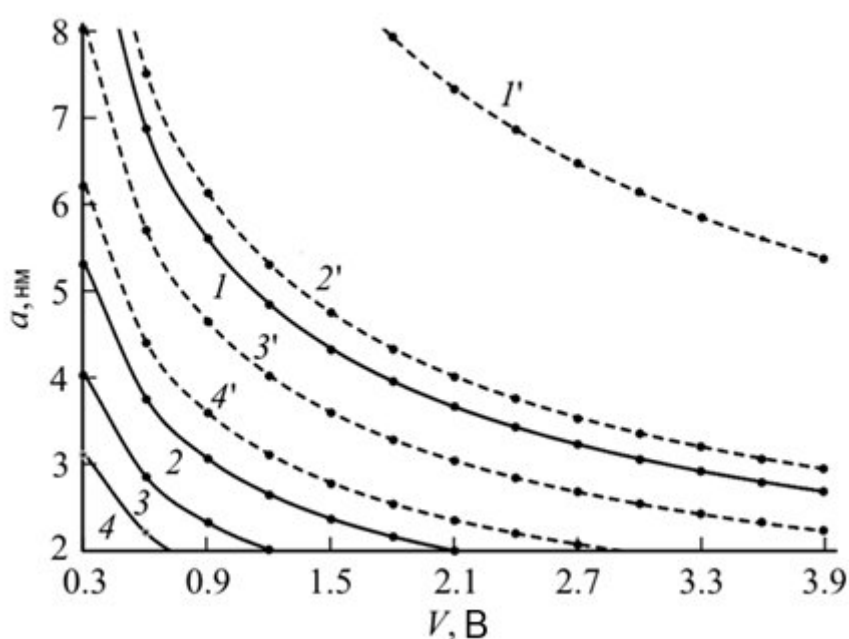


а) полулогарифмические координаты с «минусом» на образце, б) логарифмические координаты с «плюсом» на образце, и с) линейные координаты, где 1) большие квантовые точки InSb (InP/CdS); 2) малые квантовые точки InSb (InP/CdS)

Рисунок 1.9 – Вольт–амперные характеристики InSb (InP/CdS) - больших и InSb (InP/CdS) – малых квантовых точек

Основываясь на характере наблюдаемых I – V кривых (рисунок 1.9 с), показывающих снижение и нестабильность тока, можно предположить, что интервал напряжений выше 1В характеризуется эффектом кулоновской блокады, аналогичным хорошо известным в квантовых точках (КТ). Этот феномен не наблюдается в маленьких КТ из InSb (InP/CdS), где падение напряжения недостаточно велико и энергетическое условие проявления кулоновской блокады не выполняется.

Тенденции современной науки делают синтез и характеристики больших (до 20 нм) квантовых точек антимиониды индия (InSb - большие КТ) важной и интересной задачей, позволяющей оптимизацию коллоидного синтеза больших квантовых точек InSb с размерами до 20 нм и анализ полученных результатов на основе исследования их спектральных и вольт-амперных характеристик.



$n = 1$: 1 — КТ-InSb, 2 — КТ-HgSe, 3 — КТ-PbS, 4 — КТ-CdSe; $n = 2$: 1' — КТ-InSb, 2' — КТ-HgSe, 3' — КТ-PbS, 4' — КТ-CdSe

Рисунок 1.10 - Номограмма связи размера КТ и напряжения (энергии электрона) для проявления квантовой проводимости ($C = 0$)

в резонансах $n = 1$ и $n = 2$

Необходимо заметить, что коллоидный синтез наночастиц определяется термодинамическими свойствами системы при условии, что растет внутренняя объемная энергия кристалла, а его поверхностная уменьшается вплоть до энергии Ван-дер-Ваальса, при том рост квантовой точки прекращается.

Предельный размер нанокристалла в этом случае ограничен соотношением объемной и поверхностной энергии и, оценочно, лежит в пределах значений от 6 нм для КТ-InSb до 17 нм для КТ-CdSe.

2 Квантование энергетического спектра носителей заряда в квантовых точках

2.1 Методы анализа энергетического спектра квантовых точек

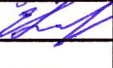
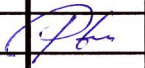
Одной из ключевых характеристик наноструктур является их характерный размер, сравнимый с длиной волны де Бройля носителей заряда (электронов или дырок). Когда размеры системы становятся меньше, чем длина волны носителя, проявляется эффект квантового ограничения: энергетические уровни становятся дискретными, а поведение частиц — квазигармоническим. Это лежит в основе всей квантовой теории наноструктур.

Квантовые точки обеспечивают уникальную платформу для управления спином электрона или дырки, изолированных от среды. Спиновое состояние можно сохранять в течение микросекунд (в вакууме) или наносекунд (в твердых телах), что делает такие системы перспективными для квантовых вычислений и спинтроники.

В настоящее время тенденции развития полупроводниковой наноэлектроники таковы, что возникает необходимость учитывать влияние особенностей геометрической формы наноструктур на электронный энергетический спектр, включая примесные состояния.

Для случаев, когда аналитическое решение получить невозможно, на помощь приходят численные методы. Однако большинство этих методов, таких как методы квантовой химии, требуют больших вычислительных мощностей, таких как кластеры или суперкомпьютеры. Более того, вычисления могут занимать крайне много времени. Хотя они, без сомнения, являются самыми точными, скорость этих методов делает их негибкими в случаях, когда исследование требует изменения геометрических параметров или изменения внешних полей.

ПГУ 2. 11.03.04 001 ПЗ

Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата	Квантование энергетического спектра носителей заряда в квантовых точках		
Разраб.		Барабанов К.С.		26.06.20	Лит.	Лист	Листов
Провер.		Игошина С.Е.		18.06.20		22	85
Н. Контр.		Рыжова Т.Н.		18.06.20	гр. 22ПД1		
Утверд.							

С учетом этого, метод конечных элементов служит относительно недорогим с вычислительной точки зрения методом, который обладает хорошей точностью для получения качественного понимания квантовых точек со сложной нетривиальной геометрией.

Метод конечных элементов (МКЭ) широко используется инженерами в течение последнего десятилетия. Этот метод помог инженерам сделать их проекты более безопасными и экономически эффективными. Относительно высокая скорость моделирования позволяет использовать метод для моделирования свойств материалов и критериев разрушения композиционных материалов как на микроуровне, так и на макроуровне. Для трехмерной системы МКЭ формулируется следующим образом: объем системы представляется через конечные элементы. Эти элементы соединены в узловых точках, расположенных в углах, на сторонах, поверхности или в объеме элементов. Эти неперекрывающиеся элементы заполняют объем системы. В итоге из постановки задачи краевых значений с использованием метода конечных элементов вытекает система алгебраических уравнений. Эта техника делает приближения неизвестной функции на всей области. Квантовые точки демонстрируют резонансную флуоресценцию, фотолюминесценцию и возможность управляемого излучения одного фотона. Последнее важно для задач квантовой криптографии и построения источников одиночных фотонов.

После кремния самым изученным полупроводниковым материалом является арсенид галлия GaAs. Он имеет прямую запрещенную зону и подходящие параметры для многих приложений.

В любом расчете методом конечных элементов первым шагом является определение уравнения с частными производными; в нашем случае мы решали трехмерное уравнение Шредингера для одной частицы:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x,y,z) + V\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z) \quad (2.1)$$

где $\psi(x,y,z)$ — волновая функция (собственная функция) частицы, V — потенциал ограничения, а E — энергия (собственное значение) частицы. Важно отметить, что в зависимости от системы может потребоваться добавление членов, представляющих деформацию системы, вызванную границами между материалами, пьезоэлектрические эффекты и внешние поля, для достижения наименьшего отклонения от эксперимента.

Необходимо определить граничную сеточную область для сеточных областей, используемых в наших расчетах, представленных на рисунке 2.1. Геометрические параметры, использованные для расчетов в данной статье, представлены в таблице 2.1.

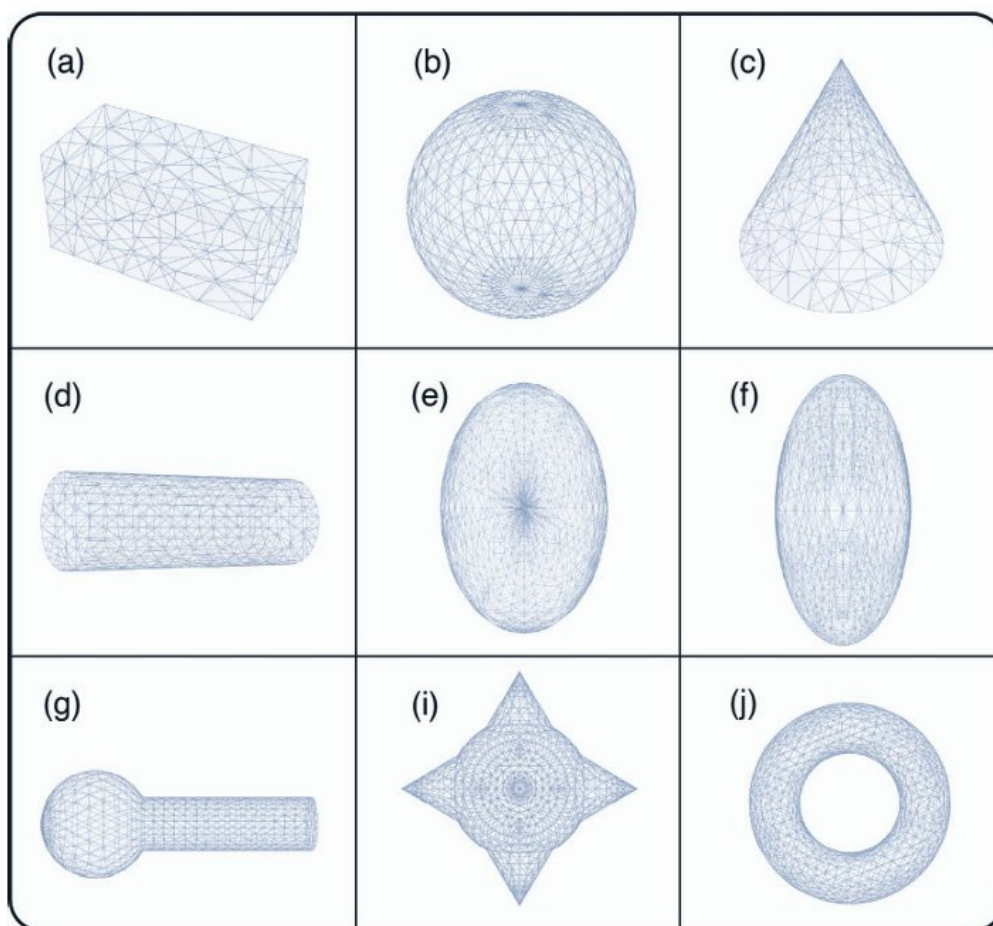


Рисунок 2.1 - Сеточные области, используемые для расчетов: *a)* сетка для прямоугольного квантового точки (QD), *b)* сетка для сферического QD , *c)* сетка для конусной QD , *d)* сетка для цилиндрического QD , *e)* сетка для эллипсоидного QD , *f)* сетка для эллипсоида вращения (сфероида), *g)* сетка для нанопроволоки, *h)* сетка для нанозвезды, *i)* сетка для квантового кольца.

Последним шагом метода конечных элементов является постановка граничных условий, которые обычно задаются потенциалом $V(x,y,z)$. В большинстве примеров были учтены модель бесконечной ямы, где плотность вероятности обращается в ноль вне структуры $|\psi(\text{outside})|^2 = 0$. Эта модель соответствует потенциалу следующей формы:

$$V(x,y,z) = \begin{cases} V(\text{inside}) = 0 \\ V(\text{outside}) = \infty \end{cases} \quad (2.2)$$

Это подразумевает, что частица заключена в КТ и не может выйти за пределы структуры.

Метод конечных элементов (МКЭ) делит сеточную область на конечные элементы и решает уравнение. В процессе этих действий максимальный размер этих элементов можно изменить; в целом, чем меньше элементы, тем выше точность. В *Mathematica* размер этих элементов определяется свойством под названием *Max Cell Measure*. Чтобы проверить точность решения, мы можем минимизировать энергию частицы, изменяя параметр *Max Cell Measure*. Численная ошибка также зависит от геометрических параметров системы. Другой метод проверки точности метода заключается в сравнении собственных значений, полученных методом конечных элементов (МКЭ), с аналитически решаемыми случаями.

Таблица 2.1 - Геометрические параметры структур в расчетах.

Структуры	Значения геометрических параметров(нм)
Прямоугольная КТ	$L_x = 40, L_y = 20, L_z = 20$
Сферическая КТ	$R = 10$
Конусная КТ	$R = 5, H = 30$
Эллипсоидная КТ	$a_x = 30, b_y = 10, c_z = 20$
Сферическая КТ	$a = 30, b = 20, c = 20$
Квантовое кольцо	$R_{inner} = 10, R_{outer} = 20$
Конусная КТ	$R = 12, H = 20$
Нанопроволока	$R_{head} = 12, R_{tail} = 6, H_{tail} = 20$
Нанозвезда	$R_{sphere} = 10, R_{cone} = 10, H_{cone} = 7.5$

Далее рассмотрим один из методов изучения структур, содержащих различные материалы, такие как QD типа ядро/оболочка или многослойные QD . В такой системе необходимо учитывать значение эффективной массы, диэлектрической проницаемости, глубину потенциала и эффекты, вызванные диффузией носителей заряда. $V(x,y,z)$ в этом случае имеет более сложную форму, такую как кусочно-заданная потенциальная яма Вудса–Саксона. С целью демонстрации, как эффективной массы, так и анизотропии диэлектрической проницаемости, мы рассматриваем водородоподобную систему с гамильтонианом:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\psi(x,y,z) + V\psi(x,y,z) + \frac{2e^2}{\epsilon_0\sqrt{(\vec{r}-\vec{r}_0)^2}} = E\psi(x,y,z) \quad (2.2)$$

где $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ является радиус-вектором электрона. Для моделирования зонной структуры сферической структуры $CdSe/CdS$ с сердцевинной/оболочкой мы можем использовать:

$$V(r) = \begin{cases} V(r) = (V_0^{CdS} - V_0^{CdSe}) - \frac{V_0^{CdS} - V_0^{CdSe}}{1 + \exp[(r - R_{core})/\alpha]}, & r < R_{core} \\ V(r) = V_0^{CdS} - \frac{V_0^{CdSe}}{1 + \exp[(r - R_{core})/\alpha]}, & r \geq R_{core} \\ V(r) = \infty, & r \geq R_{shell}. \end{cases} \quad (2.3)$$

где $V_0^{CdS} = 4.8$ эВ, $V_0^{CdSe} = 4.9$ эВ — это положение минимума зоны проводимости для $CdSe$ и CdS соответственно; R_{core} — радиус ядра, в нашем случае область $CdSe$; R_{shell} — радиус оболочки, в нашем случае область CdS ; α — параметр плавности перехода, который изменяется в зависимости от степени диффузии. Форма потенциала показана на рисунке 2.2.

