

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

Факультет
информационных технологий
и Электроники
наименование факультета

Кафедра
Нано – и микроэлектроника
наименование кафедры

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

Профиль Микроэлектроника и твердотельная электроника
наименование профиля

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

ПенГУ02 11.03.04. 003ПЗ
обозначение, присваиваемое кафедрами

на тему

Теоретическое исследование энергетического спектра наноконструкций на основе арсенида
галлия
тема бакалаврской работы

Студент группы 2011Д1
номер группы

10.06.24 Голубева И.С.
подпись, дата фамилия, имя, отчество

Руководитель доцент
должность

10.06.24 Игошина С.Е.
подпись, дата фамилия, имя, отчество

ПГУ, кафедра НиМЭ
наименование организации

Нормоконтролер ст. преподаватель
должность

10.06.24 Рыжова Т.П.
подпись, дата фамилия, имя, отчество

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

Заведующий кафедрой

10.06.24 Пронин И.А.
подпись, дата фамилия, имя, отчество

Работа защищена с оценкой удовл. (протокол ГЭК от 18.06.24 № 4)

Секретарь ГЭК

18.06.24 Вольсков А.А.
подпись, дата фамилия, имя, отчество

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	4
1 Литературный обзор	5
1.1 Полупроводниковые нанокристаллы и их свойства	5
1.2 Синтез коллоидных нанокристаллов	11
1.3 Влияние технологических параметров на размеры нанокристаллов	13
1.4 Способы синтеза наночастиц различной морфологии	15
1.5 Роль поверхностных состояний нанокристаллов	18
1.6 Структуры с квантовыми точками/квантовыми ямами	21
2 Математические модели квантовых точек	23
2.1 Сферические квантовые точки	23
2.2 Цилиндрические квантовые точки	25
2.3 Теоретическое сравнение энергетических спектров квантовых точек	27
3 Теоретическое исследование электрофизических свойств наночешуек на основе полупроводниковых соединений	28
3.1 Общие сведения	28
3.2 Моделирование электронной структуры и физических процессов в полупроводниковых наночешуйках	32
3.3 Результаты и выводы	37
3.4 Выводы	51
4 Анализ влияния освещенности научно-исследовательской лаборатории на работу инженера-исследователя	53
Заключение	64
Список использованных источников	65
Приложение А. Задание на выпускную квалификационную работу	67
Приложение Б. Результат проверки работы на оригинальность	71
Приложение В. Презентация ВКР	73

РЕФЕРАТ

Пояснительная записка содержит 73 страницы машинописного текста, включает 19 рисунков, 60 формул, список использованных источников из 16 наименований и 3 приложения.

Ключевые слова: квантовые точки, энергетический спектр, квантовая яма, уравнение Шредингера, теоретическое исследование, нанокристалл, сферическая форма, арсенид галлия.

Объект исследования: Квантовые точки на основе арсенида галлия (AsGa).

Цель проведенной работы: Теоретическое исследование электрофизических свойств наночешуек на основе арсенида галлия.

Актуальность работы обусловлена перспективами использования ультратонких наночешуек на основе арсенида галлия для создания устройств нано- и микроэлектроники нового поколения с заранее заданными параметрами.

					ПГУ 2. 11.03.04. 003 ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата		3

ВВЕДЕНИЕ

Ультратонкие квантовые точки наночешуек теоретически изучаются как инновационные наноматериалы, дающие выдающиеся результаты в различных сильных полях. В данной работе происходит исследование поверхностных свойств электрона, удерживаемого в сферических ультратонких квантовых точках в присутствии центральной или нецентральной донорной примеси. Таким образом, появилась новая модель, которая позволяет исследовать различную геометрию наночешуек путем изменения сферических координат наночешуек (R , α , ϕ). В рамках модели потенциала бесконечного ограничения исследование этих наноструктур проводится в приближениях эффективной массы и параболической зоны. Разрешение уравнения Шрёдингера осуществляется методом конечных разностей, который позволяет получить собственные значения и волновые функции электрона, удерживаемого на поверхности наночешуек. Через энергию доноров и электронов полностью обсуждены транспортные, оптоэлектронные и поверхностные свойства наноструктур в соответствии с их практической значимостью. Результаты показали, что эти энергии более значительны в области мелких наночешуек за счет изменения радиуса, а также полярного и азимутального углов. Важный вывод показывает, что энергия связи в основном состоянии сильно зависит от геометрии наночешуек, несмотря на одинаковую поверхность.

				ПГУ 2. 11.03.04. 003 ПЗ		
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Введение	Лист	Листов
Разраб.	Голубева		<i>М.А. Голубева</i>			
Провер.	Игошина		<i>И.А. Игошина</i>		4	73
Н. Контр.	Рыжова		<i>Н.А. Рыжова</i>		Гр 20ПД1	
Утверд.						

1 Литературный обзор

1.1 Полупроводниковые нанокристаллы и их свойства

Квантовая точка представляет собой полупроводниковую наноразмерную систему («искусственный атом»), электронными состояниями которой можно управлять с помощью внешних полей. Квантовые точки по своим размерам больше традиционных для химии молекулярных кластеров (~ 1 нм при содержании не больше 100 атомов). Квантовые точки объединяют физические и химические свойства молекул с оптоэлектронными свойствами полупроводников (материал, который имеет электропроводность между проводником и диэлектриком). Кремний, германий и графит некоторые примеры полупроводников.

Полупроводниковые приборы являются основой современной электроники, включая транзисторы, светоизлучающие диоды, солнечные батареи и т. д. В полупроводниках запрещенной зоной называют область энергии, отделяющую полностью заполненную электронами валентную зону от незаполненной зоны проводимости. В этом случае шириной запрещенной зоны называется разность энергий между дном (нижним уровнем) зоны проводимости и потолком (верхним уровнем) валентной зоны. Квантово-размерные эффекты играют важную роль в оптоэлектронных свойствах квантовых точек.

Энергетический спектр квантовой точки отличается от объемного полупроводника. Электрон в нанокристалле ведет себя как в трехмерной потенциальной «яме» (ограниченная область пространства с пониженной потенциальной энергией частицы). Энергетический спектр квантовой точки зависит от ее размера. При переходе носителей заряда между энергетическими уровнями в квантовой точке может излучаться или поглощаться фотон.

Частотами переходов, т.е. длиной волны поглощения или люминесценции,

				ПГУ 2. 11.03.04. 003 ПЗ			
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата			
Разраб		Голубева	<i>М.А.</i>				
Провер		Израилица					
					Литературный обзор		
					Лист	Лист	Листов
						5	13
					Гр.20ПД1		
И. Контр		Рыжова	<i>Н.В.</i>	07.06.14			
Утверд							

легко управлять, меняя размеры квантовой точки. Поэтому квантовые точки иногда называют «искусственными атомами». В терминах полупроводниковых материалов это можно назвать возможностью контроля эффективной ширины запрещенной зоны. Ширины запрещенной зоны в полупроводниках называют область энергии, отделяющую полностью заполненную электронами валентную зону от незаполненной зоны проводимости. Валентная зона – энергетическая область разрешенных электронных состояний в твердом теле, заполненная валентными электронами. Зона проводимости – первая из незаполненных электронами зон – диапазонов энергии, где могут находиться электроны, в полупроводниках и диэлектриках (рисунок 1).

Электроны из валентной зоны, преодолев запрещенную зону, при ненулевой температуре попадают в зону проводимости и начинают участвовать в проводимости, т.е. перемещаться под действием электрического поля. Ширина запрещенной зоны – разность энергий между дном зоны проводимости и потолком валентной зоны. Другими словами, ширина запрещенной зоны – это минимальная энергия, необходимая для перехода электрона из валентной зоны в зону проводимости.