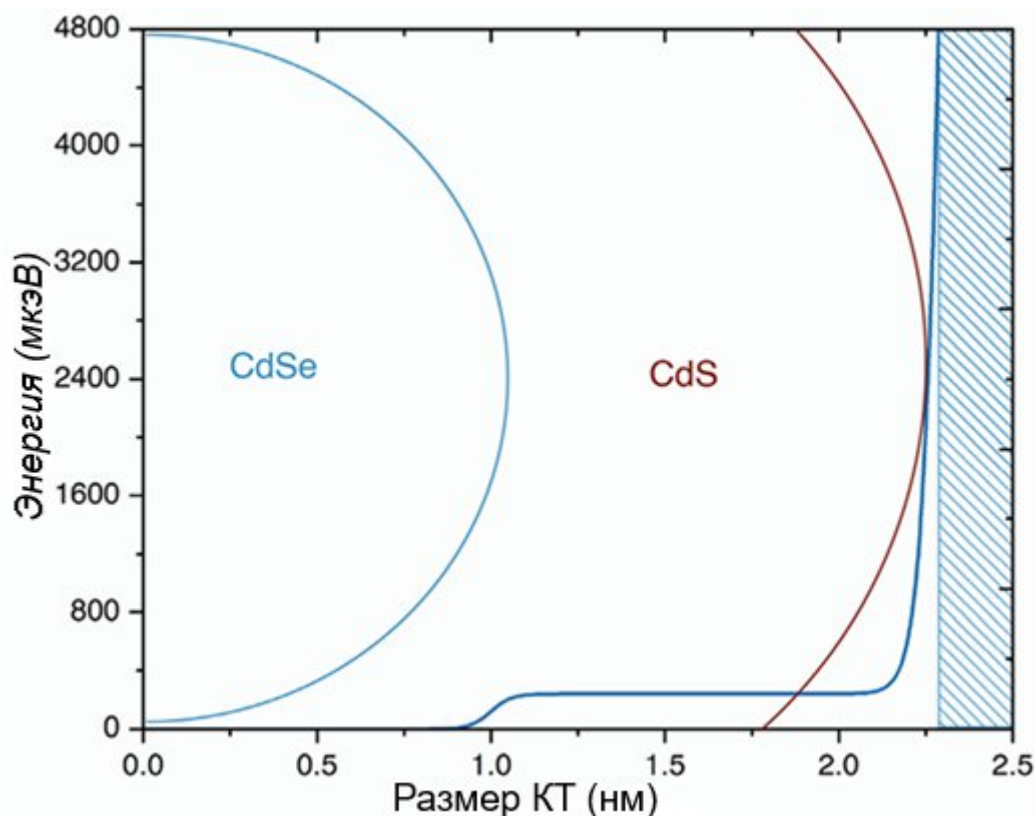


Рисунок 2.2 - Кусковой потенциал Вудса–Саксона, построенный для следующих параметров: $R_{core} = 1$ нм, $R_{shell} = 1.3$ нм, $a_{core} = 0.03$

Квантовая точка в форме прямоугольного параллелепипеда с непроницаемыми границами имеет наиболее простые волновые функции и энергетический спектр.

Эффективная масса и диэлектрическая проницаемость могут быть определены с помощью стандартного потенциала Вудса–Саксона:

$$m^*(r) = m_{CdS}^* - \frac{m_{CdS}^* - m_{CdSe}^*}{1 + \exp\left[\frac{r - R_{core}}{a}\right]} \quad (2.4)$$

где $m_{CdSe}^* = 0,112 \cdot m_0$, $m_{CdS}^* = 0,25 \cdot m_0$ — это эффективные массы электрона в соответствующих материалах.

$$\varepsilon_0(r) = \varepsilon_{CdS} - \frac{\varepsilon_{CdSe} - \varepsilon_{CdS}}{1 + \exp\left[\frac{r - R_{core}}{a}\right]} \quad (2.5)$$

где $\varepsilon_{CdSe} = 9.29$, $\varepsilon_{CdS} = 8.28$ — это диэлектрические проницаемости соответствующих материалов.

Внутри потенциальной ямы уравнение Шредингера (2.1), записанное в декартовых координатах, имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z) \quad (2.6)$$

и решается разделением переменных. Для этого следует положить

$$\psi(x,y,z) = X(x)Y(y)Z(z) \quad (2.7)$$

Далее легко показать, что функции X , Y и Z удовлетворяют уравнениям типа гармонического осциллятора

$$\frac{d^2F}{du^2} + k_u^2 F = 0, F = X, Y, Z \quad (2.8)$$

в которых постоянные k_u определяют полную энергию частицы

$$E = \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (2.9)$$

Общее решение уравнений (2.4) имеет вид

$$F(u) = A_u \sin(k_u u) + B_u \cos(k_u u) \quad (2.10)$$

Условие обращения в нуль функции ψ на границах потенциальной ямы $u = 0$ и $u = L_u$ дает $B_u = 0$ и $k_u = \pi n_u / L_u$, где квантовые числа n_u принимают целые значения. Константы A_u определяют так, чтобы функции $F(u)$ были нормированы на единицу.

В результате волновая функция и энергетический спектр носителей заряда в квантовой точке могут быть представлены следующими выражениями:

$$\psi_{n_x n_y n_z} = \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}} \psi_{n_x}(x) \psi_{n_y}(y) \psi_{n_z}(z) \quad (2.11)$$

$$\psi_{n_u}(u) = \sqrt{\frac{2}{L_u}} \begin{cases} \sin(K_{n_u} u), & n_u - \text{четное}, \\ \cos(K_{n_u} u), & n_u - \text{нечетное}, \end{cases} \quad (2.12)$$

$$E_{n_x n_y n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^*} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right). \quad (2.13)$$

Из (2.9) прямо следует, что трехмерное пространственное ограничение движения носителей заряда в квантовой точке приводит к расщеплению их непрерывного энергетического спектра $E_{c(v)}(k) = \hbar^2 k^2 / [2m_{c(v)}^*]$ на дискретные уровни размерного квантования $E_{n_x n_y n_z}^{c(v)}$. При этом оказывается, что энергия дискретных уровней обратно пропорциональна квадрату характерного

					ПГУ 2. 11.03.04 001 ПЗ	Лист
						28
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дат		

размера квантовой точки. В частности, для кубической квантовой точки с длиной ребра $L, E_{n_x n_y n_z} \propto L^{-2}$. Как мы увидим в дальнейшем, 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. В противном случае часть уровней оказывается вырожденными.

2.2. Модель цилиндрической квантовой точки

Цилиндрическая квантовая точка часто используется для моделирования полупроводниковых нанокристаллов, выращенных методом самоорганизации. Данный метод позволяет получать нанокристаллы в форме призм с почти круглыми основаниями.

Если его принять, то потенциал $V(\mathbf{r})$ в котором область QD дается выражением

$$QD = \left[\begin{array}{l} 0 \leq \rho \leq \rho_0 \\ 0 \leq \varphi < 2\pi \\ -h/2 \leq z \leq h/2 \end{array} \right] \quad (2.14)$$

где ρ_0 и h – соответственно радиус основания и высота квантовой точки (рисунок 2.1 б).

Внутри квантовой точки уравнение (2.10) в цилиндрических координатах принимает вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \psi(\rho, \varphi, z) = E \psi(\rho, \varphi, z). \quad (2.15)$$

Для определения волновых функций и спектра носителей подставим в (2.10) $\psi(\rho, \phi, z)$ в виде произведения $R(\rho)\Phi(\phi)Z(z)$. Тогда для разделившихся переменных получим следующие дифференциальные уравнения:

$$\frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial R}{\partial \rho} \right) + \left[(k^2 - \mu^2) \rho - \frac{\lambda^2}{\rho} \right] R = 0, \quad k^2 = \frac{2m^* E}{\hbar^2}, \quad (2.16)$$

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} + \lambda^2 \Phi = 0, \quad (2.17)$$

$$\frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} + \lambda^2 Z = 0. \quad (2.18)$$

Заменой $\rho = u \sqrt{k^2 - \mu^2}$ уравнение (2.11) преобразуется к виду

$$\frac{\partial^2 R}{\partial \rho^2} + \frac{1}{u} \frac{\partial R}{\partial \rho} + \left(1 - \frac{\lambda^2}{u^2}\right) R = 0. \quad (2.19)$$

Ограниченным в нуле решением данного уравнения является цилиндрическая функция Бесселя $J_\lambda(u)$. Вводя постоянную $\zeta^2 = \rho^2_0(\kappa^2 - \mu^2)$, используя условие $R(\rho_0) = 0$ и условие нормировки

$$\int_0^{\rho_0} R^2 \rho d\rho = 1, \quad (2.20)$$

получим интересующее нас решение уравнения (2.18)

$$R_{n\lambda}(\rho) = \frac{\sqrt{2} J_\lambda(\zeta_{n\lambda} \rho / \rho_0)}{\rho_2 J_{\lambda+1}(\zeta_{n\lambda})}, \quad (2.21)$$

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

Решение уравнения (2.17) удобно представить в комплексной форме $\Phi_0 \exp(i\lambda\phi)$, а решение уравнения (2.18) – в виде (2.10). Тогда очевидные условия $\Phi(0) = \Phi(2\pi)$ и $Z(-h/2) = Z(h/2) = 0$ дают $\lambda = l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, $B_z = 0$ и $\mu = \pi m / h$, где $m = 1, 2, 3, \dots$. В результате нормированные составляющие волновой функции ψ принимают вид

$$\Phi_l(\varphi) = \frac{\exp(i l \varphi)}{\sqrt{2\pi}}, \quad (2.22)$$

а $Z_m(z)$ определяется выражением (2.10), в котором $n_z = m$, $L_z = h$.

Окончательно для волновой функции и энергетического спектра носителей заряда в цилиндрической квантовой точке имеем:

$$\psi_{nlm}(\rho, \varphi, z) = \sqrt{\frac{2}{\pi h \rho_0^2}} \frac{J_\lambda(\zeta_{n\lambda} \rho / \rho_0)}{J_{\lambda+1}(\zeta_{n\lambda})} \exp(i l \varphi) \begin{cases} \sin(\pi m z / h), m - \text{четное}, \\ \cos(\pi m z / h), m - \text{нечетное}, \end{cases} \quad (2.23)$$

$$E_{nlm} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\zeta_{nl}^2}{\rho_0^2} + \frac{\pi^2 m^2}{h^2} \right). \quad (2.24)$$

Волновая функция ψ_{nlm} нормирована следующим образом:

$$\int_{QD} \psi_{n'l'm'}^*(\mathbf{r}) \psi_{nlm}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \quad (2.25)$$

Поскольку $J_{-l}(u) = (-1)^l J_l(u)$, то все состояния (2.23) с $l \neq 0$ дважды вырождены по энергии.

2.3. Модель сферической квантовой точки

Сферическая квантовая точка моделируется сферически симметричной потенциальной ямой. Благодаря сферической симметрии и задачи переменные в уравнении (2.10) разделяются для всех потенциалов вида $V(|\mathbf{r}|)$. Прежде всего, предположим, что потенциальная яма $V(\mathbf{r})$ обладает бесконечно высокими стенками. Будем также считать, что квантовая точка представляет собой сферу радиуса R (рисунок 2.1 б). Тогда потенциальная яма принимает вид

$$V(r) = \begin{cases} 0, r \leq R, \\ \infty, r > R. \end{cases} \quad (2.26)$$

Записанное в сферических координатах уравнение Шредингера внутри квантовой точки имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{I}^2}{r^2} \right] \psi(\rho, \vartheta, z) = E \psi(\rho, \vartheta, z), \quad (2.27)$$

где

$$\hat{I}^2 = -\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (2.28)$$

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

$$\hat{I}^2 Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = l(l+1) Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad (2.29)$$

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \vartheta) \exp(im\varphi), \quad (2.30)$$

$$l = 0, 1, 2, 3, \dots, m = -l, -l+1, \dots, l-1, l,$$

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

В соответствии с (2.27) уравнение (2.30) допускает разделение радиальной и угловых переменных. Полагая

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad (2.31)$$

для радиальной части волновой функции получаем

					ПГУ 2. 11.03.04 001 ПЗ	Лист
						31
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дат		

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R = 0, \quad (2.32)$$

где $k^2 = 2m^*E/\hbar^2$.

Легко убедиться, что конечным в нуле решением данного уравнения является функция $R_l(r) = C_l j_l(kr)$, где $j_l(u) = \sqrt{\pi/2u} J_{l+1/2}(u)$ - сферическая функция Бесселя. Постоянная C_l определяется условием нормировки, а условие $R_l(R) = 0$ определяет спектр энергии носителей. В итоге для волновых функций и энергетического спектра носителей заряда получаются следующие выражения:

$$\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{2}{R^3} \frac{j_l(\xi_{nl}r/R)}{j_{l+1}(\xi_{nl})}} Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad E_{nl} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\xi_{nl}^2}{R^2}, \quad (2.33)$$

где n , l и m - главное квантовое число, угловой момент и его проекция соответственно; $\xi_{nl} = k_{nl}R$ - n -й корень уравнения $j_l(\xi_{nl}) = 0$.

Так как $j_0(x) = \sin x/x$, то $\xi_{n0} = \pi n$. При $l \neq 0$ аналитическое выражение для ξ_{nl} отсутствует. Как и в случае с цилиндрической квантовой точкой, волновые функции (2.33) нормированы условием (2.25).

Видно, что энергия дискретных уровней обратно пропорциональна квадрату радиуса квантовой точки. Кроме того, поскольку энергия носителей заряда в квантовой точке не зависит от квантового числа m , все состояния с $l \neq 0$ вырождены по энергии с кратностью $2l+1$ [7].

2.4. Модель треугольной квантовой точки

Треугольная система с тройной квантовой точкой (*TTQD*) состоит из трёх квантовых точек, расположенных в вершинах равностороннего треугольника, что позволяет исследовать геометрическую фрустрацию, сильные электронные корреляции, явления Кондо, квантовую интерференцию, а также новые функциональности кубитов и термоэлектричества. Двумерная циклическая геометрия *TTQD*, в отличие от линейных расположений, наделяет его уникальными зависимыми от симметрии основными состояниями, высокими вырожденностями и интерференциями, а также позволяет управлять с помощью напряжений

затвора, внешних потоков и настраиваемых туннельных связей. Эта архитектура предоставляет платформу, как для фундаментальных исследований коррелированной физики электронов, так и для инженерных приложений для квантовых вычислений и наноэлектронных устройств.

TTQD обычно определяется электростатически в высокомобильном двумерном электронном газе (например, GaAs/AlGaAs) с использованием поверхностных затворов (P_1, P_2, P_3), управляющих локальными потенциалами, и "средних" затворов, настраивающих взаимодействие локальных квантовых точек.

Обобщённый гамильтониан включает в себя величину заряда внутри и между квантовыми точками, спин и условия когерентного туннелирования:

$$H = \sum_{i=1}^3 \sum_{\sigma} \varepsilon_i n_{i\sigma} + \sum_{i=1}^3 U_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_{i \neq j} \sum_{\sigma} t_{ij} d_{i\sigma} d_{j\sigma} + \sum_{I < J} U_{IJ} n_i n_j \quad (2.34)$$

В уравнении (2.34), ε_i являются локальными потенциалами (настроенными по частоте), U_i локальный кулоновский потенциал, U_{IJ} энергия взаимного заряда между точками, t_{IJ} элементы матрицы когерентного туннелирования.

В доминирующем кулоновском режиме блокады ($t_{IJ} \ll U$), общая энергия зарядки упрощается до:

$$E(n_1, n_2, n_3) = \sum_{i=1}^3 U_i Q_i^2 + \sum_{i \neq j} X_{IJ} Q_i Q_j, \quad (2.35)$$

где $Q_i = n_i - \sum_j c_{ij} V_{P_j}$ и X_{IJ} емкости между точками.

Для физики спина с низкими энергиями (при условии одного электрона на точку) проекция даёт модель Гейзенберга:

$$H_{eff} = \sum_{i < j} J_{ij} (S_i \cdot S_j - \frac{1}{4} n_i n_j) \quad (2.36)$$

и может быть дополнительно расширена, включая хиральные и спин-орбитальные связи.

Геометрическая фрустрация и многообразие вырождения заряда заключается в том, что когда энергии электрона на месте и между точками симметричны ($U_i = U$, $X_{IJ} = X$), электростатическая модель предсказывает

области сильно вырожденных основных состояний из-за геометрической («изоспинной») фрустрации. Ключевой момент - «шестикратная вырожденность», где шесть конфигураций,

$$(n_1, n_2, n_3) = (1, 0, 0), (0, 1, 0), (0, 0, 1), (1, 1, 0), (1, 0, 1), (0, 1, 1)$$

имеют одинаковые энергии зарядки, когда $U=X$ и избыточные точечные заряды настроены на $Q_i = \frac{1}{2}$.

Диаграмма устойчивости заряда демонстрирует сотовые узоры с периодическими шестикратными точками вырождения и соседними тройными точками, указывающими на колеблющуюся занятость пар точек, что создаёт прямой аналог фрустрации спинов Изинга в треугольной решётке. Границы между областями прямые, с уклонами, установленными рычажными рычагами и ёмкостями.

2.5. Модель пирамидальной квантовой точки

На рисунке 2.3 показана трёхмерная проекция конструкции, а схематический вид пирамидальной квантовой точки с ядром-оболочкой (*PCSQD*) показан на рисунке 2.4, где θ обозначает угол вершины, и h_i высота каждой пирамиды. Предполагается, что центр тяжести *PCSQD* равен $z = 0$.

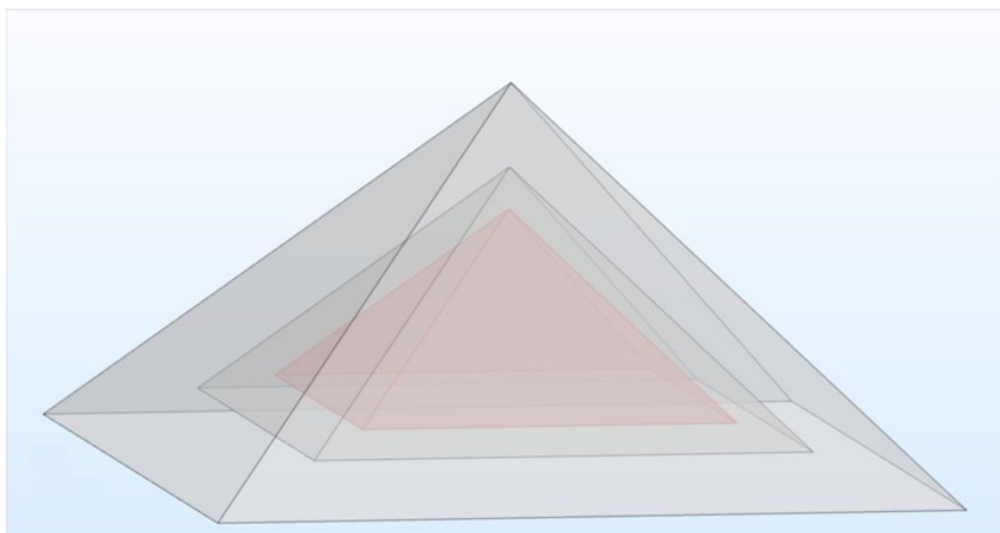


Рисунок 2.3 - 3D-вид пирамидальной квантовой точки с ядром-оболочкой

В рамках эффективной массы гамильтониан для этой задачи, в декартовых координатах, приобретает форму:

$$H = \frac{1}{2m_{w,b}^*} \left(i\hbar \vec{\nabla} + e\vec{A}^2 \right) + V(x,y,z) + eFz, \quad (2.37)$$

где e - заряд электрона, $m_{w,b}^*$ - эффективная масса (b означает область барьера или внутреннюю и внешнюю пирамиду, а w — область колодца или пирамиду в центре), а $V(x, y, z)$ — потенциал удержания $PCSQD$, равный V_0 в самой внутренней и внешней пирамиде - ноль для пирамиды в центре и ∞ вне $PCSQD$.

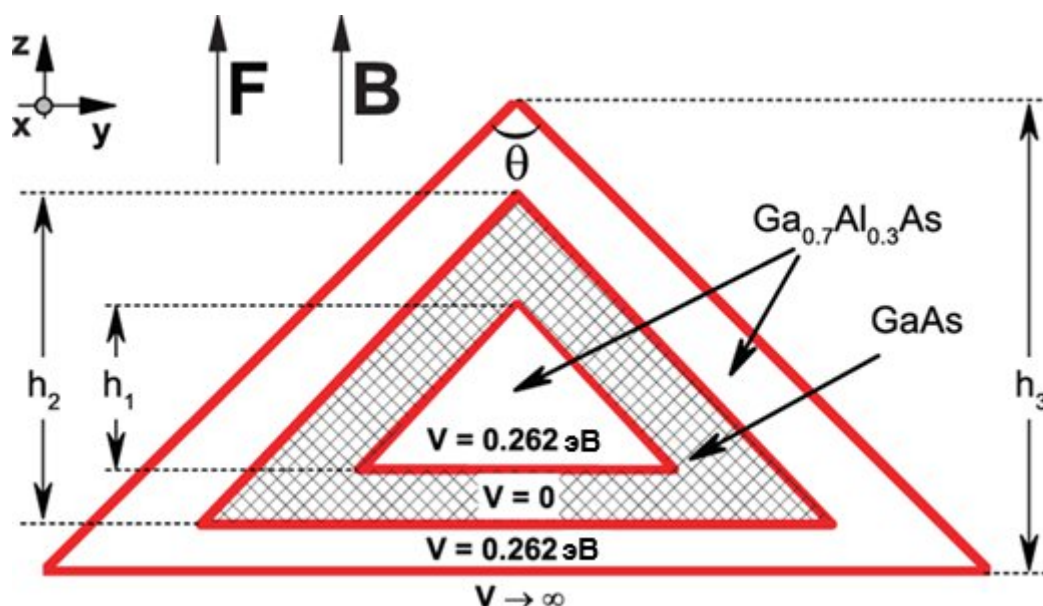


Рисунок 2.4 - Фронтальный вид пирамидальной квантовой точки с ядром-оболочкой (yz -плоскость, $x = 0$). X_i представляет высоту каждой раковины. θ - угол вершины пирамиды

Конкретные значения, выбранные для описания магнитного поля в системе, подразумевают соответствующие условия

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} * \vec{A} &= 0 \\ \vec{A} &= -\frac{1}{2} \vec{r} * \vec{B}, \end{aligned} \quad (2.38)$$

для магнитного векторного потенциала, где $\vec{B}$ правильно представляет это поле.

Расширенная форма гамильтониана (уравнение (2.37)) даёт

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_{w,b}^*} \vec{\nabla}^2 + \frac{ie\hbar}{m_{w,b}^*} \vec{A} * \vec{\nabla} + \frac{e^2}{2m_{w,b}^*} \vec{A}^2 + V(x,y,z) + eFz. \quad (2.39)$$

Используя выражение магнитного потенциала уравнения (2.38), конечная форма гамильтонового уравнения (2.39) выглядит так:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m_{w,b}^*} \vec{\nabla}^2 + \frac{ie\hbar}{m_{w,b}^*} (y, \frac{\partial}{\partial x}, -x, \frac{\partial}{\partial y}) + \frac{e^2}{2m_{w,b}^*} (x^2 + y^2) + V(x,y,z) + eFz. \quad (2.40)$$

Энергии и волновые функции связанных состояний можно получить, решая уравнение Шрёдингера:

$$H\Psi_i(x,y,z) = E_i\Psi_i(x,y,z). \quad (2.41)$$

Собственные значения и собственные состояния (уравнение (2.41)) рассчитываются с помощью программного обеспечения *COMSOL - Multiphysics* 3.3, который использует *FEM* для численного решения уравнения с частными производными. Поскольку $\Psi_i(x, y, z)$ конечна, граничное условие Дирихле означает, что любые его значения вне *PCSQD* равны нулю, то есть волновые функции равны нулю на границах между внешней пирамидой и областью бесконечного потенциала (рисунок 2.3). Для многослойных структур, подобных той, что рассмотрена в текущем исследовании, в уравнении Шрёдингера учитывается разрыв в значениях эффективной массы, за счёт применения граничных условий Бен-Даниэля-Дюка, которые удовлетворяют граничным условиям исходной задачи, в качестве базисных функций.

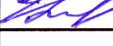
3 Теоретическое исследование энергетического спектра квантовых точек антимонида индия сферической и кубической формы

3.1 Анализ энергетического спектра квантовых точек антимонида индия при изменении температуры

Форма, как показывают исследования, также будет оказывать определенное влияние на свойства квантовых точек, помимо состава и размера. Полупроводниковые квантовые точки (КТ) представляют собой очень интересные и перспективные объекты как с научной, так и с практической точек зрения. В настоящее время на их основе уже создано достаточно большое количество различных эффективных электронных и оптоэлектронных устройств, в первую очередь лазеров и фотодетекторов. Это стало возможным благодаря их уникальным оптическим характеристикам, и особенно благодаря узкому симметричному пику флуоресценции, положение которого регулируется изменением характерного размера, состава и формы КТ.

В работе [8] проанализировано уширение уровней энергетического спектра квантовых точек антимонида индия при изменении температуры образца. Положение уровней определялось путем обработки нормированных дифференциальных туннельных вольт-амперных характеристик с использованием «кубической» модели квантовой точки. Сравнение расчетных значений расширения спектра с экспериментальными результатами показало качественное и количественное соответствие между результатами. Сделан вывод, что с уменьшением размера квантовой точки и, соответственно, увеличением энергетической щели уширение в процентах будет уменьшаться, что должно привести к повышению температурной стабильности электрофизических параметров.

ПГУ 2. 11.03.04 001 ПЗ

Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата	Теоретическое исследование энергетического спектра квантовых точек антимонида индия сферической и кубической формы	Лит.	Лист	Листов
Разраб.		Барабанов К.С.		75.08.26				
Провер.		Игошина С.Е.		15.02.20			37	85
Н. Контр.		Рыжова Т.Н.		15.02.20		гр. 22ПД1		
Утверд.								

Полученные образцы были изучены с помощью сканирующей туннельной микроскопии (*STM*) с использованием сканирующего зондового микроскопа *SOLVER Nano*, а также с помощью лазерного анализатора размера частиц *Zetasizer Nano ZS*. Методика исследования с использованием анализа нормализованных дифференциальных туннельных ВАХ описана в [17]. Кроме того, в данной работе измерения проводились при температурах образцов 23 °С и 95 °С.

В квантовых точках энергетический спектр дискретен, а распределение плотности состояний в зависимости от энергии носителя заряда (электрона) $g(\varepsilon)$ описывается с использованием функции Дирака δ и теоретически представляет собой набор бесконечно узких и высоких пиков:

$$g(\varepsilon) = \sum_i \delta(\varepsilon - \varepsilon_i), \quad (3.1)$$

где ε_i – является энергией i - уровня дискретного спектра КТ.

Дискретность энергетического спектра приводит к появлению практически атомарно узких линий в спектре люминесценции (или поглощения) квантовых точек. Прямое наблюдение узких линий для ансамбля квантовых точек невозможно из-за достаточно большого разброса параметров квантовых точек, что приводит к заметному неоднородному расширению линий.

При использовании модели кубического КТ с ребром a , значение энергии дискретного уровня может быть определено как:

$$\varepsilon_i = \frac{(\pi\hbar)^2}{2m^*} \cdot \frac{1}{a^2} \cdot (l^2 + m^2 + n^2), \quad (3.2)$$

где m^* — эффективная масса электрона в объемном материале; a — характерный размер квантовой точки (QD).

Рассеивание носителей приводит к расширению энергетических уровней и ограничению высоты пиков: $\Delta\varepsilon_i \sim \tau$, где τ — время жизни электрона в квазистационарных состояниях КТ.

Такое расширение в реальных квантовых точках происходит из-за ограниченного времени жизни носителей заряда в результате спонтанного

излучения, взаимодействия с фононами, колебаний температуры и некоторых других процессов.

Величина расширения $\Delta\varepsilon_i$ связана с величиной ε_i . Оба этих параметра влияют на форму и характер зависимости $g(\varepsilon)$.

Природа и величина уширения $\Delta\varepsilon_i$, в соответствии с концепциями, представленными авторами, в случае простых энергетических зон с квадратичным законом дисперсии, с учётом соответствующих упрощений, могут быть представлены уравнением:

$$\Delta\varepsilon_i \approx 16 \frac{\varepsilon_i^{1/2}}{\varepsilon_i} (\varepsilon_i - \varepsilon)^{3/2} \cdot \varepsilon^{-2\Delta r(2m^*(\varepsilon_i - \varepsilon)^{3/2}/\hbar)}, \quad (3.3)$$

где Δr — толщина оболочки QD .

Значение ε_i в значительной степени определяется характерным размером QD , составом и формой QD и, таким образом, в значительной степени определяется технологией производства QD .

Были изучены образцы квантовых точек из сурьмянистого индия с характерным размером 8–10 нм (рисунок 3.1). Приблизительная оценка первого уровня энергетического спектра ε_i в соответствии с уравнением (3.2) находилась в диапазоне от 0,8 до 1,5 эВ.

Локализованные уровни энергии ε_i , связанные с свойствами квантово-размерного объекта, появляются в нормализованных дифференциальных туннельных ВАХ как отдельные пики. Для анализа экспериментальных туннельных I – V характеристик, использовалась зависимость $(dI/dV)/(I/V)$ от напряжения V , поскольку метод нормализованных дифференциальных ВАХ более информативен при обработке экспериментальных данных [9]. Типичный результат для исследованных образцов показан на рисунке 3.2.

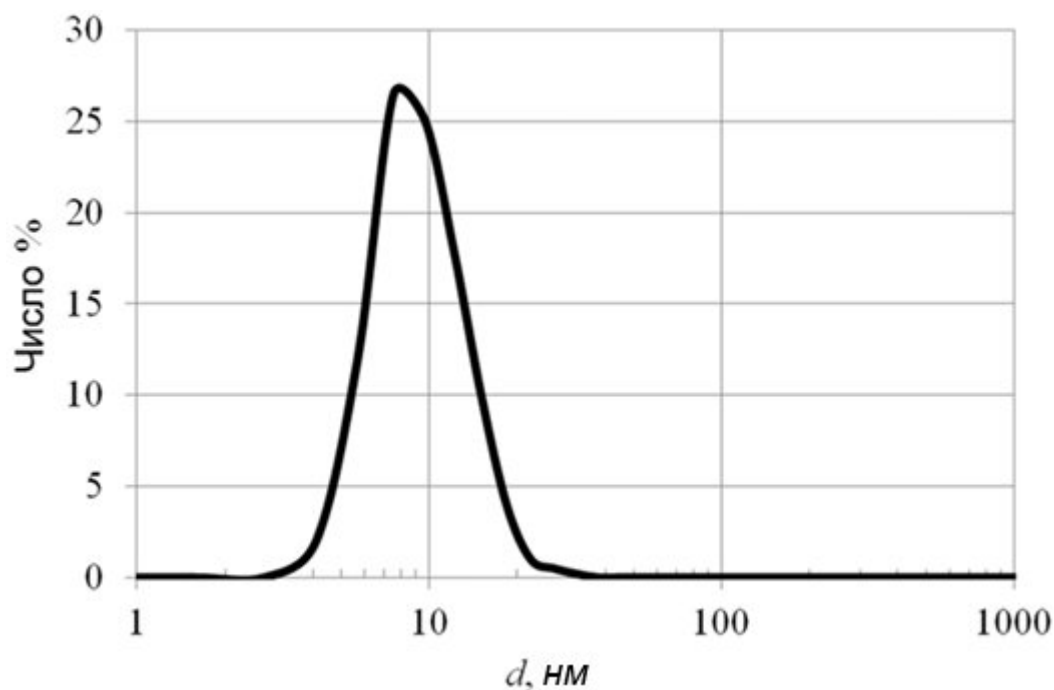


Рисунок 3.1 - Определение характерного размера квантовых точек InSb с использованием лазерного анализатора размера частиц

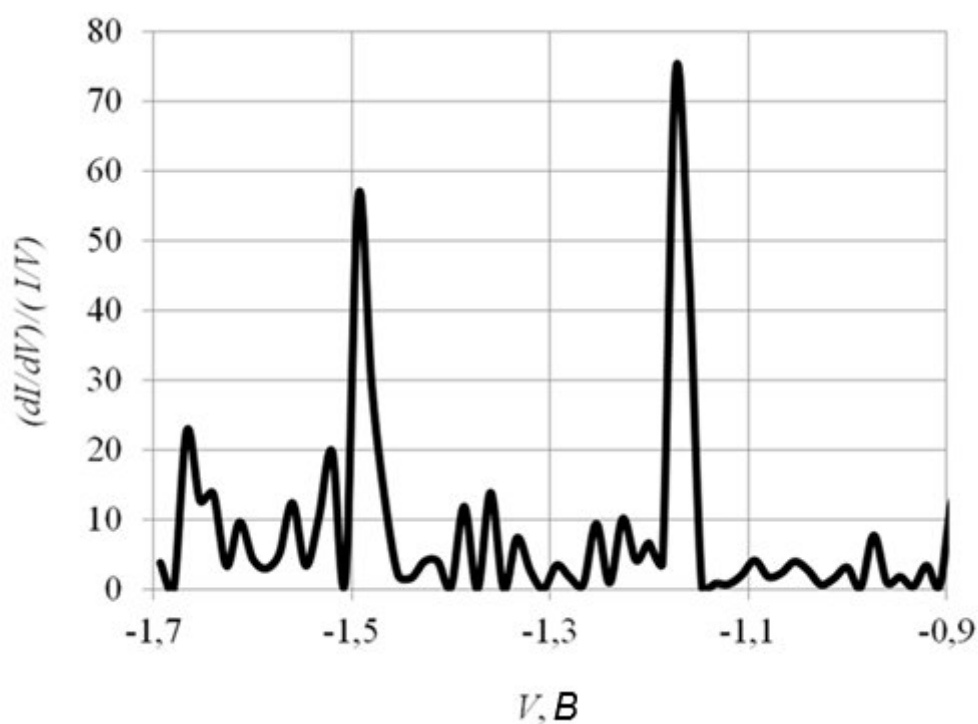


Рисунок 3.2 - Типичная нормализованная дифференциальная туннельная ВАХ квантовых точек InSb

Изменение энергии системы, например, при нагревании образцов, должно влиять на расширение $\Delta\varepsilon_i$ в соответствии с уравнением (3.3) и приводить к изменениям энергетического спектра квантовых точек.

Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дат

Типичные экспериментальные результаты нормализованных дифференциальных ВАХ показаны на рисунке 3.3.

Анализ экспериментальных результатов показал, что положение пика, соответствующего локальным энергетическим уровням квантовых точек, смещается на 3–5% (0,03 – 0,04В). Это находится в пределах точности измерений (около $2kT$), но, тем не менее, статистически воспроизводимые данные позволяют нам сделать вывод, что результаты не являются ошибкой измерения.

В соответствии с уравнением (3.3), на рисунке 3.4 показаны рассчитанные значения расширения первого энергетического уровня квантовых точек InSb при нагревании до 95 °С. В расчетах мы выбрали энергетические интервалы $2kT$ относительно ε_i . Оценка показывает, что в рассматриваемом энергетическом диапазоне, соответствующем характерным размерам квантовых точек, расширение первого уровня находится в диапазоне от 2,5 до 4,0%, в зависимости от энергии уровня (толщина оболочки квантовых точек была выбрана равной 2нм).

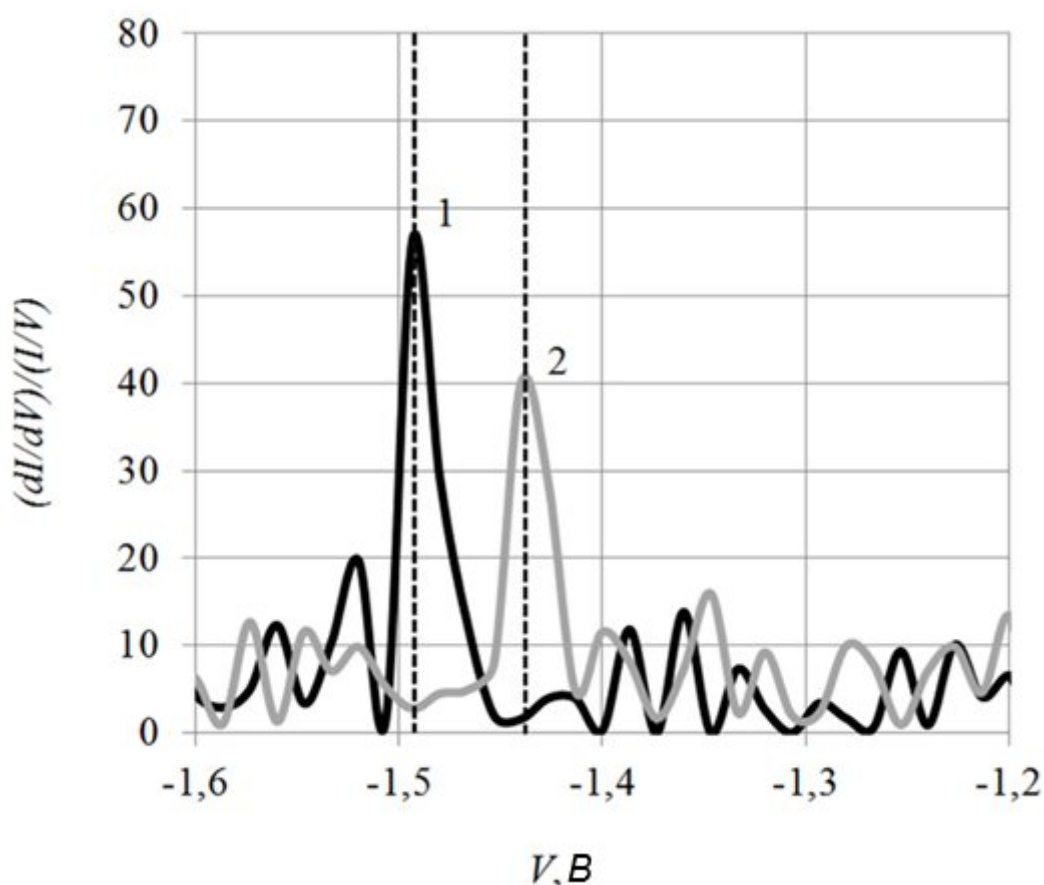
Сравнение с экспериментальными результатами (рисунок 3.3) показало довольно хорошее согласие между рассчитанным и экспериментально определённым расширением первого энергетического уровня квантовых точек InSb.

Следует отметить, что при анализе расширения энергетических уровней квантовых точек другие факторы не учитывались, например, спектр фононных состояний, взаимодействие электрона с фононами и т.д.

Очевидно, что изменение значения $\Delta\varepsilon_i$ повлияет на ширину и энергетическое положение пика флуоресценции (или поглощения) и, соответственно, на характеристики устройств с квантовыми точками в их структуре. В этом отношении анализ этого вопроса абсолютно необходим. Однако, как видно из расчета и эксперимента, расширение первого энергетического уровня КД для рассматриваемых характерных размеров и выбранного диапазона температур не превышает $2kT$ (что находится в

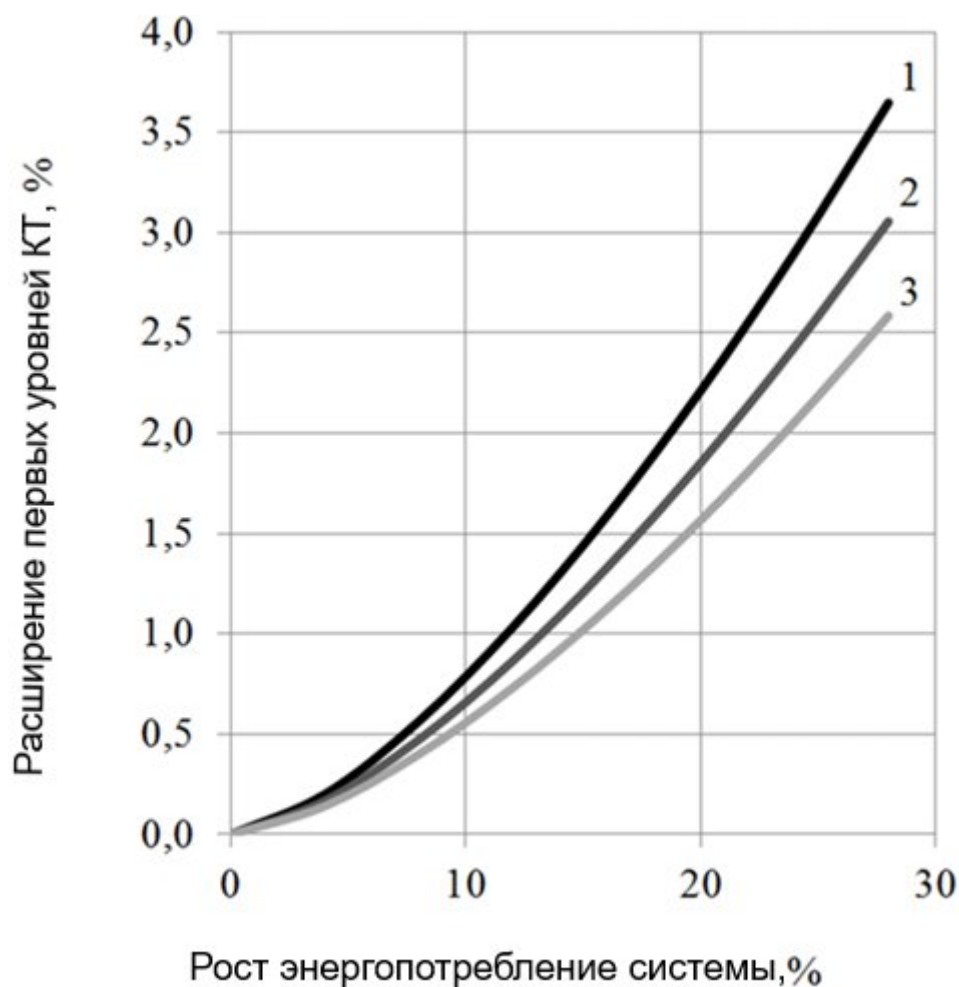
					ПГУ 2. 11.03.04 001 ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дат		41

пределах точности измерений). Следовательно, увеличение температуры в рассматриваемом диапазоне практически не влияет на энергетические характеристики КД. С уменьшением размера QD и, соответственно, увеличением энергетической щели $\varepsilon_c1-\varepsilon_v1$, расширение в процентах будет уменьшаться (рисунок 3.4), что должно дополнительно повысить температурную стабильность параметров.



температуры образцов: 1–23°C, 2–95°C

Рисунок 3.3 - Типичные нормализованные дифференциальные туннельные ВАХ квантовых точек InSb



Различные заданные значения ε_1 : 1– 0,7 эВ, 2– 1,0 эВ, 3– 1,4 эВ

Рисунок 3.4 - Вычисленные значения уширения первого уровня КТ InSb

3.2 Теоретическое сравнение энергетических спектров квантовых точек

В том случае, если энергию электрона в КТ можно представить в виде трехмерной бесконечно глубокой потенциальной ямы и использовать модель КТ кубической формы с ребром a , положение уровней энергетического спектра может быть представлено как [10]

$$\varepsilon_i = \frac{(\pi\hbar)^2}{2m^*} \frac{1}{a^2} (i_x^2 + i_y^2 + i_z^2), \quad (3.4)$$

где $i_x, i_y, i_z = 1, 2, 3 \dots$; m^* – эффективная масса электрона, a – характерный размер КТ (ребро куба)

В случае модели КТ шаровой формы с радиусом r в приближении одноэлектронного спектра в параболической яме положение уровней энергетического спектра может быть представлено как

$$\varepsilon_i = \frac{(\pi\hbar)^2}{2m^*} \frac{1}{r^2} (4n + 2l + 3), \quad (3.5)$$

где $n, l = 0, 1, 2, \dots$

Таким образом, цель проведенной работы — исследование влияния формы КТ на электрофизические свойства коллоидных квантовых точек антимолида индия.

На рисунке 3.5 и 3.6 показаны расчетные кривые первого энергетического уровня в КТ InSb в зависимости от размера КТ для кубической (3.4) и шаровой (3.5) моделей.

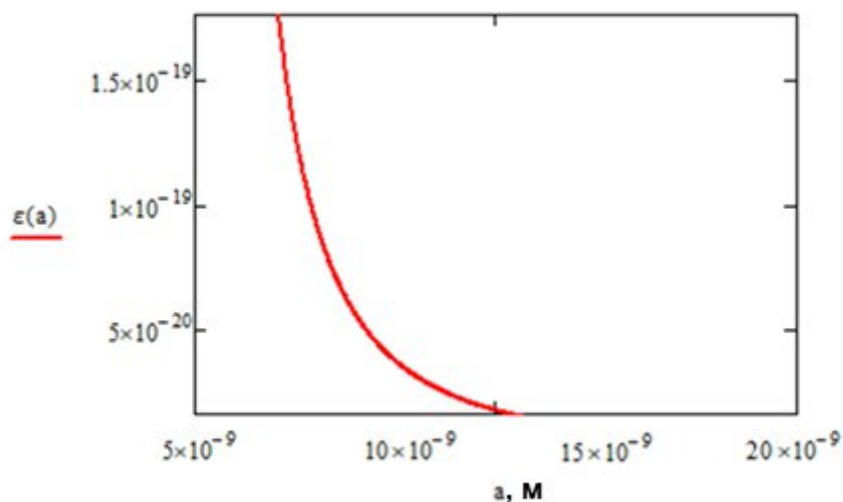


Рисунок 3.5 - Расчетные кривые первого энергетического уровня в КТ InSb в зависимости от размера КТ для кубической модели.

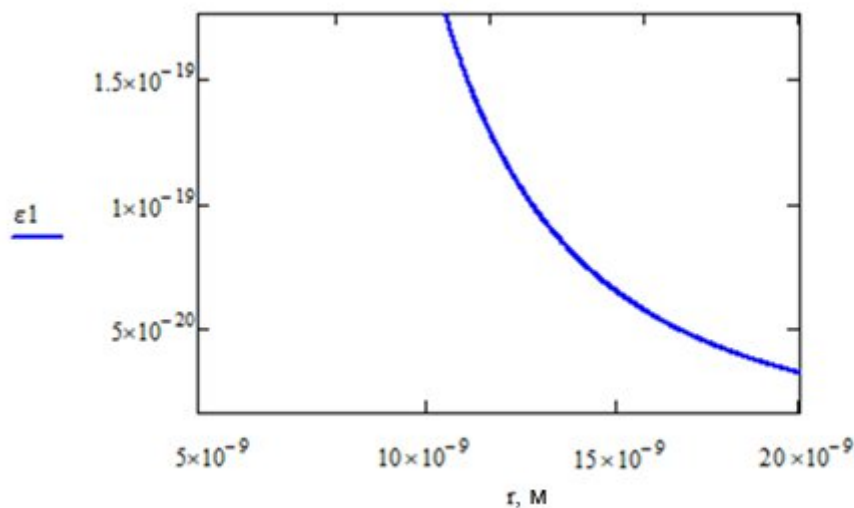


Рисунок 3.6 - Расчетные кривые первого энергетического уровня в КТ InSb в зависимости от размера КТ для шаровой модели.

3.3 Оценка размера КТ антимонида индия (InSb)

В первом приближении энергия кванта поглощенного излучения в квантовой точке может быть представлена в виде

$$\mathcal{E}_{hv} = \mathcal{E}_{g0} + \mathcal{E}_{C1} + \mathcal{E}_{v1}, \quad (3.6)$$

где $\mathcal{E}_{hv}$ – энергия максимума поглощения, $\mathcal{E}_{g0}$ – ширина запрещенной зоны объемного материала, $\mathcal{E}_{C1}$ – энергия первого уровня электронов в квантовой точке, отсчитываемая от дна зоны проводимости объемного материала, $\mathcal{E}_{v1}$ – энергия первого уровня дырки, отсчитываемая от потолка валентной зоны объемного материала. Энергия максимума с погрешностью не более $2kT$ (~ 0.05 эВ при комнатных температурах) сопоставлялась с зависимостью $\mathcal{E}_{C1}$ от характерного размера квантовой точки a (в случае кубической модели a – ребро куба, в случае шаровой модели a – это диаметр шара, $a = 2r$). По группе измерений проводилось усреднение.