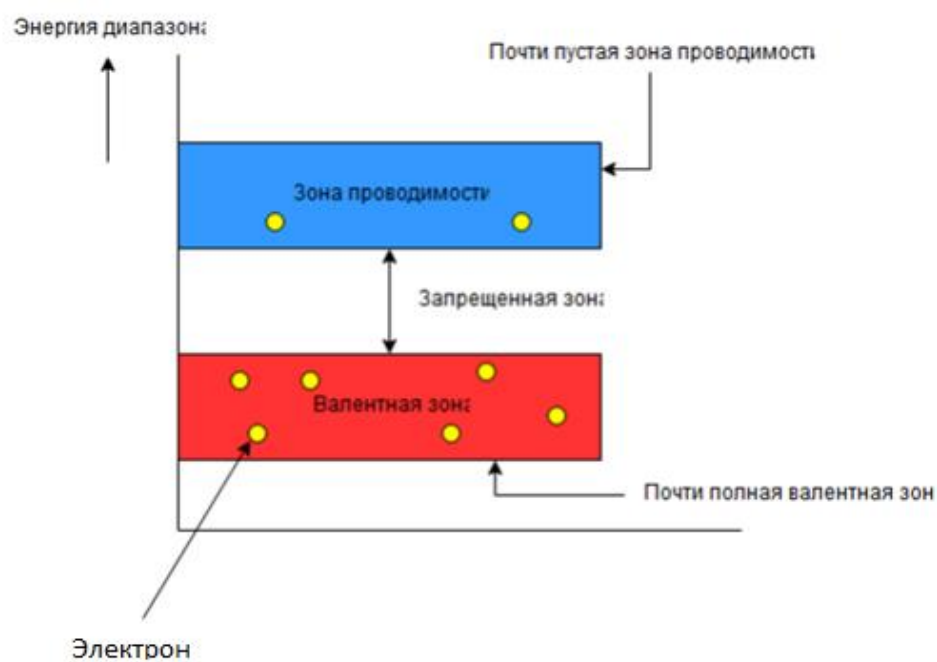


Рисунок 1 – Зонная структура полупроводника

Зависимость энергетического спектра квантовой точки от размера дает огромный потенциал для их практического применения. Как уже отмечалось, квантовые точки могут найти применение в оптоэлектрических системах, таких как светоизлучающие диоды и плоские светоизлучающие панели, лазеры, ячейки солнечных батарей и фотоэлектрических преобразователей, как биологические маркеры, т.е. везде, где требуются варьируемые, перестраиваемые по длине волны оптические свойства [1].

Существует определенная классификация квантовых точек:

1. Коллоидные квантовые точки.
2. Сферические квантовые точки (непосредственно *quantum dots*) – большая часть квантовых точек. В настоящий день имеют наибольшее практическое значение, поскольку наиболее просты в изготовлении.
3. Эллипсоидные квантовые точки (*nanorods*) – нанокристаллы, вытянутые вдоль одного направления. Указанные границы условны. С точки зрения практического применения данный класс квантовых точек применяется как источник поляризованного излучения.

Важным параметром полупроводникового материала является ширина запрещенной зоны, которая отделяет проводимость от валентных энергетических зон. В полупроводниках макроскопических размеров ширина этого зазора является фиксированным параметром, который определяется характеристиками материала. Однако ситуация меняется в случае наноразмерных полупроводниковых частиц размером менее ~10 нм, что заметно на рисунке 2а. Этот диапазон размеров соответствует режиму квантового удержания, при котором электронные возбуждения "чувствуют" наличие границ частиц и реагируют на них. Изменение размера частиц происходит за счет корректировки их энергетических спектров. Это явление известно, как эффект квантового размера, в то время как наноразмерные частицы, которые его проявляют, часто называют квантовыми точками (КТ).

По мере уменьшения размера квантовой точки, ширина запрещенной зоны увеличивается, что приводит, в частности, к синему смещению длины волны

					ПГУ 2. 11.03.04. 003 ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата		7

излучения. В первом приближении этот эффект можно описать с помощью простой модели "квантового ящика" для сферической квантовой точки с радиусом R . Эта модель предсказывает, что зависящий от размера вклад в ширину запрещенной зоны просто пропорционален $1/R^2$ (рисунок 2б). В дополнение к увеличению энергетического зазора, квантовое ограничение приводит к распаду непрерывных энергетических зон объемного материала на дискретные, "атомарные" энергетические уровни. Эти хорошо разделенные состояния квантовой точки могут быть обозначены с использованием атомарных обозначений ($1S$, $1P$, $1D$ и т.д.). Как видно из рисунка 2в, дискретная структура энергетических состояний приводит к дискретному спектру поглощения квантовых точек, что контрастирует с непрерывным спектром поглощения объемного полупроводника.

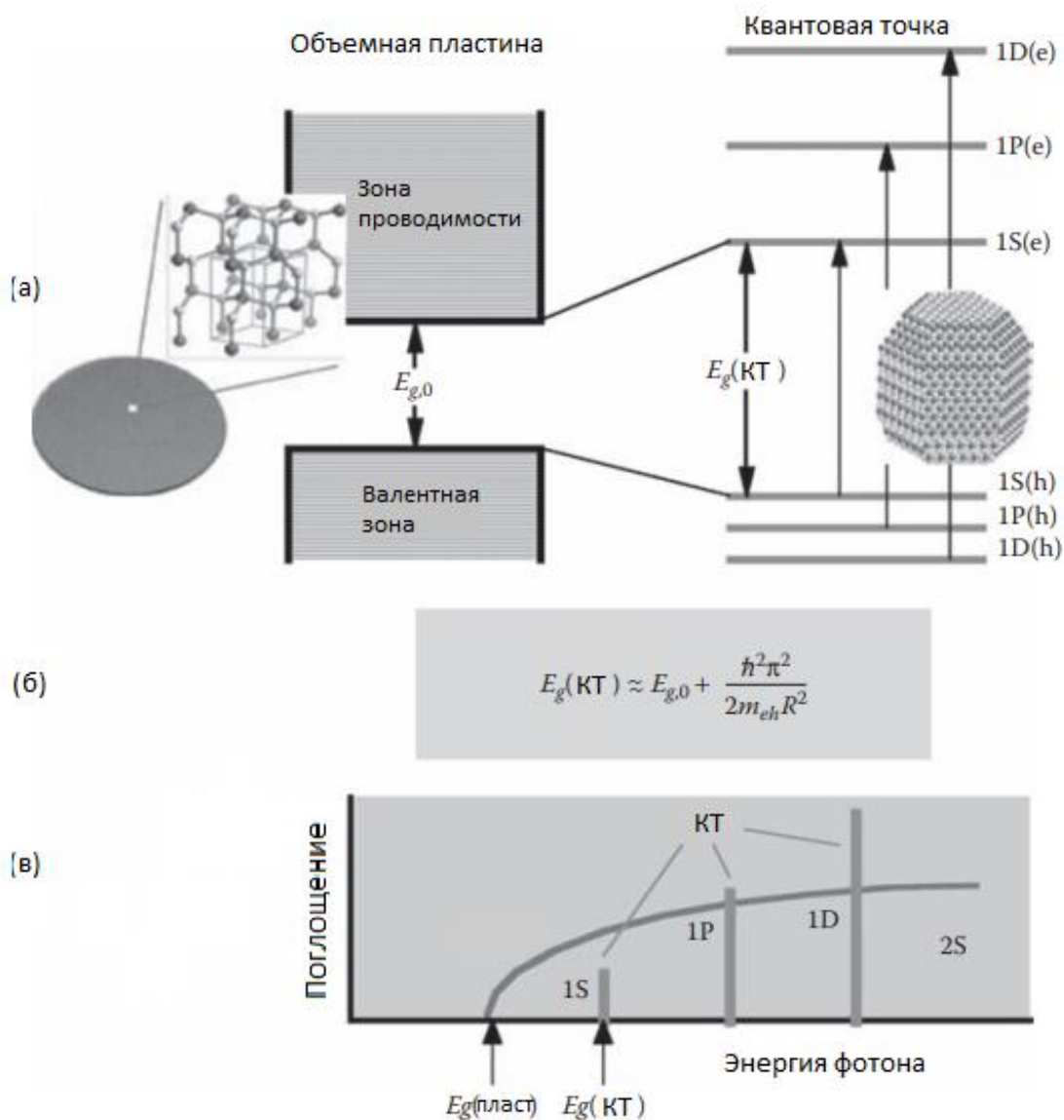
Полупроводниковые квантовые точки устраняют разрыв между кластерными молекулами и объемными материалами. Границы между молекулярными, квантовыми точками и объемными режимами четко не определены и сильно зависят от материала. Однако диапазон от ~ 100 до ~ 10000 атомов на частицу можно рассматривать как грубую оценку размеров, для которых характерен режим нанокристаллов. Нижняя граница этого диапазона определяется стабильностью объемной кристаллической структуры по отношению к изомеризации в молекулярные структуры. Верхняя граница соответствует размерам, для которых интервал энергетических уровней приближается к тепловой энергии КТ.

Полупроводниковые квантовые точки были получены различными "физическими" и "химическими" методами. Некоторые примеры физических процессов, характеризующихся высокой энергоемкостью, включают методы молекулярно-лучевой эпитаксии и металлоорганического химического осаждения из газовой фазы для КТ и методы пар-жидкость-твердое тело для квантовых проволок. Высокотемпературные методы также применяются в химической промышленности, включая выращивание частиц в стеклах. Однако в данном случае основное внимание уделяется "мягкому" (с низким потреблением энергии)

					ПГУ 2. 11.03.04. 003 ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата		8

коллоидному химическому синтезу кристаллических полупроводниковых наночастиц, которые будут называться нанокристаллическими квантовыми точками (NQDS). Нанокристаллические квантовые точки представляют собой неорганическую сердцевину, покрытую слоем органических молекул-лигандов. Органическое покрытие обеспечивает электронную и химическую пассивацию поверхностных оборванных связей, предотвращает неконтролируемый рост и агрегацию наночастиц и позволяет химически манипулировать наночастицами, как крупными молекулами, растворимость и реакционная способность которых определяется типом поверхностного лиганда. В отличие от эпитаксиальных КТ, связанных с подложкой, нанокристаллические квантовые точки являются "автономными". Это обсуждение сосредоточено на наиболее успешных методах синтеза, успех которых определяется высокой кристалличностью, достаточной пассивацией поверхности, растворимостью в неполярных или полярных растворителях и хорошей монодисперсностью [2, 3]. Монодисперсность по размеру позволяет изучать и, в конечном счете, использовать эффекты, связанные с размером материалов, для определения новых свойств материалов. Монодисперсность в виде коллоидных наночастиц (диапазон размеров 1-15 нм точки) требует стандартного отклонения выборки в размере около 5%, что соответствует $\pm$ одной постоянной решетки. Хотя коллоидная монодисперсность в этом строгом смысле становится все более распространенной, также изучаются и препараты, содержание которых в составе достигает примерно 20%, особенно там, где важны другие характеристики, такие как новые составы или контроль формы. Кроме того, обсуждаются щадящие подходы к химической и структурной модификации нанокристаллических квантовых точек, а также к сборке нанокристаллических квантовых точек в искусственные твердые вещества или искусственные молекулы.

					ПГУ 2. 11.03.04. 003 ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата		9



а) объемный полупроводник имеет непрерывные зоны проводимости и валентной зоны, разделенные фиксированной шириной запрещенной зоны (слева), в то время как квантовая точка характеризуется дискретными атомоподобными состояниями с энергиями, которые определяются радиусом R квантовой точки (справа); б) выражение для энергии квантовой точки, полученная с использованием модели "квантовой ямы"; в) схематическое изображение - изображение непрерывного спектра поглощения объемного полупроводника (изогнутая линия) по сравнению с дискретным спектром поглощения квантовой точки (вертикальные полосы).

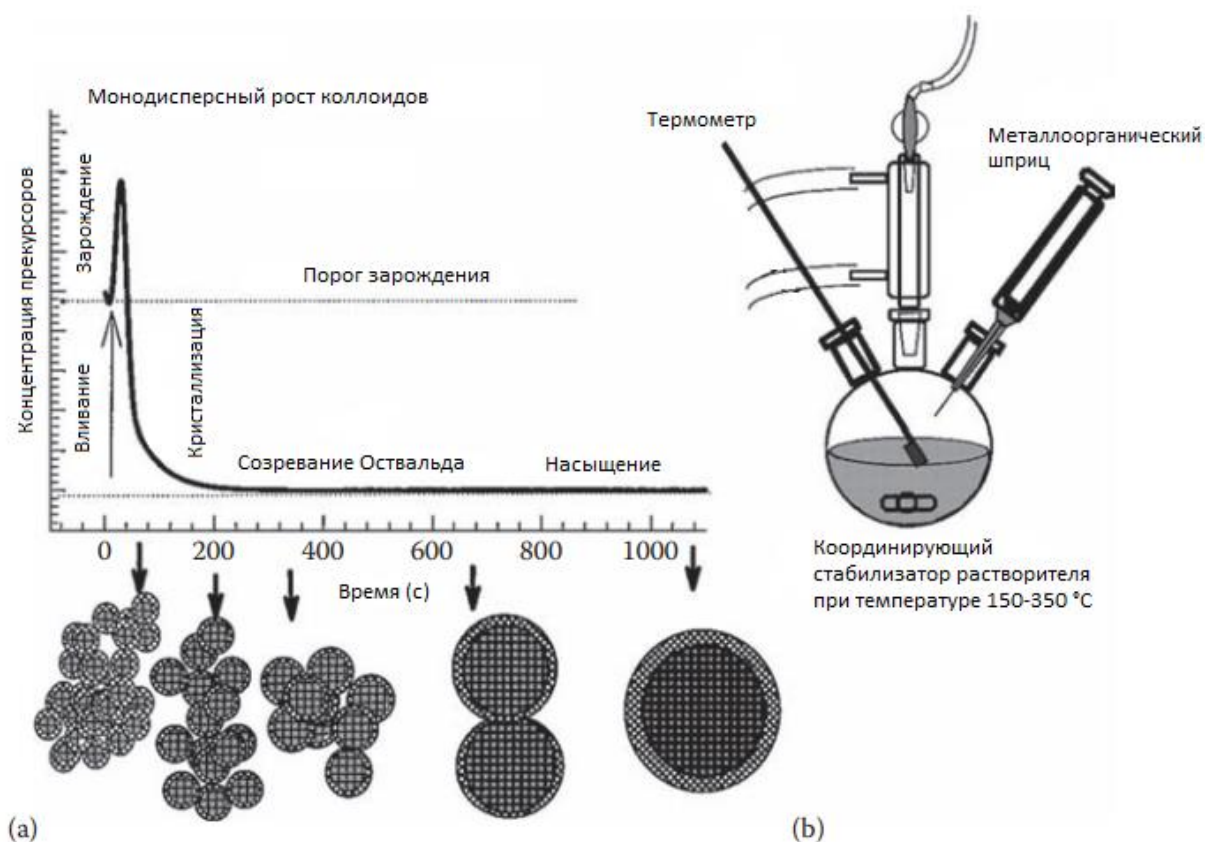
Рисунок 2 – Полупроводниковые нанокристаллы