Учитывая, что эффективная масса электрона в рассматриваемом материале ($0.013m_0$, где m_0 – массасвободного электрона) существенно меньше, чем эффективная масса дырки ($0.42 m_0$), в выражении (3.6) можно

пренебречь $\mathcal{E}_{v1}$ по сравнению с $\mathcal{E}_{C1}$. Используя для объемного материала InSb значение $\mathcal{E}_{g0} = 0.17$ эВ, положения максимумов на спектральной зависимости для групп КТ (1.5 мкм соответствует $\mathcal{E}_{hv} - 0.83$ эВ) и формулы (3.4), (3.5) для оценки энергии $\mathcal{E}_{C1}$, можно провести оценку характерных размеров квантовых точек.

Рассчитанные значения энергии электрона для первого уровня КТ InSb по кубической и шаровой моделям представлены на рисунках 3.7 и 3.8. Горизонтальной прямой на рисунке показано положение экспериментально определенного максимума поглощения (в эВ), вертикальными линиями — соответствующие данному максимуму размеры КТ.

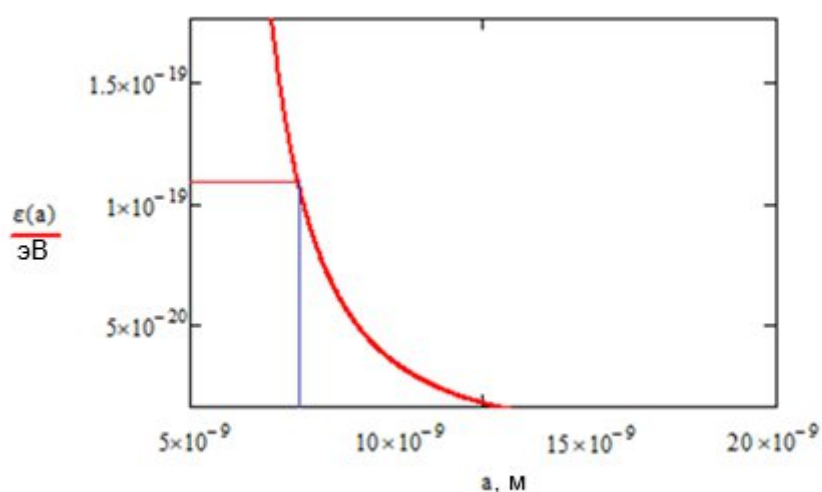


Рисунок 3.7 - Рассчитанные значения энергии электрона для первого уровня КТ InSb по кубической модели

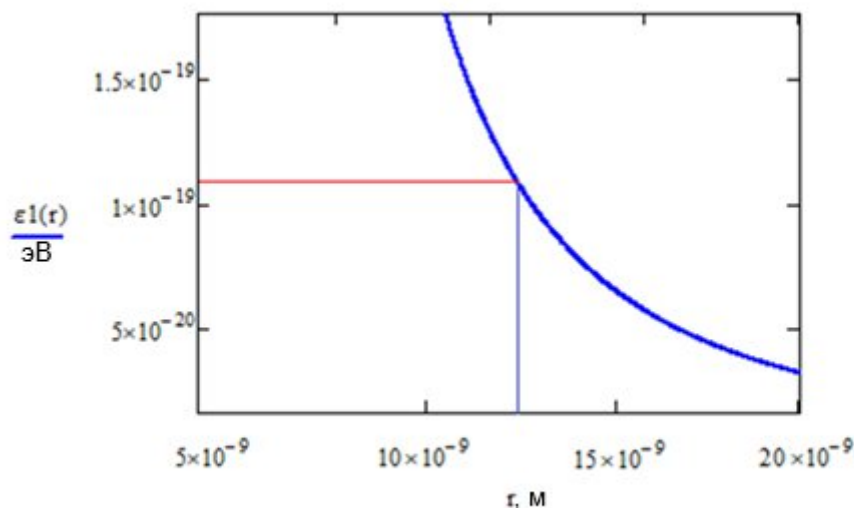


Рисунок 3.8 - Рассчитанные значения энергии электрона для первого уровня КТ InSb по шаровой модели.

Мы получили, что характерный размер КТ, определенный таким образом, составляет 8–10 нм.

3.4 Сравнительный анализ теоретической и экспериментальной зависимости

В работе получены квантовые точки антимида индия различной формы и проведен анализ их энергетического спектра.

Один из образцов, полученных в результате исследования, представлен на рисунке 3.9. Образцы были исследованы методами анализа спектральных характеристик, сканирующей туннельной микроскопии (СТМ), просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ), а также с применением лазерного анализатора размера частиц [11-13].

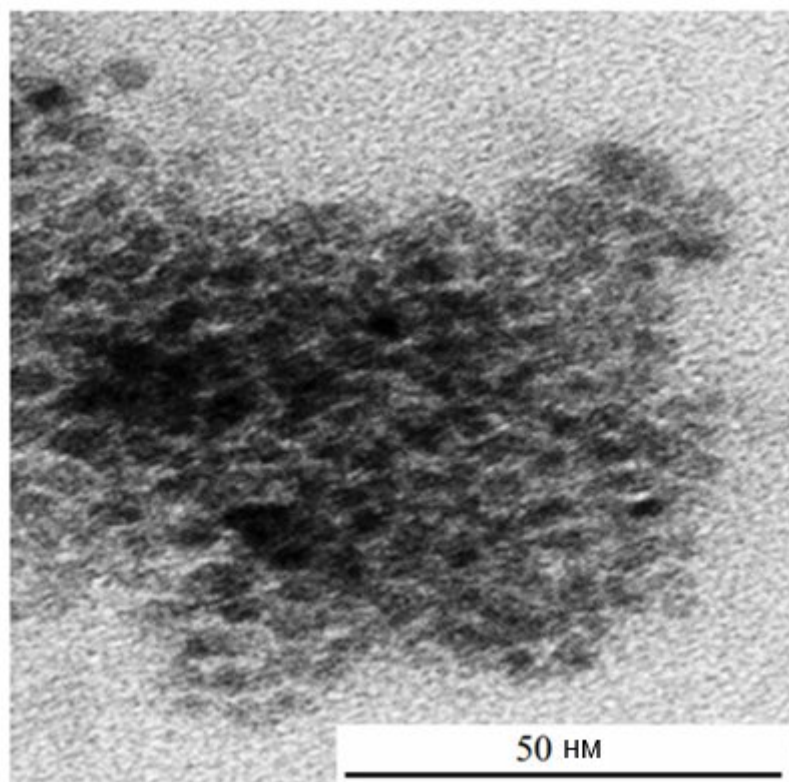


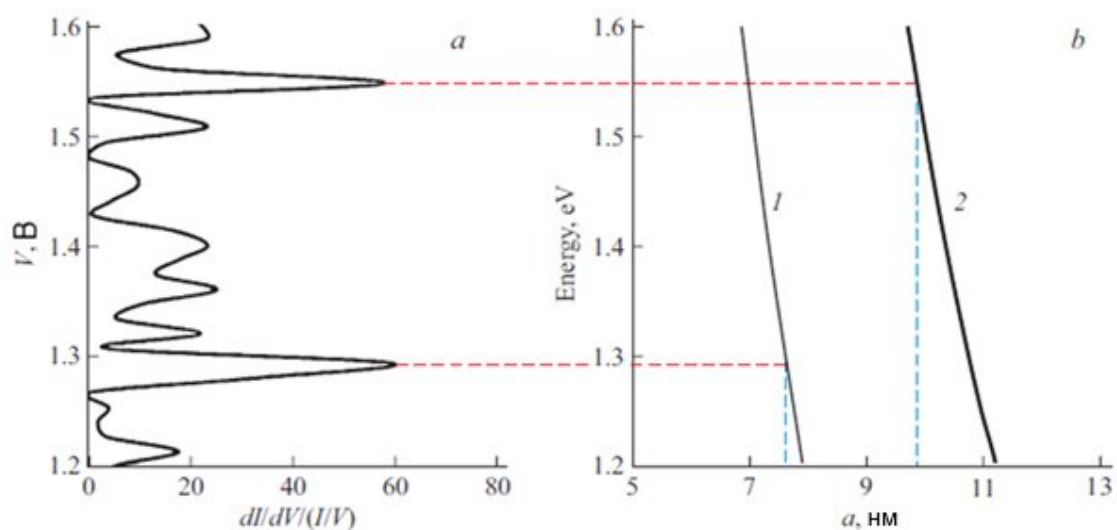
Рисунок 3.9 - Типичное ПЭМ-изображение КТ InSb

В работе проводилось сопоставление размеров частиц, полученных при анализе спектра поглощения КТ InSb с использованием различных предельных моделей: куб и шар.

Можно предположить, что реальная форма КТ при заданном размере будет заметно влиять на электрофизические свойства рассматриваемых объектов, а также на оптические свойства.

Авторы работы [14] показали это на примере, представленном на рисунке 3.10, где приведено соответствие 1-го и 2-го пиков на нормированной дифференциальной туннельной ВАХ рассчитанным зависимостям энергий первого и второго уровней электронов в КТ для кубической модели. Данные пики характерны для туннелирования электронов через уровни КТ в металлический зонд туннельного микроскопа.

Характерный размер КТ, определенный таким образом, составляет 8-10 нм. Как видно, эти данные также хорошо коррелируют с приведенными выше рассуждениями.



a) – первый уровень электронного спектра КТ InSb, *b)* – второй уровень электронного спектра КТ InSb

Рисунок 3.10 - Типичная дифференциальная туннельная ВАХ КТ InSb, в зависимости от размера, рассчитанные по кубической модели.

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

Качество освещения на рабочем месте оказывает существенное влияние на производительность труда сотрудников. Внедрение соответствующей стратегии проектирования и оптимизации освещения может способствовать повышению общей эффективности работы, что, в свою очередь, может привести к улучшению благополучия сотрудников. В настоящее время используются две основные категории освещения: традиционное и современное. В зданиях, где не проводилась реконструкция или модернизация освещения, традиционное освещение остается распространенным и влияет не только на комфорт сотрудников, но и на общее энергопотребление. Наиболее распространенными светильниками в таких помещениях были ртутные лампы низкого давления. Хотя эти лампы обеспечивали высокую светоотдачу, их конструкция часто была неудачной, что приводило к бликам и отражениям. Невозможность регулировки цветовой температуры дополнительно ухудшала качество освещения. Кроме того, эти светильники были энергонеэффективными, не имея современных систем управления [15].

В исследовании [16] анализируется история «умных зданий» с особым акцентом на три различных типа освещения: дневной свет, искусственное освещение с постоянной интенсивностью и искусственное освещение с регулируемой мощностью. В случаях использования искусственного освещения часть естественного света (за исключением ночных часов) использовалась в качестве дополнения или усиления характеристик искусственного освещения.

ПГУ 2. 11.03.04 001 ПЗ

Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата	Анализ влияния освещенности научно-исследовательской лаборатории на работу инженера-исследователя	Лит.	Лист	Листов
Разраб.		Барабанов К.С.		15.06.26				
Провер.		Игошина С.Е.		15.06.26			50	85
Н. Контр.		Рыжова Т.Н.		15.06.26		гр. 22ПД1		
Утверд.								

Результаты исследования включают проведение измерений для трех вышеупомянутых режимов освещения. Для каждого режима был определен спектральный диапазон длин волн, а также первичные фотометрические данные, сфокусированные на восприятии света и цвета.

Упрощенная схема, представленная на рисунке 4.1, обеспечивает более наглядное визуальное представление используемой методологии. Методология включает два основных этапа: во-первых, сбор данных, который включает как измерения, так и ответы на опрос; и во-вторых, обработка и анализ данных. Эта методология позволяет анализировать любое заданное пространство или рабочее место, обеспечивая тем самым широкую применимость данного исследования на практике.



Рисунок 4.1 - Схема используемой методологии

Второй этап исследования был посвящен проведению опроса по теме освещения рабочих мест. На основании результатов опроса будут определены различия в способности воспринимать свет и в субъективных ощущениях среди сотрудников.

Основная цель данного исследования заключалась в анализе освещения в рабочих помещениях интеллектуального здания. Интеллектуальное здание позволило реализовать три сценария освещения.

Общепринято считать, что естественный свет является оптимальным источником освещения для любой рабочей задачи. Однако использование

естественного света не лишено недостатков. К ним относятся изменчивость в течение рабочего дня из-за погодных условий и других факторов.

Ориентация здания позволяет разделить использование естественного света на две отдельные категории: восточная и западная стороны. Восточные части здания получают значительное количество естественного света в утренние часы, что иногда может приводить к чрезмерному ослеплению из-за положения солнца на горизонте. Напротив, западные части испытывают недостаток естественного света утром и его избыток днем. Ослепление является проблемой в основном вне стандартного рабочего времени, что делает его относительно управляемой проблемой. Однако в периоды продолжительной работы, например, сверхурочно, наличие избыточного света в этих зонах может негативно сказаться на комфорте на рабочем месте. Этот режим освещения является наиболее энергоэффективным, поскольку исключает необходимость в искусственном освещении.

На рисунке 4.2 представлен спектральный анализ условий дневного света. Значения и равномерное распределение длин волн соответствуют спектральному диапазону естественного дневного света, определенному Международной комиссией по освещению (CIE). Этот режим можно рассматривать как отправную точку, относительно которой можно оценивать характеристики искусственных условий освещения.

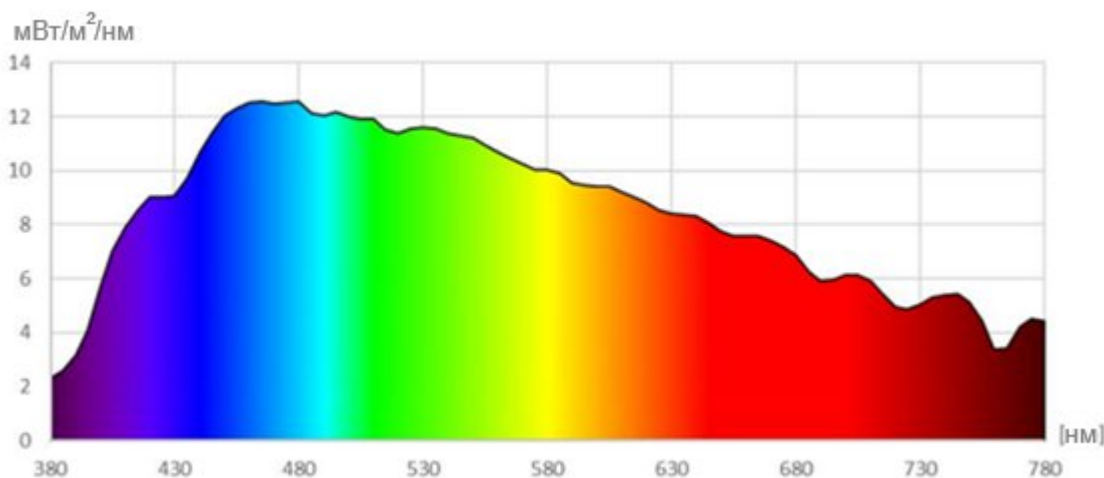


Рисунок 4.2 - Спектральный анализ дневного света

В таблице 4.1 представлены основные параметры освещения, имеющие решающее значение для оценки зрительного комфорта. Очевидно, что естественный свет является оптимальным источником света для работы, обеспечивая, на основе этих данных, общий зрительный комфорт.

Таблица 4.1 – Фотометрические значения дневного света

Освещенность	764.05лк
<i>LER</i>	223.3лм/Вт
Коррелированная цветовая температура	6633K
Насыщенность	8%
Доминирующая длина волны	489нм
Пиковая длина волны	477нм
Частота мерцания	% < 1.0
Процент мерцания	< 1.0
Индекс мерцания	% < 1.0
Индекс цветопередачи	96.6

Системы освещения с регулировкой постоянной интенсивности предназначены для автоматической настройки общей интенсивности света в заданном пространстве с использованием датчиков освещенности и интеллектуальных механизмов управления. Благодаря интеграции с естественным дневным светом, эти системы обеспечивают оптимальный визуальный комфорт для находящихся в помещении людей. Благодаря постоянному мониторингу уровня окружающего освещения и автоматической регулировке освещения в соответствии с ним, можно добиться экономии энергии до 70% по сравнению с традиционными системами освещения. Этот режим особенно хорошо подходит для офисов и других рабочих помещений, где важны высокая производительность и комфорт. Хотя он позволяет настраивать освещение индивидуально в разных зонах, его главное преимущество заключается в способности автоматически

реагировать на изменения окружающей среды, обеспечивая тем самым оптимальные условия освещения в течение дня.