1.2 Синтез коллоидных нанокристаллов

Наиболее успешные с точки зрения качества и монодисперсности препараты для получения нанокристаллических квантовых точек (*NQD*) основаны на пиролизе металлоорганических прекурсоров в горячих координирующих растворителях (120°C - 360°C). Как правило, в терминах исследований зародышеобразования и роста коллоидных частиц в воде и уксусе, эти способы получения включают дискретный во времени процесс зарождения, за которым следует относительно быстрый рост из мономеров в растворной фазе и, наконец, более медленный рост в результате созревания по Оствальду (называемого перекристаллизацией или старением) (рисунок 3). Зародышеобразование достигается за счет быстрого введения предварительного раствора, парящих в горячих координирующих растворителях, что приводит к термическому разложению реагентов-предшественников и перенасыщению образовавшихся "мономеров", которые частично высвобождаются за счет образования частиц. Затем рост продолжается путем добавления мономера из раствора к зародышам *NQD*. Концентрация мономера ниже критической для образования зародышей, и, таким образом, эти частицы только присоединяются к существующим частицам, а не образуют новые зародыши. Как только концентрация мономера будет достаточно снижена, рост может продолжаться за счет созревания по Оствальду. В данном случае растворение более мелких частиц (с более высокой поверхностной энергией) приводит к росту более крупных частиц и, следовательно, к уменьшению количества частиц в системе.

Было высказано предположение, что традиционная модель Ламера неприменима для схем синтеза методом горячей инъекции, поскольку зарождение, созревание и рост могут происходить почти одновременно. Более того, присутствие сильно координирующих лигандов может также изменять процессы зарождения и роста, что еще больше усложняет простую интерпретацию событий реакции. Наконец, также была описана модификация процесса созревания по Оствальду, при которой концентрация частиц в растворе

повышается. В процессе роста концентрация значительно снижается. Этот процесс получил название "самофокусировка"[4].



а) схематично иллюстрирует модель Ламера для стадий зарождения и роста монодисперсных коллоидных частиц; б) изображение синтетического аппарата, используемого при получении монодисперсных квантовых точек.

Рисунок 3 – Монодисперсные квантовые точки

В качестве альтернативы, перенасыщение и зародышеобразование могут быть вызваны медленным повышением температуры реакции. Исходные вещества смешивают при низкой температуре и медленно доводят до температуры, при которой реакция и разложение исходных веществ протекают достаточно быстро, чтобы привести к перенасыщению. Перенасыщение снова снижается за счет "всплеска нуклеации", после которого температура регулируется, чтобы избежать дополнительных процессов нуклеации, что позволяет присоединению мономера к существующим нуклеям происходить быстрее, чем образованию нового мономера. Таким образом, нуклеация не обязательно должна быть мгновенной, но в большинстве случаев это должно быть

единичное, дискретное по времени событие, чтобы обеспечить получение желаемых дисперсий узкого размера, контролируемых нуклеацией.

1.3 Влияние технологических параметров на размеры нанокристаллов

Размер и дисперсность частиц можно регулировать как во время реакции, так и после ее проведения. В целом, время является ключевой переменной, т.к. более длительное время реакции приводит к увеличению среднего размера частиц. Температуры зарождения и роста играют противоположную роль. Более низкие температуры зародышеобразования поддерживают более низкие концентрации мономера и могут привести к образованию зародышей большего размера. В то же время, более высокие температуры роста могут привести к образованию частиц большего размера, поскольку увеличивается скорость добавления мономеров к существующим частицам. Кроме того, созревание по Оствальду происходит быстрее. Концентрация исходного раствора может влиять как на зарождение частиц, так и на процесс роста, и ее влияние зависит от соотношения концентрации поверхностно-активного вещества/предшественника и идентичности поверхностно-активных веществ (т.е. от силы взаимодействия между поверхностно-активным веществом и *NQD* или между поверхностно-активным веществом и мономерами).

При прочих равных условиях более высокие концентрации прекурсора способствуют образованию меньшего количества крупных зародышей и, следовательно, большего размера частиц *NQD*. Аналогично, низкое содержание стабилизатора: прекурсор при таком соотношении получают частицы большего размера. Кроме того, слабая связь стабилизатора с *NQD* способствует росту крупных частиц, а при слишком слабой координации - агрегации частиц в нерастворимые агрегаты. Взаимодействие стабилизатора с мономером также может влиять на процессы роста. Лиганды, которые прочно связываются с мономерными частицами, могут обеспечивать необычно высокие концентрации

мономера, необходимые для очень быстрого роста, или они могут способствовать уменьшению количества металлических частиц.

Пространственный состав координирующих лигандов может влиять на скорость роста, последующего за зарождением. Координирующие растворители обычно включают алкилфосфины, алкилфосфиноксиды, алкиламины, алкилфосфаты, алкилфосфиты, алкилфосфоновые кислоты, алкилфосфорамиды, алкилтиолы, жирные кислоты и т.д., алкильные цепи которых имеют различную длину и степень разветвления. Полярная головная группа связана с поверхностью *NQD*, а гидрофобный хвостовой элемент контактирует с внешним растворителем/матрицей. Это взаимодействие обеспечивает растворимость в обычных неполярных растворителях и препятствует агрегации. Соединение *NQD* с поверхностно-активным веществом является динамичным, и мономеры могут относительно беспрепятственно добавляться или удаляться с поверхности кристаллита. Способность атомов компонентов обратимо проникать на поверхность *NQD* и удаляться с нее обеспечивает необходимое условие высокой кристалличности – частицы могут подвергаться отжигу, при этом предотвращается их агрегация. На относительную скорость роста может влиять пространственный объем координирующего лиганда. Например, во время роста, объемные поверхностно-активные вещества могут создавать сравнительно высокие пространственные препятствия для сближения мономеров, эффективно снижая скорость роста за счет снижения скорости диффузии к поверхности частиц.

Две стадии роста (относительно быстрая первая стадия и созревание по Оствальду) различаются по своему влиянию на дисперсность по размерам. На первой стадии роста распределение по размерам остается относительно узким (в зависимости от стадии зарождения) или может стать более сфокусированным, тогда как во время созревания по Оствальду размер имеет тенденцию к расфокусировке, поскольку мелкие частицы начинают сжиматься и, в конечном счете, растворяются в пользу роста более крупных частиц. Эталонный препарат для квантовых точек CdS, CdSe и CdTe, который значительно улучшил общее

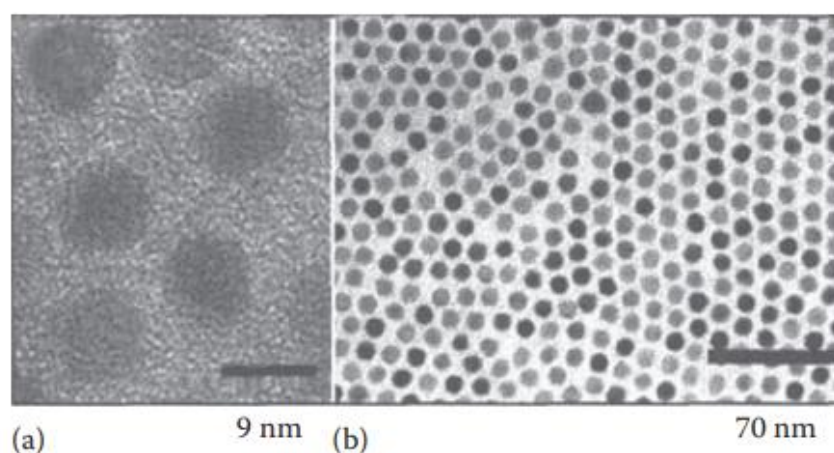
					ПГУ 2. 11.03.04. 003 ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата		14

качество наночастиц, полученных до этого момента, основывался на методе Оствальда для получения размерных рядов *NQDS* II-VI. Например, были получены *NQDs* CdSe диаметром от 1,2 до 11,5 нм. Для частиц более крупного размера была получена дисперсия 20 частиц по размеру от 10% до 15%, которую впоследствии пришлось уменьшить путем селективного осаждения по размеру. Процесс селективного осаждения по размеру просто включает в себя предварительное титрование *NQDs* с полярным "нерастворителем", обычно метанолом, до появления первых признаков осаждения, плюс небольшой избыток, что приводит к осаждению небольшой части *NQDS*. Такое контролируемое осаждение предпочтительно удаляет самые крупные *NQDs* из исходного состояния раствора, так как они становятся неустойчивыми к растворению раньше, чем мелкие частицы. Затем осадок собирают центрифугированием, отделяют от жидкостей, повторно растворяют и снова осаждают. В этом циклическом процессе крупные частицы отделяются от мелких *NQDS* и может генерировать дисперсию желаемого размера частиц.

1.4 Способы синтеза наночастиц различной морфологии

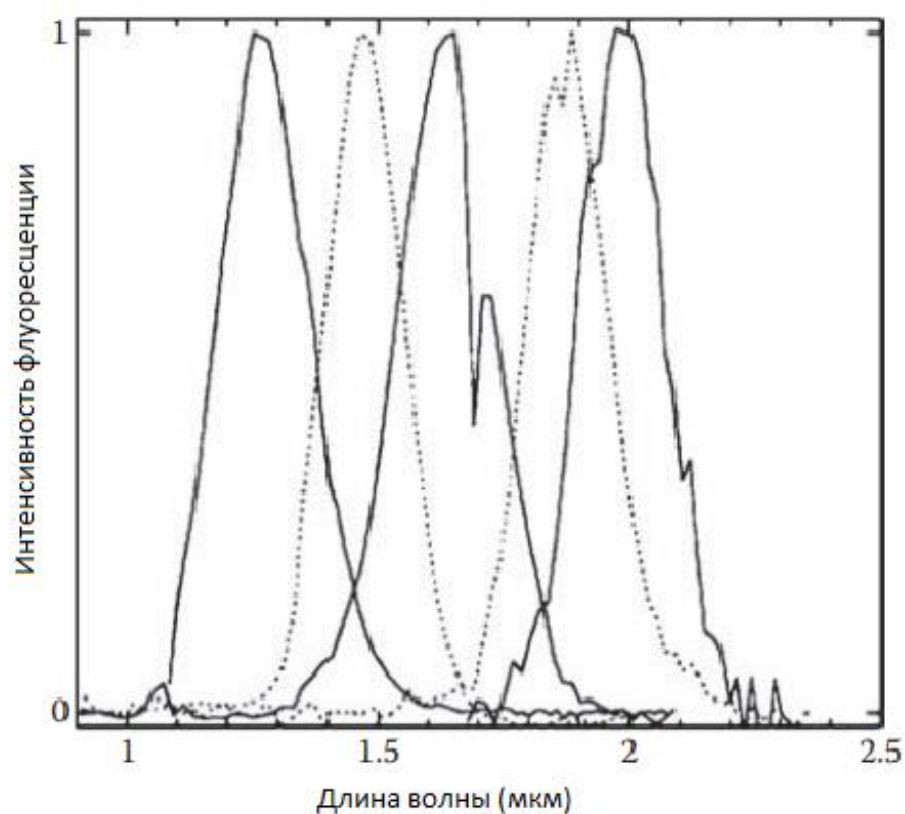
Было разработано множество реакций при комнатной температуре. Две наиболее распространенные схемы включают в себя стабилизированный тиолом метод выращивания в водной фазе и метод обратных мицелл (рисунок 4 и рисунок 5).

					ПГУ 2. 11.03.04. 003 ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата		15



а) КТ PbSe; б) изображение с меньшим увеличением показывает практически одинаковый размер и форму КТ PbSe.

Рисунок 4 – Квантовые точки PbSe



Лазерный импульс длиной волны 1,064 мкм). Резкие пики при ~1,7 и 1,85 мкм соответствуют поглощению растворителем (хлороформом).

Рисунок 5 – Спектры флуоресценция в зависимости от размера PbSe при комнатной температуре

В целом, низкотемпературные методы отличаются относительно низкой дисперсией частиц по размерам и часто проявляют значительную, если не исключительную, зависимость фотолюминесценции (ФЛ) от состояния ловушки. Последний по своей сути является слабым и широким по сравнению с ФЛ с краевой полосой, и он менее чувствителен к квантово-размерным эффектам и контролю размера частиц. Кроме того, низкотемпературные водные препараты, как правило, ограничены в своей применимости к ионогенным материалам. Для получения кристаллических ковалентных соединений обычно требуются более высокие температуры (за исключением условий реакции, которые могут снизить энергетические барьеры для роста кристаллов, например, катализаторов и шаблонных структур). Таким образом, соединения II-VI, которые являются ионными по сравнению с соединениями III-V, были успешно получены при низких температурах (меньше комнатной температуры), в то время как попытки получения высококачественных соединений III-V оказались менее успешными. Сообщалось о некоторых относительно успешных примерах получения низкотемпературных *NQD* на водной основе методами III-V, но качество частиц ниже, чем обычно при использовании методов с более высокой концентрацией. Тем не менее, мягкие условия реакции, обеспечиваемые препаратами на водной основе, являются технологическим преимуществом[5].