Спектральный анализ источника света выявил синий сдвиг пиковых длин волн, указывающий на более высокую долю света с более короткими длинами волн. Этот сдвиг можно объяснить использованием светодиодной технологии освещения (рисунок 4.3).

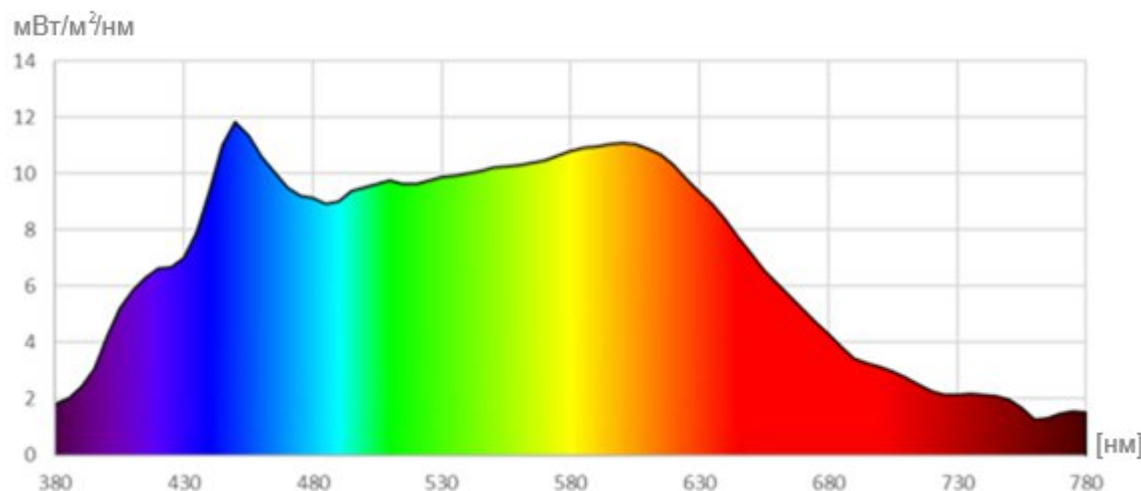


Рисунок 4.3 - Спектральный анализ освещения постоянной интенсивности

Кроме того, анализ показал увеличение доли синего света в спектре, что, вероятно, объясняется специфическими цветовыми характеристиками используемых светодиодов. Эти результаты имеют значение для здоровья и благополучия человека, поскольку доказано, что воздействие синего света влияет на циркадные ритмы и самочувствие.

Результаты измерений (таблица 4.2) показывают, что все параметры освещения в помещении изменились.

Таблица 4.2 - Фотометрические значения освещения постоянной интенсивности

Освещенность	773.9лк
<i>LER</i>	259.0лм/Вт
Коррелированная цветовая температура	5236К

Продолжение таблицы 4.2

Насыщенность	4.6%
Доминирующая длина волны	570нм
Пиковая длина волны	451нм
Частота мерцания	% < 1.0
Процент мерцания	< 1.0
Индекс мерцания	% < 1.0
Индекс цветопередачи	94.9

Наиболее заметное изменение — это изменение доминирующей длины волны со смещением в сторону красного конца спектра. Это смещение напрямую коррелирует со снижением цветовой температуры примерно до 5236К, что указывает на более теплый свет. Кроме того, снизился индекс цветопередачи, что может негативно сказаться на зрительном комфорте и эффективности выполнения задач.

В режиме электрического освещения влияние естественного дневного света в основном не используется, и система искусственного освещения работает на максимальной мощности независимо от времени суток. Такая конфигурация обычно используется в помещениях, где требуется высокий уровень освещенности для выполнения определенных задач, или людьми, которые считают предыдущие условия освещения недостаточными. Учитывая, что система искусственного освещения работает непрерывно, этот режим связан с самым высоким энергопотреблением.

Визуальный анализ рисунка 4.4 выявляет значительное изменение светового спектра.

Произошёл заметный сдвиг в распределении энергии, при этом значительная часть энергии перенаправляется в красную часть спектра. Это сопровождается значительным ослаблением в области 480 нм. Результаты спектрального анализа подтверждают наличие двух отчётливых пиков в синей и красной областях видимого спектра. Этот спектральный профиль

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

указывает на используемую светодиодную технологию, которая, как известно, производит такие характерные спектры излучения.

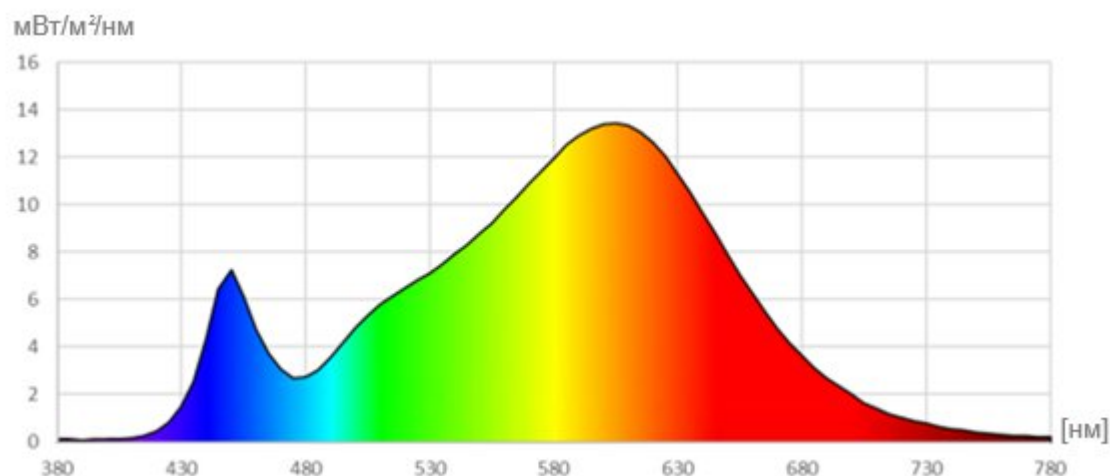


Рисунок 4.4 - Спектральный анализ мощности освещения

Заметное отклонение от условий естественного дневного света проявляется в значительном снижении цветовой температуры (ЦТ) более чем на 50%, достигнув значения 3085K (таблица 4.3). Более низкая ЦТ прочно помещает источник света в более теплую область белого цвета шкалы цветовой температуры, значительно отклоняясь от ЦТ, типичной для дневного света. Одновременно наблюдается сдвиг в сторону более длинных красных волн, что усиливает снижение ЦТ. Кроме того, индекс цветопередачи снизился до 82,5, что указывает на неспособность источника света точно воспроизводить цвета. Снижение качества цветопередачи может негативно сказаться на зрительном комфорте и производительности труда, ухудшая способность различать формы и цвета и, следовательно, снижая общую производительность труда.

Таблица 4.3 - Фотометрические значения освещения постоянной интенсивности

Освещенность	677.55лк
<i>LER</i>	327.6лм/Вт
Коррелированная цветовая температура	3085K

Продолжение таблицы 4.3

Насыщенность	49.60%
Доминирующая длина волны	581нм
Пиковая длина волны	606нм
Частота мерцания	% < 1.0
Процент мерцания	< 1.0
Индекс мерцания	% < 1.0
Индекс цветопередачи	82.5

Для оценки различных режимов освещения на рабочем месте был разработан опросник, позволяющий оценить субъективные впечатления респондентов. Опросник был разделен на четыре раздела. Первый раздел был предназначен для сбора информации, касающейся демографических характеристик респондентов. Второй раздел был предназначен для оценки существующих условий освещения. Третий раздел опросника касался восприятия респондентами влияния освещения на выполнение ими рабочих задач. В заключительном разделе опросника респондентам предлагалось внести предложения по улучшению освещения на рабочем месте.

Опрос показал высокий уровень отклика — 87% среди целевых сотрудников, что обеспечило существенный объем данных для анализа. Демографический анализ выявил преимущественно мужской состав среди сотрудников: мужчины составляли 69,6% респондентов, а женщины — 26,1%. Небольшая доля респондентов идентифицировала себя как представители других полов, но эта группа была недостаточно многочисленной, чтобы существенно повлиять на результаты. Продолжительность работы варьировалась в широких пределах, от трех месяцев до 58 лет. Эта изменчивость затрудняет получение значимых выводов на основе этой переменной. Соответственно, продолжительность работы была исключена из общего анализа. Большинство респондентов (приблизительно 90%) сообщили, что проводят от шести до восьми часов в

					ПГУ 2. 11.03.04 001 ПЗ	Лист
						57
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дат		

день за компьютером. Учитывая колебания уровня естественного освещения в течение дня, продолжительность работы за компьютером может существенно влиять на восприятие человеком освещения и его потребности в нем.

В большинстве случаев 91,3% респондентов указали, что интенсивность освещения была подходящей и достаточной. Однако это утверждение несколько противоречит тому факту, что на вопрос о том, не слишком ли яркое освещение, только 78,6% респондентов ответили отрицательно, в то время как оставшиеся 21,4% сочли освещение слишком сильным. В заключение, текущая система освещения считается подходящей и достаточной в определенные периоды дня. Однако при избытке естественного света помещение может стать чрезмерно ярким.

В ответ на вопрос о влиянии освещения на глаза, результаты были более позитивными. Большинство респондентов (69,9%) указали, что освещение воспринималось как приятное, в то время как остальные указали, что оно не было приятным или было лишь немного приятным. Такая высокая доля положительных ответов может быть объяснена текущей системой освещения, которая в основном сочетает естественный и искусственный свет, что приводит к подходящей композиции и цвету света. Эти выводы дополнительно подтверждаются следующим вопросом о напряжении и дискомфорте для глаз, где 60,9% респондентов сообщили об отсутствии проблем. При оценке текущей конфигурации освещения 82,6% респондентов указали, что существующая система считается подходящей, в то время как остальные респонденты сообщили о неудовлетворительном качестве освещения. Это можно объяснить конфигурацией системы освещения и планировкой помещения, которые представляют значительные проблемы с точки зрения освещения.

Результаты опроса показали, что большинство респондентов (87%) имели достаточный доступ к дневному свету, что указывает на корреляцию между воздействием естественного света и настроением (52,2%). Примерно

половина респондентов указала, что цвет света влияет как на их настроение, так и на работоспособность. Учитывая высокий уровень воздействия естественного света, можно сделать вывод, что освещение влияет на концентрацию внимания в рабочее время. В целом, примерно 69,6% респондентов подтвердили, что освещение влияет на их настроение и концентрацию. Эти результаты подтверждают общепринятое использование естественного света и преобладающую конфигурацию освещения, указывая на то, что само освещение оказывает значительное влияние на общее настроение и концентрацию внимания во время работы.

Одна из целей опроса заключалась в выяснении того, какие изменения респонденты хотели бы видеть реализованными. В большинстве случаев респонденты выразили удовлетворение существующими условиями освещения. Однако в трех случаях респонденты указали, что интенсивность освещения чрезмерна, и предложили оснастить систему освещения автоматическим механизмом регулировки интенсивности. В двух случаях респонденты предложили установить дополнительное освещение в рабочей зоне. Один респондент указал, что текущая интенсивность освещения недостаточна и требует увеличения.

Опрос можно считать эффективным инструментом для сбора необходимых данных. Результаты однозначно показывают, что существующая конфигурация освещения на рабочем месте является адекватной и оказывает благотворное влияние на производительность труда, настроение и концентрацию внимания сотрудников. Несмотря на вышеупомянутые благоприятные результаты, рекомендуется рассмотреть полученные дополнительные данные для дальнейшего улучшения освещения и повышения общего благополучия на рабочем месте.

Одна из целей опроса была заключена в обсуждении того, какие изменения респонденты хотели бы видеть реализованными. В большинстве случаев респонденты создавали условия для освещения. Однако в трех случаях респонденты определили, что освещение уменьшается мгновенно, и

предложили оснастить систему освещения автоматическим механизмом регулировки высоты. В двух случаях респонденты предложили установить дополнительное освещение в рабочей зоне. Один из респондентов установил, что текущая регулировка освещения недостаточна и требует увеличения.

Опрос можно считать эффективным для сбора необходимых данных. Результаты однозначно показывают, что существующее изменение освещения на рабочем месте является адекватным и оказывает благотворное влияние на производительность труда, настроение и внимание персонала. Несмотря на вышеупомянутые положительные результаты, рекомендуется изменить полученные дополнительные данные для дальнейшего улучшения освещения и изменения общего освещения на рабочем месте.

Системы освещения, сочетающие естественные и искусственные источники света, обеспечивают более адаптируемое и настраиваемое решение. Благодаря интеллектуальному управлению интенсивностью и спектральным составом искусственного света таким образом, чтобы они дополняли доступный дневной свет, эти системы могут создавать условия освещения, максимально приближенные к характеристикам естественного света. Хотя спектральные характеристики искусственного света могут отличаться от характеристик естественного дневного света, динамические системы освещения могут значительно уменьшить эти расхождения. Это утверждение подтверждается фотометрическими данными, которые показывают, что спектральные различия между динамическим освещением и естественным дневным светом менее выражены, чем различия между чистым искусственным светом и естественным дневным светом.

В свете результатов исследования можно предложить ряд рекомендаций по оптимизации освещения и повышению энергоэффективности.

Максимальное использование естественного освещения: необходимо проектировать системы освещения, оптимизируя естественное освещение для экономии энергии и улучшения самочувствия.

Автоматизация управления освещением: необходимо внедрять автоматизированные системы для регулировки интенсивности световых зависимостей от присутствия людей, времени суток и других факторов.

Включение ручного управления: необходимо предоставлять возможности ручного управления для персонализированных предпочтений в освещении.

Регулярное техническое обслуживание: необходимо проводить регулярное техническое обслуживание для обеспечения оптимальной производительности и энергоэффективности.

Качество освещения на рабочем месте оказывает значительное влияние на благополучие сотрудников. Изменяя уровни освещенности, цветовую температуру и блики, можно повысить общую производительность труда и улучшить рабочую среду.

Целью данного исследования было оценить влияние освещения на удовлетворенность работой и эффективность сотрудников. Был проведен анонимный опрос с целью объективной оценки вышеупомянутых параметров. Основная цель опроса заключалась в анализе существующих условий освещения в интеллектуальном здании и использовании полученных результатов в качестве ключевого показателя удовлетворенности сотрудников различными настройками освещения.

Результаты исследования показывают, что освещение оказывает существенное влияние на концентрацию внимания, производительность и удовлетворенность сотрудников. Первоначальные данные предоставляют оптимальную обратную связь для корректировки рабочей среды, что позволяет внедрить более совершенную систему освещения, которая должна повысить общую удовлетворенность.

Результаты опроса показывают, что примерно 70% респондентов выразили удовлетворенность текущим освещением. Однако оставшиеся 30% респондентов высказали опасения по поводу отдельных аспектов освещения,

которые часто можно устранить путем соответствующей корректировки освещения.

Дальнейшие исследования должны более глубоко изучить взаимосвязь между освещением в помещении и сотрудниками, уделяя особое внимание визуальному комфорту и влиянию освещения на циркадный ритм человека.

					ПГУ 2. 11.03.04 001 ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дат		62

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в работе проведены исследования зависимости электрофизических свойств квантовых точек от их геометрической формы. По результатам работы можно сделать следующие выводы.

Рассмотрена теоретическая модель для изучения влияния на электрофизические свойства квантовых точек, помимо состава и размера, их формы.

Проведено теоретическое исследование влияния формы квантовых точек антимонида индия на их электрофизические свойства.

Проведен анализ теоретической модели энергетического спектра квантовых точек антимонида индия кубической формы в зависимости от температуры.

Проведено сравнение различных моделей одиночной квантовой точки, таких как сферическая, цилиндрическая и кубическая КТ с ребром a .

Показано, что реальная форма КТ (шаровая и кубическая модели в предельном случае) при одном и том же характерном размере будет заметно влиять на электронный спектр рассматриваемых объектов и, скорее всего, на электрофизические и оптические свойства, что наряду с материалом и размером может рассматриваться как эффективный фактор управления.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ:

1. *Andrey A. Rempel, Oleg V. Ovchinnikov, Ilya A. Weinstein, Svetlana V. Rempel, Yulia V. Kuznetsova, Andrei V. Naumov, Mikhail S. Smirnov, Ivan Yu. Eremchev, Alexander S. Vokhmintsev, Sergey S. Savchenko, Quantum dots: modern methods of synthesis and optical properties*
2. *A. I. Mikhailova, V. F. Kabanova, and M. V. Gavrikova, Study of the Electrophysical Properties of Colloidal Indium Antimonide Quantum Dots*
3. *Cheng-Hsiang Kuo, Jyh-Ming Wu and Su-Jien Lin, Room temperature-synthesized vertically aligned InSb nanowires: electrical transport and field emission characteristics*
4. *N.D. Zhukov, M.V. Gavrikov, S.N. Shtykov, Dimensional modeling of synthesis and conductivity of colloidal quantum dots*
5. *D. V. Krylsky and N. D. Zhukov, Synthesis and Properties of Indium Antimonide Big Quantum Dots*
6. *N.A. Bert, V.N. Nevedomsky, P.A. Dement'ev, K.D. Moiseev, TEM-study of free-standing self-assembled InSb quantum dots grown on InAs surface*
7. *А. В. Федоров, И. Д. Рухленко, А. В. Баранов, С. Ю. Кручинин*
Оптические свойства полупроводниковых квантовых точек
8. *V. F. Kabanov, A. I. Mikhailov, M. V. Gavrikov, "Analysis of the energy spectrum of indium antimonide quantum dots with temperature changes",*
Наносистемы: физика, химия, математика, 12:1 (2021), 113–117
9. *A.I. Mikhailov, V.F. Kabanov, E.G. Glukhovskoy, M.I. Shishkin, M.V. Gavrikov. Nanosystems: Phys., Chem., Math., 9, 464 (2018)*
10. *В.П. Драгунов, И.Г. Неизвестный, В.А. Гридчин. Основы наноэлектроники (М., Логос, 2006).*
11. *N.E. Kaputkina, Y.E. Lozovik. Phys. Solid State, 40(11), 1935 (1998).*
12. *A.I. Mikhailov, V.F. Kabanov, N.D. Zhukov, E.G. Glukhovskoy. Nanosystems: Phys., Chem., Math., 8 (5), 596 (2017).*
13. *T. Wang. ACS Nano, 9 (1), 725 (2015).*

14. А.И. Михайлов, В.Ф. Кабанов, И.А. Горбачев, Е.Г. Глуховской. ФТП, 52 (6), 603 (2018).
15. *Douglas et al.*, 2022, *Srivastava et al.*, 2024, *Turan et al.*, 2020
16. *Pavol Belany et al*, *System Safety: Human - Technical Facility - Environment* 6 (1), 2024
17. *A.I. Mikhailov, V.F. Kabanov, N.D. Zhukov, E.G. Glukhovskoy* *Features of the energy spectrum of quantum dots indium antimonide. Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*, 2017, 8 (5), P. 596–599.

					ПГУ 2. 11.03.04 001 ПЗ	Лист
						65
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дат		

ПРИЛОЖЕНИЕ А

(обязательные)

Задание на ВКР

					ПГУ 2. 11.03.04 001 ПЗ	Лист
						66
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дат		

«Утверждаю»
зав. кафедрой НиМЭ
Пронин И.А.
(фамилия, инициалы)
«04» июня 2026 г.

З А Д А Н И Е
на бакалаврскую работу

1. Студент(ка) гр. 22ПД1 факультета информационных технологий и электроники

Направление подготовки 11.03.04. «Электроника и нанoeлектроника»

Профиль Микроэлектроника и твердотельная электроника

Барабанов Кирилл Сергеевич

(фамилия, имя, отчество)

2. Руководитель Игошина Светлана Евгеньевна

(фамилия, имя, отчество)

3. Тема бакалаврской работы Теоретическое исследование влияния формы
квантовых точек антимонида индия на их электрофизические свойства

Тема утверждена приказом ПГУ № 461а/о от «24» апреля 2026 г.

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

4.1 Построить теоретическую модель энергетического спектра квантовых точек
антимонида индия сферической и кубической формы.

4.2 Построить теоретическую модель энергетического спектра квантовых точек
антимонида индия кубической формы в зависимости от температуры.

4.3. Показать, что реальная форма квантовых точек (шаровая и кубическая модели) при
одном и том же характерном размере будет заметно влиять на энергетический спектр
рассматриваемых объектов

Объект исследований: Квантовые точки на основе антимонида индия (InSb): узкая
прямая запрещенная зона (0.17 эВ), малые эффективные массы электронов и дырок (для
электронов $0.013m_0$, большая длина волны де Бройля электрона, до 55 нм).

Методика: модель КТ кубической формы с ребром a ; модель температурной
зависимости энергетического спектра КТ кубической формы,

5. Объем и содержание основной части бакалаврской работы

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

1 Квантовые точки: специфические свойства, способы синтеза и методы исследования

1.1 Особенности энергетического спектра частиц в системах пониженной размерности

1.2 Технология получения квантовых точек

2 Модели квантовых точек

2.1 Методы анализа энергетического спектра квантовых точек	
2.2. Модель цилиндрической квантовой точки	
2.3. Модель сферической квантовой точки	
2.4. Модель треугольной квантовой точки	
2.5. Модель пирамидальной квантовой точки	
3 Теоретическое исследование энергетического спектра квантовых точек антимонида индия сферической и кубической формы	
3.1 Анализ энергетического спектра квантовых точек антимонида индия при изменении температуры	
3.2 Теоретическое сравнение энергетических спектров квантовых точек	
3.3 Оценка размера КТ антимонида индия (InSb)	
3.4 Сравнительный анализ теоретической и экспериментальной зависимости	
4 Анализ влияния освещенности научно-исследовательской лаборатории на работу инженера-исследователя	

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

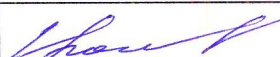
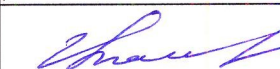
Титульный слайд	Слайд 1
2. Актуальность работы, цели, задачи	Слайд 2,3
3. Модели квантовых точек	Слайд 4-6
3. Постановка задачи: квантовые точки антимонида индия кубической и шаровой формы	Слайд 7,8
4. Теоретическое сравнение энергетических спектров квантовых точек	Слайд 9
5. Теоретический анализ энергетического спектра квантовых точек антимонида индия при изменении температуры	Слайд 10
6. Оценка размера КТ антимонида индия (InSb)	Слайд 11,12
7. Обсуждение результата	Слайд 13
8. Выводы	Слайд 14,15

6. Консультанты и содержание дополнительных разделов

6.1. _____

Консультант _____

7. Календарный график по выполнению бакалаврской работы

Наименование этапов работы	Объем работы	Срок выполнения	Подпись руководителя, консультанта
Общие сведения о квантовых точках	20%	05.06.26	
Квантование энергетического спектра носителей заряда в квантовых точках.	16%	05.06.26	
Теоретическое исследование энергетического спектра квантовых точек антимонида индия сферической и кубической в зависимости от формы и температуры	20%	07.06.26	
Анализ и сравнение энергетических спектров квантовых точек антимонида индия сферической и кубической формы	20%	07.06.26	
Анализ влияния освещенности научно-исследовательской лаборатории на работу инженера-исследователя	12%	08.06.26	
Иллюстрационная часть	5%	08.06.26	
Оформление пояснительной записки	7%	09.06.26	

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

Дата выдачи задания «04» июня 2026 г.

Задание к исполнению принял  Барабанов К.С.
подпись фамилия, инициалы
«04» июня 2026 г.

Бакалаврскую работу к защите допустить
Декан факультета  Кревчик В.Д.
подпись фамилия, инициалы
«___» _____ 2026 г.

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

(обязательно)

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

					ПГУ 2. 11.03.04 001 ПЗ	Лист
						69
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дат		

И.о. ректора Пензенского государственного
университета Васину С.М.
студента 4 курса ФИТЭ очной формы
обучения
Барабанова Кирилла Сергеевича

ЗАЯВЛЕНИЕ

Я, Барабанов Кирилл Сергеевич, студент 4 курса очной формы обучения направления подготовки 11.04.04 Электроника и наноэлектроника, Микроэлектроника и твердотельная электроника, прошу провести проверку с использованием системы «Антиплагиат.ВУЗ» магистерской выпускной квалификационной работы на тему «Теоретическое исследование влияния формы квантовых точек антимонида индия на их электрофизические свойства», выполненной мной самостоятельно, на содержание элементов плагиата.

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

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


подпись студента

11.06.26
дата

ВКР представлена на проверку 11.06.26

Руководитель ВКР  Игошина С.Е.

Протокол

проверки на оригинальность в системе «Антиплагиат.ВУЗ» выпускной бакалаврской работы на тему «Теоретическое исследование влияния формы квантовых точек антимонида индия на их электрофизические свойства»

студента 4 курса Барабанова Кирилла Сергеевича

направления подготовки 11.03.04 Электроника и нанoeлектроника,

бакалаврская программа «Нано- и микроэлектроника»

Руководитель ВКР Игошина Светлана Евгеньевна

[illegible]

Руководитель ВКР

« 11 » 06 2026 год

подпись

Игошина С.Е.

фамилия, инициалы

СПРАВКА

о результатах проверки текстового документа
на наличие заимствований

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

ПРОВЕРКА ВЫПОЛНЕНА В СИСТЕМЕ АНТИПЛАГИАТ.ВУЗ

Автор работы: Барабанов Кирилл Сергеевич
Самоцитирование
рассчитано для: Барабанов Кирилл Сергеевич
Название работы: Теоретическое исследование влияния формы квантовых точек антимоноиды индия на их электрофизические свойства
Тип работы: Выпускная квалификационная работа
Подразделение: Кафедра "Нано- и микроэлектроника"

РЕЗУЛЬТАТЫ

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

СОВПАДЕНИЯ		42.48%	СОВПАДЕНИЯ		42.48%
ОРИГИНАЛЬНОСТЬ		57.52%	ОРИГИНАЛЬНОСТЬ		57.52%
ЦИТИРОВАНИЯ		0%	ЦИТИРОВАНИЯ		0%
САМОЦИТИРОВАНИЯ		0%	САМОЦИТИРОВАНИЯ		0%
ИИ-КОНТЕНТ		16.52%			

ДАТА И ВРЕМЯ КОРРЕКТИРОВКИ: 11.06.2026 10:20

ДАТА ПОСЛЕДНЕЙ ПРОВЕРКИ: 11.06.2026

Структура документа: Проверенные разделы: основная часть с.19-60, содержание с.2, введение с.3-19, выводы с.61
Модули поиска: Шаблонные фразы; PubMed; СМИ России и СНГ; Профессиональная лексика. Медицина; Рувики; Перефразирования по базе публикаций открытого доступа PubMed; Медицина; Коллекция НБУ; Сводная коллекция научных работ Беларуси; Переводные заимствования; Профессиональная лексика. АПК и биотех; СПС ГАРАНТ: нормативно-правовая документация; Перефразирования по коллекции IEEE; Профессиональная лексика. Юриспруденция; Цитирование; IEEE; Перефразирования по Коллекции открытых публикаций международных издательств; Кольцо вузов; Сводная коллекция ЭБС; Патенты СССР, РФ, СНГ; ИПС Адилет; Перефразированные заимствования по коллекции Интернет в английском сегменте; Публикации eLIBRARY; Коллекция открытых публикаций международных издательств; Публикации РГБ; СПС ГАРАНТ: аналитика...

Работу проверил: Головяшкин Алексей Николаевич

ФИО проверяющего

Дата подписи:



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

(обязательно)

Презентация к ВКР

					ПГУ 2. 11.03.04 001 ПЗ	Лист
						71
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дат		



МИНОБРНАУКИ РФ
ПЕНЗЕНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
Кафедра «Нано и микроэлектроника»

Бакалаврская работа
на тему:

«Теоретическое исследование влияния формы квантовых точек антимонода индия на их электрофизические свойства»

Направление подготовки 11.03.04 «Электроника и наноэлектроника»

Выполнил: студент группы
22ПД1

Барабанов К.С.

Руководитель: к.ф.-м.н

Игошина С.Е.

Пенза,
2026г.

Актуальность работы

Обусловлена:

- несистематизированным результатом исследования свойств наноструктур на основе полупроводниковых соединений в зависимости от формы;
- использованием наноструктурированных материалов для создания устройств нано- и микроэлектроники нового поколения с заранее заданными параметрами.

Постановка задачи

Объект исследования:

Квантовые точки на основе антимонида индия(InSb)

Цель проведенной работы:

- Исследование влияния формы КТ на электрофизические свойства квантовых точек антимонида индия;
 - Провести анализ теоретической модели энергетического спектра квантовых точек антимонида индия кубической формы в зависимости от температуры
-
- В последние годы интерес к InSb возобновился как к материалу, перспективному для наноэлектроники и для создания транзисторов нового поколения;
 - Выявлена лидирующая роль InSb среди соединений типа $A_{III}B_V$ при исследовании возможности использования полупроводниковых нанопроволок в качестве рабочего материала в устройствах для термоэлектрического преобразования энергии

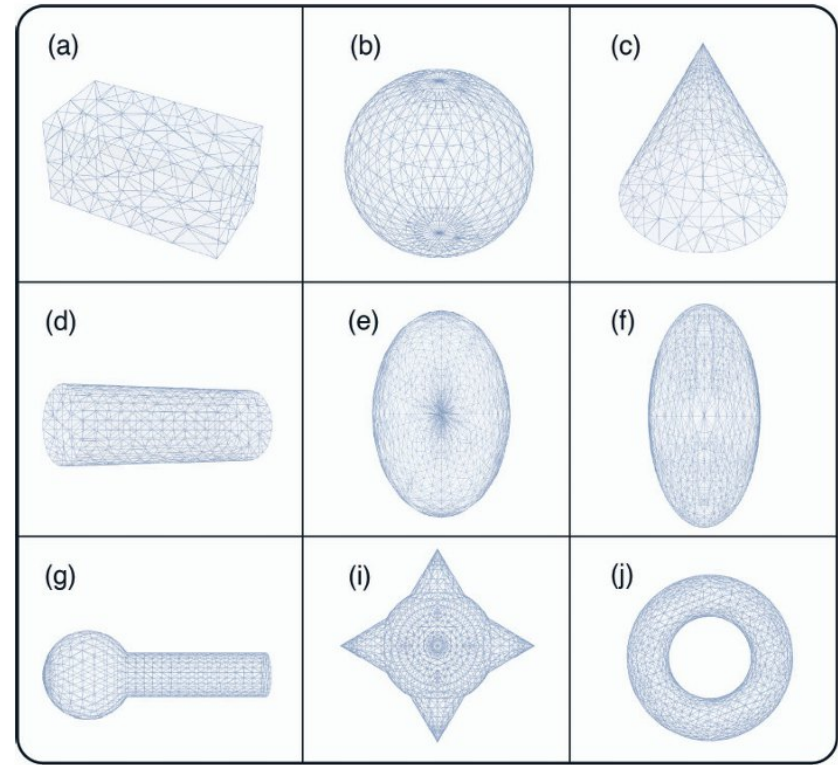
Возможные модели квантовых точек

Постановка задачи

Постановка граничных условий задаётся потенциалом $V(x,y,z)$

$$V(x,y,z) = \begin{cases} V(\textit{inside}) = 0 \\ V(\textit{outside}) = \infty \end{cases}$$

Это подразумевает, что частица заключена в КТ и не может выйти за пределы структуры.