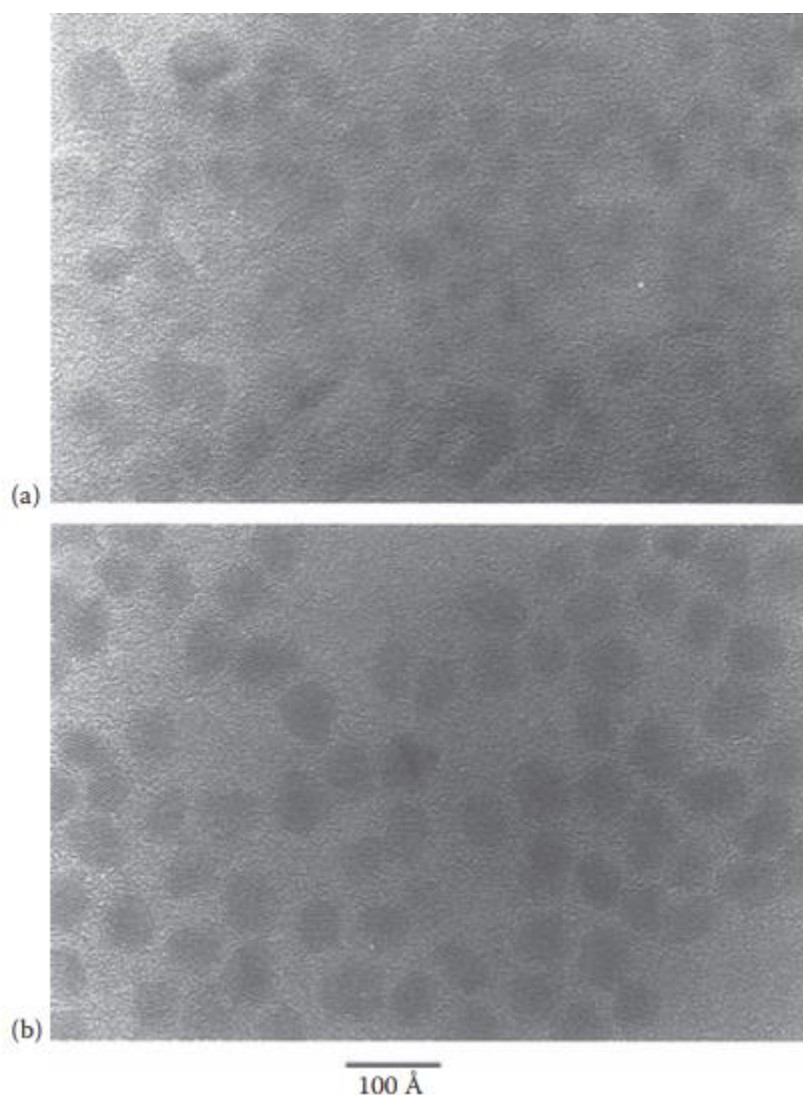
Синтез в обратномицеллярном растворе может быть использован для получения монодисперсных наночастиц оксидов металлов. Представленные материалы представляют собой сегнетоэлектрические оксиды и, таким образом, отличаются от нашего подхода к описанию оптически активных полупроводниковых *NQD*. Тем не менее, этот метод демонстрирует интересный и полезный подход: комбинация золь-гель методов с синтезом наночастиц в обратно-мицеллярных системах(с образованием зародышей и ростом при умеренной температуре). Были получены монодисперсные нанокристаллы титаната бария, BaTiO_3 , диаметр которых контролировался в диапазоне 6-12 нм. Кроме того, были успешно проведены экспериментальные исследования для получения TiO_2 и PbTiO_3 .

1.5 Роль поверхностных состояний нанокристаллов

Эффективность люминесценции и стабильность нанокристаллов существенно зависят от качества пассивации их поверхности, в образовании ловушек могут участвовать неприсоединенные лиганды.

Из-за увеличения отношения поверхности к объему при уменьшении размера частиц ловушечные состояния оказывают повышенное влияние на свойства ФЛ, включая эффективность излучения, форму спектра, положение и динамику. Кроме того, часто именно через свои поверхности полупроводниковые нанокристаллы взаимодействуют с растворимыми частицами в органическом растворе, реагентами в обычных органических реакциях, центрами полимеризации, и т.д. Контроль химического состава поверхности неорганических и органических соединений является ключом к управлению физическими и химическими свойствами, которые делают *NQD* уникальными по сравнению с их аналогами на основе эпитаксиальных квантовых точек.

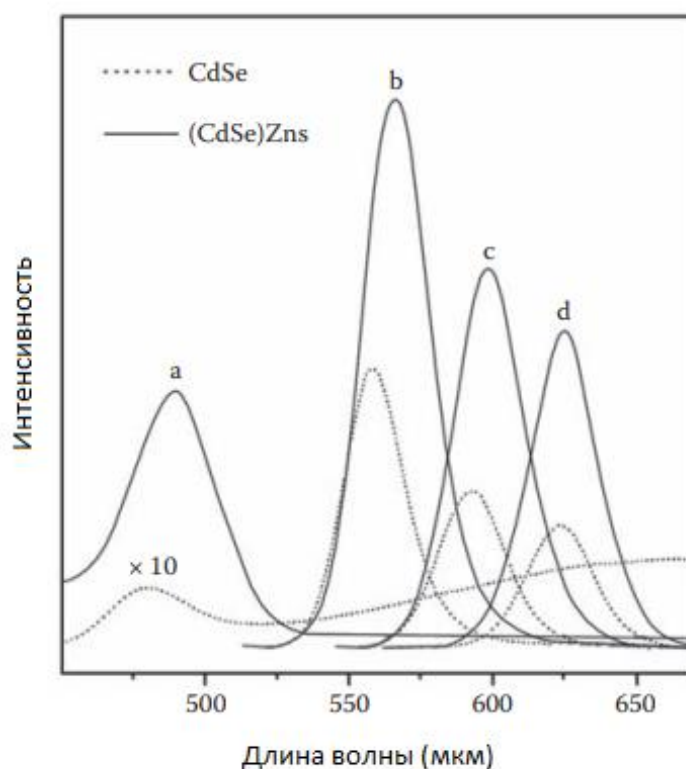
Нанесение на высокомоносферный CdSe эпитаксиальных слоев из Zn или CdS как правило, обеспечивает повышение эффективности ФЛ почти на порядок по сравнению с исходными нанокристаллами с исключительно органическим покрытием (например, эффективность 5-10% может достигать 30-70%). Повышенная квантовая эффективность достигается за счет улучшения координации поверхностных ненасыщенных или оборванных связей, а также за счет увеличения концентрации электронов и дырок в ядро частицы (рисунок 5). Последний эффект возникает, когда ширина запрещенной зоны материала оболочки больше, чем ширина запрещенной зоны материала сердцевинки, как в случае с частицами $(\text{CdSe})\text{ZnS}$ и $(\text{CdSe})\text{CdS}$ (ядро) оболочки. Также есть результаты успешного нанесения покрытий на полупроводники III-V групп.



а) ядро частиц CdSe диаметром 3,4 нм; б) частицы CdS ядро/оболочка, полученные покрытием оболочкой CdS толщиной 0,9 нм.

Рисунок 6 – Частицы CdSe и CdS.

Спектры фотолюминесценции могут быть использованы для определения механизмов возбуждения и рекомбинации неравновесных носителей заряда в QD и влияния на них размерного квантования. Пик фотолюминесценции обычно больше в нанокристаллах меньшего размера (с большей относительной площадью поверхности), чем в более крупных наночастицах (рисунок 7).



Диаметры ядра (а) составляют 2,3, (б) 4,2, (в) 4,8 и (г) 5,5 нм. Значения ФЛ (ядра) оболочки составляют (а) 40, (б) 50, (в) 35 и (г) 30%.

Рисунок 7 – Спектры ФЛ для КТ ядро CdSe и (CdSe),оболочка КТ ZnS

Совсем недавно методы наращивания оболочки (сердцевины) были усовершенствованы, чтобы обеспечить точный контроль толщины оболочки и добавления монослоя. Технология, первоначально разработанная для нанесения тонких пленок на твердые подложки – последовательная адсорбция и реакция ионного слоя (*SILAR*), – была адаптирована для выращивания оболочек *NQD*. При этом в значительной степени исключается однородное образование зародышей в составе оболочки и допускаются более высокие температуры роста оболочки, поскольку катионные и анионные соединения не сосуществуют в растворе для выращивания. Этот метод позволяет выращивать толстые оболочки, состоящей из множества монослоев оболочки, без потери монодисперсности по размеру *NQD* и превосходным качеством кристаллизации оболочки. Первоначально этот подход был продемонстрирован для однокомпонентной оболочки (CdS на CdSe) толщиной до пяти монослоев, но затем был распространен на многооболочечные архитектуры, а также на "ультратонкие" системы оболочек (>10 монослоев).

Архитектуры с несколькими оболочками [например, $(\text{CdS})\text{Zn}$, $\text{Cd}/\text{S}/\text{ZnS}$] обеспечивают "поэтапную" настройку состава оболочки и, таким образом, настройку параметров решетки и смещение валентной зоны и зоны проводимости в радиальном направлении. Полученные нанокристаллы обладают высокой степенью кристаллизации, однородной формой и хорошей электронной пассивацией.

1.6 Структуры с квантовыми точками/квантовыми ямами

Оптоэлектронные устройства, содержащие двумерные (2D) структуры с квантовыми ямами, как правило, ограничены парами материалов, которые хорошо согласованы по решетке из-за ограниченной устойчивости к деформации таких плоских систем; в противном случае требуются очень тонкие слои ямами. Чтобы получить доступ к дополнительным структурам типа квантовой ямы, необходимо использовать более устойчивые к деформациям системы. Как уже упоминалось, наноструктура с сильно изогнутыми квантовыми точками идеально подходит для систем с несогласованной решеткой. Было успешно синтезировано несколько структур OD/OW , начиная от хорошо подобранной по решетке $\text{CdS}(\text{HgS})\text{CdS}(\text{QD}, \text{QW}, \text{оболочка})$ к более высоконапряженному $\text{ZnS}(\text{CdS})$. Первый обеспечивает возможность настройки цвета излучения в инфракрасной области спектра, в то время как второй обеспечивает доступ к сине-зеленой области спектра.

При режимах выращивания, которые способствуют быстрому кинетическому росту, можно получить более анизотропные формы, такие как стержни и проволока. При синтезе полупроводниковых наночастиц такие условия роста достигаются при использовании высоких концентраций прекурсора, или мономера, в растворе для выращивания. Как обсуждалось ранее, распределение частиц по размерам можно "сфокусировать", поддерживая относительно высокие концентрации мономера, которые предотвращают переход от режима быстрого роста к режиму медленного роста (созревание по Оствальду). Даже более высокие концентрации мономера могут использоваться для осуществления перехода от термодинамического роста к кинетическому. Доступ к режиму очень быстрого кинетического роста позволяет контролировать форму частиц. Система, по сути,

переходит в режим "кинетической перегрузки", при котором растворение частиц сводится к минимуму, поскольку концентрация мономера поддерживается на уровне, превышающем растворимость всех частиц в растворе. Таким образом, стимулируется рост всех частиц.

Для более точной регулировки скорости роста, контролирующей образование стержней CdSe, используются высокие концентрации мономеров в сочетании с соответствующими смесями органических лигандов. Таким образом, был получен широкий диапазон форматных соотношений стержней. В частности, к "традиционному" лиганду ТОРО добавляют алкилфосфоновые кислоты. Фосфоновые кислоты являются прочными металлическими связующими (Cd) и могут влиять на рост стержней, изменяя относительные скорости роста различных граней кристаллов[6].

"Каплевидные" частицы возникают из-за тенденции к однонаправленному росту. В этом случае кристаллы в форме стержней подвергаются воздействию условий роста, благоприятствующих сферической форме частиц, медленному росту и низкой концентрации мономера, в результате чего стержни приобретают округлую форму. Затем концентрацию мономера быстро увеличивают, чтобы добиться удлинения "капли" с одного конца до частиц, напоминающих головастиков. Режим роста, управляющий эволюцией стержней в сферические частицы, был назван "внутричастичным созреванием от 1D до 2D". Объемы наночастиц и общее количество наночастиц остаются примерно неизменными (как и концентрации мономеров), в то время как форма наночастиц резко меняется. Это изменение может быть объяснено диффузией атомов по оси к другим граням кристалла внутри частиц. Этот процесс отличается от "созревания между частицами", или созревания по Оствальду, которое наблюдается при еще более низких концентрациях мономера. Считается, что созревание наночастиц происходит, когда между наночастицами и мономерами в объеме раствора существует "диффузионное равновесие". В качестве альтернативы, было также показано, что наноточки могут использоваться для "затравки" роста наностержней[7].

2 Математические модели квантовых точек

2.1 Сферические квантовые точки

Сферическая квантовая точка моделируется сферически симметричной потенциальной ямой. Выбор зависимости потенциала от расстояния до центра точки определяется условиями конкретной задачи и, отчасти, произволен. Благодаря сферической симметрии задачи переменные в уравнении Шредингера разделяются для всех потенциалов вида $V(r)$. Прежде всего, предположим, что потенциальная яма $V(r)$ обладает бесконечно высокими стенками. Это предположение оправдано, например, в случае, когда полупроводниковая квантовая точка находится в диэлектрике или жидкости. Будем также считать, что квантовая точка представляет собой сферу радиуса R . Тогда потенциальная яма, создаваемая квантовой точкой, принимает вид

$$V(r) = \begin{cases} 0, & r \leq R, \\ \infty, & r \geq R. \end{cases} \quad (1)$$

Записанное в сферических координатах уравнение Шредингера внутри квантовой точки имеет вид

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

$$\text{где } l^2 = -\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}, \quad (3)$$

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

$$l^2 Y_{lm}(\theta, \varphi) = l(l+1) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (4)$$

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}, \quad (5)$$

ПГУ 2. 11.03.04. 003 ПЗ							
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата	Математические модели квантовых точек		
Разраб.	Голубева						
Провер.	Исаева						
И. Контр.	Рыжова				Гр.20ПД1		
Число							

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

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

$P_l^m(\cos\theta)$ - полиномы Лежандра. В силу (4), уравнение 2 допускает разделение радиальной и угловых переменных. Полагая, что $\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r)Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ для радиальной части волновой функции получаем

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R = 0, \quad (6)$$

где

$$k^2 = 2m^* E / \hbar^2. \quad (7)$$

Легко убедиться, что конечным в нуле решением данного уравнения является функция

$$R_l(r) = C_l j_l(kr) \quad (8)$$

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

В результате для волновых функций и энергетического спектра носителей заряда можем записать следующие выражения:

$$\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{2}{R^3}} \frac{j_l\left(\frac{\xi_{nl}r}{R}\right)}{j_{l+1}(\xi_{nl})} Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad (9)$$

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

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

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

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 $2l+1$.

2.2 Цилиндрические квантовые точки

Цилиндрически симметричная (цилиндрическая) квантовая точка часто используется для моделирования полупроводниковых нанокристаллов, выращенных методом самоорганизации. Данный метод позволяет получать нанокристаллы в форме призм с почти круглыми основаниями. Волновые функции и энергетический спектр цилиндрической квантовой точки могут быть найдены аналитически лишь в предположении о наличии бесконечно высокого потенциального барьера для носителей заряда. Если его принять, то потенциал $V(r)$ определится выражением 10, в котором

$$QD = \begin{bmatrix} 0 \leq \rho \leq \rho_0 \\ 0 \leq \varphi \leq 2\pi \\ 0 \leq z \leq h \end{bmatrix}, \quad (10)$$

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

Внутри квантовой точки уравнение Шредингера в цилиндрических координатах принимает вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(\rho, \varphi, z) = E \psi(\rho, \varphi, z) \quad (11)$$

Для определения волновых функций и спектра носителей подставим в (11) $\psi(\rho, \varphi, z)$ в виде произведения $R(\rho)\Phi(\varphi)Z(z)$. Тогда для разделившихся переменных получим следующие дифференциальные уравнения

$$\frac{d}{d\rho} \left(\rho \frac{dR}{d\rho} \right) + \left[(k^2 - \mu^2) \rho - \frac{\lambda^2}{\rho} \right] R = 0, \quad (12)$$

$$\frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} + \lambda^2 \Phi = 0, \quad (13)$$

$$\frac{d^2 Z}{dz^2} + \mu^2 Z = 0, \quad (14)$$

где

$$k^2 = 2m^*E/\hbar^2. \quad (15)$$

Заменой

$$\rho = u/\sqrt{k^2 - \mu^2}, \quad (16)$$

уравнение 12 преобразуется к виду

$$\frac{d^2 R}{d\rho^2} + \frac{1}{u} \frac{dR}{d\rho} + \left(1 - \frac{\lambda^2}{u^2}\right) R = 0. \quad (17)$$