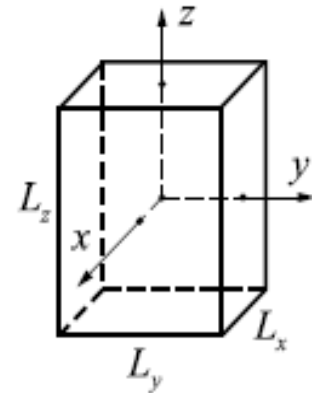
Модель прямоугольной потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками

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

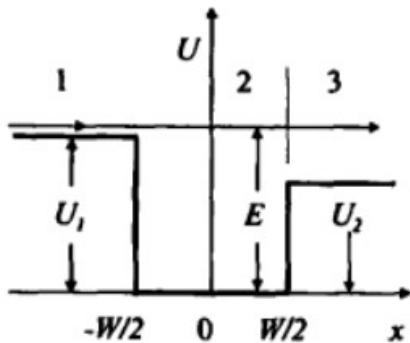
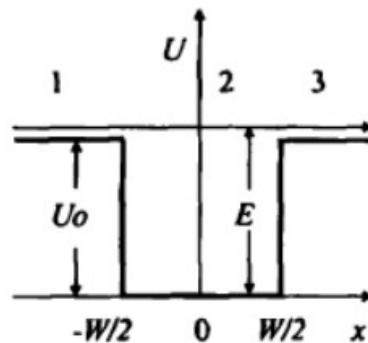
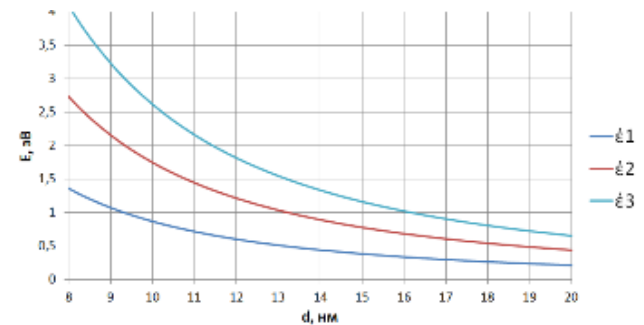
$$\psi_{n_x n_y n_z}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}} \psi_{n_x}(x) \psi_{n_y}(y) \psi_{n_z}(z),$$

$$\psi_{n_u}(u) = \sqrt{\frac{2}{L_u}} \begin{cases} \sin(k_{n_u} u), & n_u - \text{четное}, \\ \cos(k_{n_u} u), & n_u - \text{нечетное}, \end{cases}$$

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



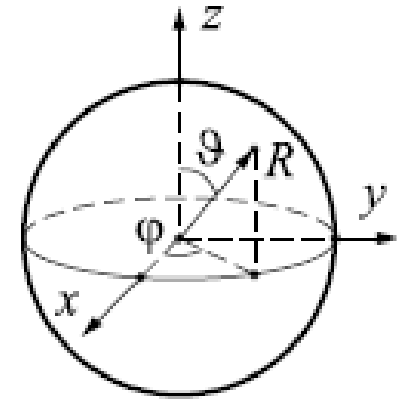
- Энергетическая диаграмма прямоугольной потенциальной ямы



Модель сферически симметричной потенциальной ямы

- Рассмотрим сферически симметричную квантовую точку радиуса a

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

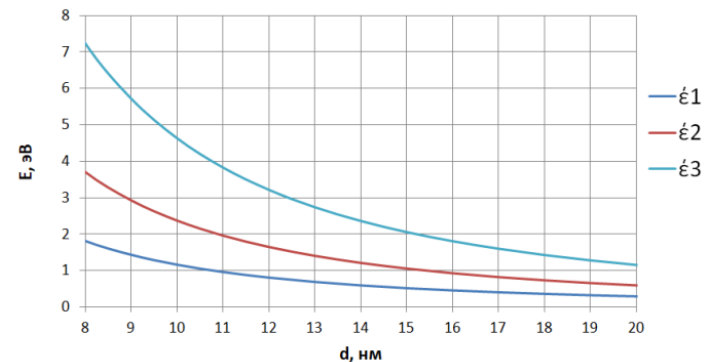


$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{\hat{l}^2}{r^2} \right] \psi(r, \vartheta, \varphi) = E \psi(r, \vartheta, \varphi)$$

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

- Ква

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



Квантовые точки антимонида индия шаровой формы

- Квантовая точка с трехмерным параболическим удерживающим потенциалом $U(r, \theta, \varphi) = \alpha r^2$,
- Одноэлектронный энергетический спектр

$$\varepsilon_i = \frac{(\pi\hbar)^2}{2m^*} \frac{1}{r^2} (4n + 2l + 3),$$

- где $n, l = 0, 1, 2, \dots$

Квантовые точки антимонида индия кубической формы

- Внутри потенциальной ямы уравнение Шредингера

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

- Энергетический спектр

$$\varepsilon_i = \frac{(\pi\hbar)^2}{2m^*} \frac{1}{a^2} (i_x^2 + i_y^2 + i_z^2)$$

m — эффективная масса электрона в объемном материале; a — характерный размер квантовой точки (QD).

Теоретическое сравнение энергетических спектров квантовых точек

- Энергия кванта поглощенного излучения в квантовой точке

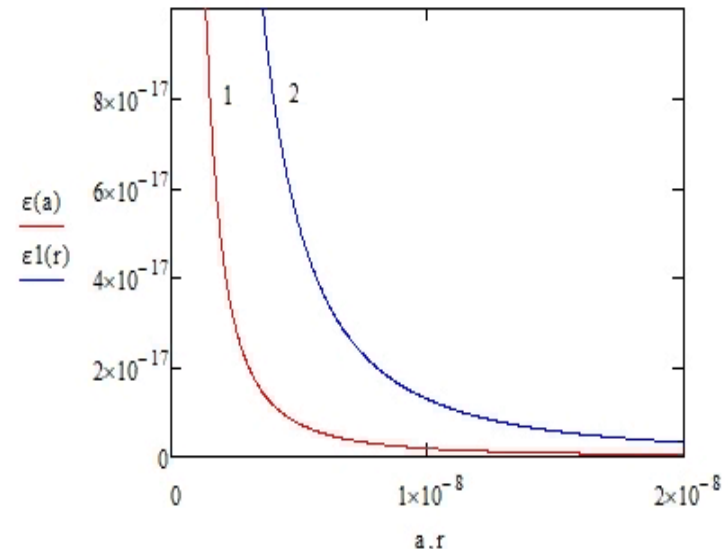
$$\varepsilon_{h\nu} = \varepsilon_{g0} + \varepsilon_{c1} + \varepsilon_{v1}$$

- Ширина запрещенной ε_{g0} зоны объемного материала InSb

$$= 0.17 \text{ эВ}$$

ε_{c1} - энергия первого уровня электронов в квантовой точке, отсчитываемая от дна зоны проводимости объемного материала;

ε_{v1} - энергия первого уровня дырки, отсчитываемая от потолка валентной зоны объемного материала.



Расчетная кривая первого энергетического уровня в КТ InSb в зависимости от размера КТ для (1) кубической и (2) шаровой модели

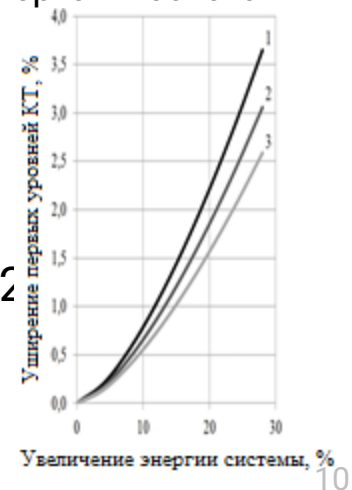
Анализ энергетического спектра квантовых точек антимонида индия при изменении температуры

- Рассеивание носителей приводит к уширению энергетических уровней $\Delta\varepsilon$: $\Delta\varepsilon \propto \tau$, где τ — время жизни электрона в квазистационарных состояниях КТ

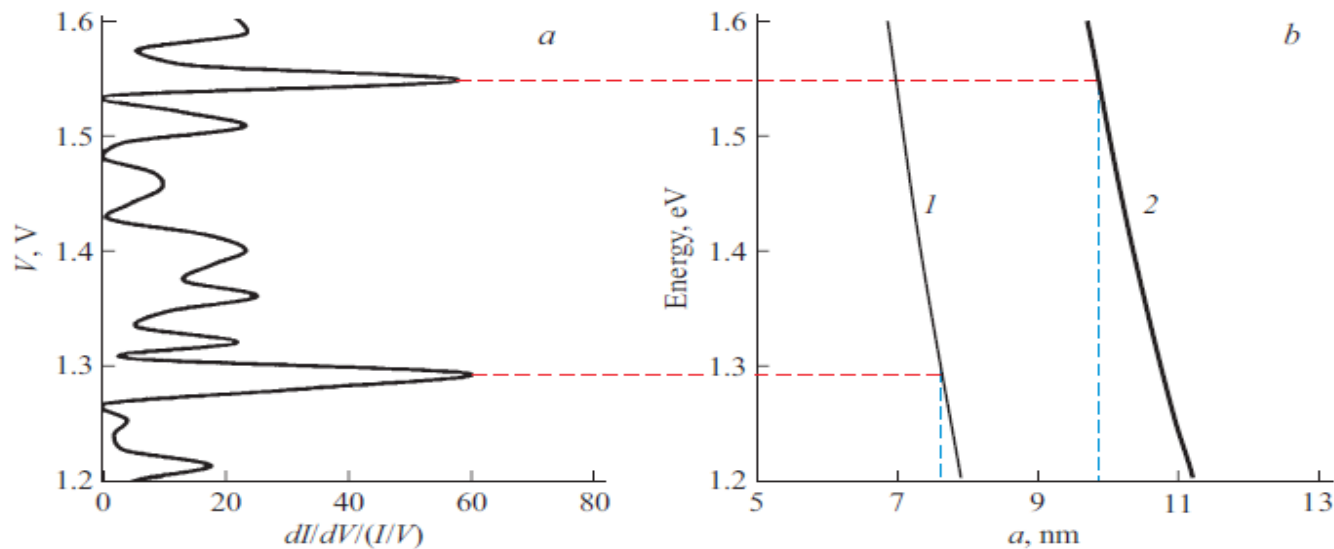
$$\Delta\varepsilon_i \approx 16 \frac{\varepsilon_i^{1/2}}{\varepsilon_i} (\varepsilon_i - \varepsilon)^{3/2} \cdot \varepsilon^{-2\Delta r(2m^*(\varepsilon_i - \varepsilon)^{3/2}/\hbar)}$$

- Значение параметра « ε_i » в значительной степени определяется характерным размером квантовых точек, их составом и формой, и, следовательно, в значительной степени определяется технологией производства квантовых точек;
- Повышение температуры в рассматриваемом диапазоне практически не влияет на энергетические характеристики квантовой точки;
- При уменьшении размера квантовой точки и, соответственно, увеличении энергетического зазора «с1» - «v1», процентное уширение энергетического спектра будет уменьшаться, что должно еще больше повысить температурную стабильность параметров;

Увеличение температуры в рассматриваемом диапазоне (2 - 95C°) практически не влияет на энергетические характеристики КТ

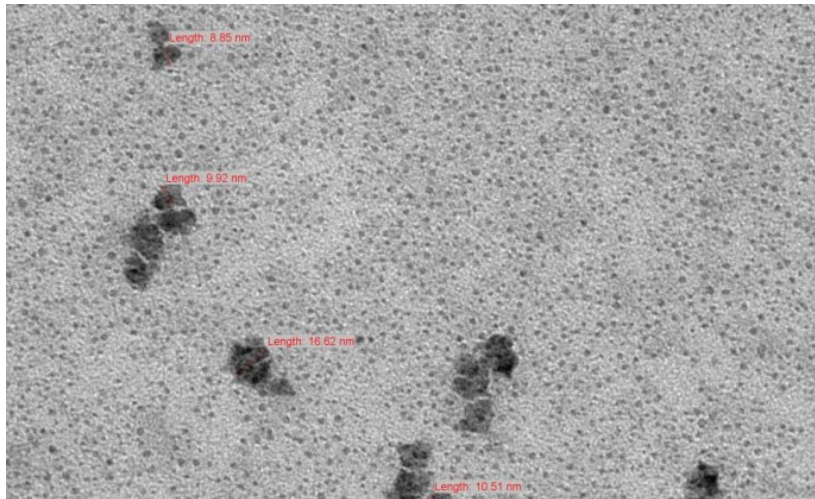
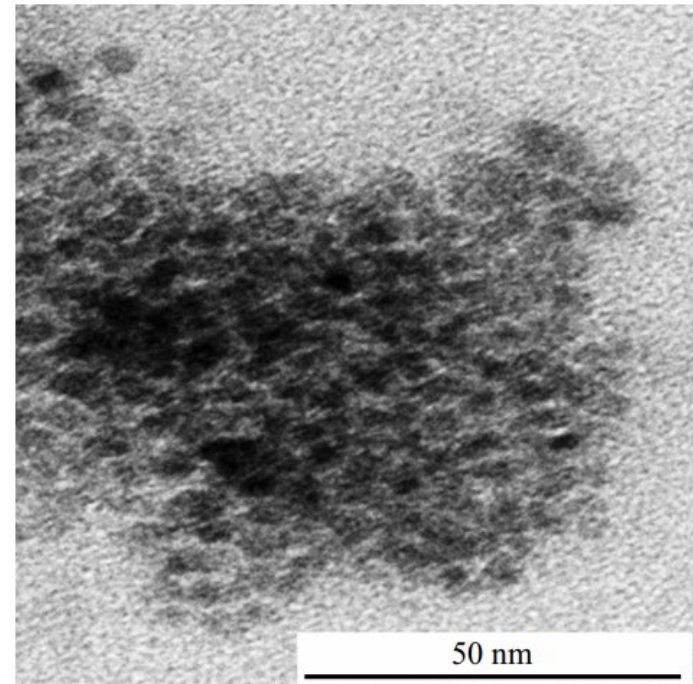


Соответствие 1-го и 2-го пиков на нормированной дифференциальной туннельной ВАХ рассчитанным зависимостям энергий первого и второго уровней электронов в КТ для кубической модели



Типичная дифференциальная туннельная ВАХ КТ InSb, в зависимости от размера, рассчитанные по кубической модели.

Реальные размеры квантовых точек InSb, снятых с помощью средств электронной микроскопии



- СНГИУ им.Чернышевского, каф. Физики полупроводников.
Оборудование: Malvern Zetasizer Nano (Malvern InstrumentsLtd, England)

Обсуждение результатов

- При сравнении расчетных моделей и реальных данных, было получено, что наибольшей достоверностью обладает модель кубической КТ, т. к. она обладает наибольшим соответствием с реальными данными: 11-12 нм теоретические, и 11-12 нм реальных.

Сферическая модель дала результаты меньшей точности: 13-14 нм против 11-12 нм

Выводы

- Рассмотрена теоретическая модель для изучения влияния на свойства квантовых точек, помимо состава и размера, их формы.
- Предложена модель одиночной КТ с трехмерным параболическим ограничивающим потенциалом и модель кубической КТ с ребром a .
- Показано, что реальная форма КТ (шаровая и кубическая модели в предельном случае) при одном и том же характерном размере будет заметно влиять на электронный спектр рассматриваемых объектов и, скорее всего, на электрофизические и оптические свойства, что наряду с материалом и размером может рассматриваться как эффективный фактор управления.

Выводы

- Уширение первого энергетического уровня квантовых точек, которое является наиболее важным в практических приложениях, для рассматриваемых характерных размеров не превышает $2kT$ (что находится в пределах точности измерения), т.е. изменение температуры не оказывает существенного влияния на изменение энергетических характеристик квантовых точек в рассматриваемом температурном диапазоне и должно привести к повышению температурной стабильности параметров электронных и оптоэлектронных устройств, использующих квантовые точки InSb.