Ограниченным в нуле решением данного уравнения является цилиндрическая функция Бесселя $J_\lambda(u)$. Вводя постоянную

$$\zeta^2 = \rho_0^2(k^2 - \mu^2), \quad (18)$$

используя условие $R(\rho_0) = 0$ и условие нормировки $\int_0^{\rho_0} R^2 \rho d\rho = 1$, получим интересующее нас решение уравнения (17)

$$R_{n\lambda}(\rho) = \frac{\sqrt{2} J_\lambda(\zeta_{n\lambda} \rho / \rho_0)}{\rho_0 J_{\lambda+1}(\zeta_{n\lambda})}, \quad (19)$$

где $\zeta_{n\lambda}$ - n -й корень функции Бесселя λ -го порядка [$J_\lambda(\zeta_{n\lambda}) = 0$]. Очевидные условия $\Phi(2\pi) = 0$ и $Z(0) = Z(h) = 0$, дают

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

$m=1,2,3,\dots$. В результате нормированные составляющие волновой функции ψ принимают вид

$$\Phi_l(\varphi) = \frac{e^{il\varphi}}{\sqrt{2\pi}}, \quad Z_m(z) = \sqrt{\frac{2}{h}} \sin\left(\frac{\pi m}{h} z\right) \quad (20)$$

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

$$\psi_{nlm}(\rho, \varphi, z) = \sqrt{\frac{2}{\pi h \rho_0^2}} \frac{J_l(\zeta_{nl} \rho / \rho_0)}{J_{l+1}(\zeta_{nl})} \sin\left(\frac{\pi m}{h} z\right) e^{il\varphi} \quad (21)$$

$$E_{nlm} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\frac{\zeta_{nl}^2}{\rho_0^2} + \frac{\pi^2 m^2}{h^2} \right) \quad (22)$$

Волновая функция ψ_{nlm} нормирована в следующем смысле:

$$\int_{QD} \psi_{n'l'm'}^*(r) \psi_{nlm}(r) dr = \delta_{nn'} \delta_{l'l} \delta_{mm'}. \quad (23)$$

Поскольку

$$J_{-l}(u) = (-1)^l J_l(u)$$

то все состояния (21) и (22) с $l \neq 0$ дважды вырождены по энергии.

2.4 Теоретическое сравнение энергетических спектров квантовых точек

Положение уровней энергетического спектра для сферической КТ может быть представлено как

$$E(L_x) := \frac{(\hbar^2 \pi^2)}{2 \cdot m \cdot q} \left[\left[\frac{1^2}{(L_x)^2} \right] + \left[\frac{1^2}{(L_x)^2} \right] + \left(\frac{1^2}{L_x^2} \right) \right], \quad (24)$$

где m – эффективная масса электрона.

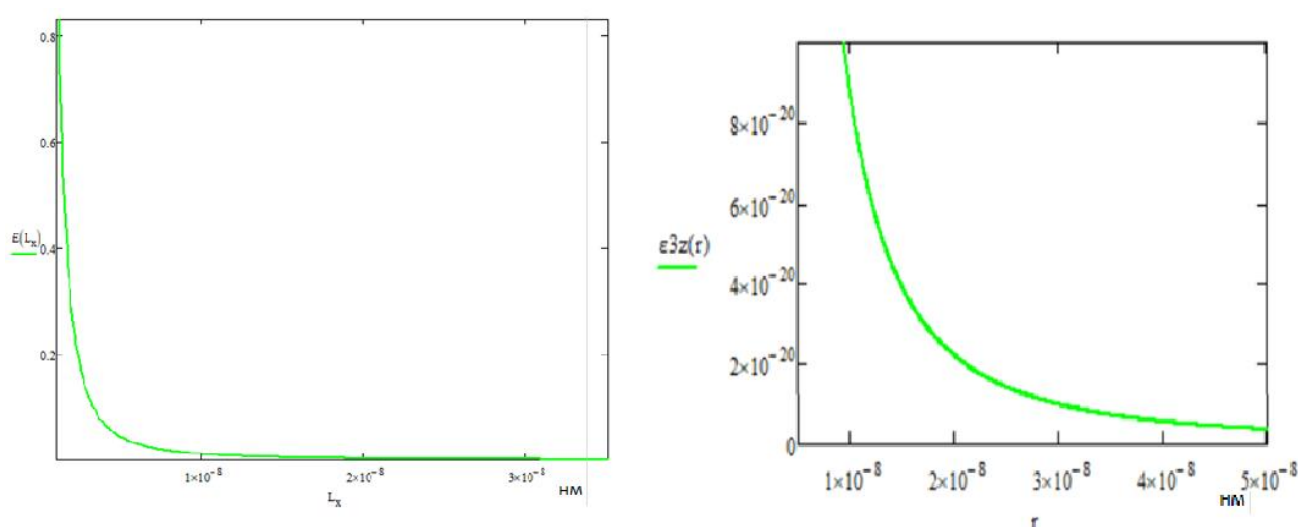


Рисунок 8 – Расчетные кривые первого энергетического уровня в КТ для сферической модели и полусферической моделей

3 Теоретическое исследование электрофизических свойств наночешуек на основе полупроводниковых соединений

3.1 Общие сведения

В последнее время среди наноструктур, привлекающих внимание исследователей, все чаще обнаруживается ультратонкие квантовые точки (КТ) нанометрического масштаба благодаря их унаследованным характеристикам и структурной форме, которая влияет на их электронные, оптические, каталитические и фотоэлектрохимические свойства. Как известно, удержание электронов или дырок в 2D-КТ или 3D-КТ приводит к увеличению расстояния между энергетическими уровнями, что приводит к дискретному энергетическому спектру с уменьшением размера наноструктур. В этом направлении эффект ограничения использовался для улучшения квантовой передачи информации, производительности датчиков и оптоэлектронных устройств. КТ и квантовые ямы использовались для создания современных компонентов для электронных и оптоэлектронных приложений. В последние годы полупроводники 2D-КТ используются в качестве наночешуйчатых фотокатализаторов из-за улучшения времени жизни, скорости адсорбции и десорбции носителей заряда, удерживаемых на поверхности наноструктур. Из-за их важности электронная структура и запрещенная зона, E_g , наночешуек твердого раствора GaSe изучаются с использованием расчетов теории функционала плотности. Значение и электронная структура показывают, что полупроводниковые нанохлопья могут поглощать большую часть солнечной радиации. С другой стороны, наночешуйки Si малой толщины (15–17 нм) и большого диаметра (0,2–1,0 нм), полученные в процессе бисерного фрезерования, используются для улучшения и восстановления опилок в качестве высокоэффективного материала отрицательного электрода для литий-ионных аккумуляторов. Недавние инновации и достижения в области нанотехнологий, таких как молекулярно-

				ПГУ 2. 11.03.04. 003 ПЗ			
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата			
Издан		Голубева	<i>[Подпись]</i>				
Провер		Иванова	<i>[Подпись]</i>				
И. Контр.		Рыкова	<i>[Подпись]</i>	27.06.24			
Удобр.							
Теоретическое исследование электрофизических свойств наночешуек на основе полупроводниковых соединений					Лист	Лист	Листов
						28	31
					Гр.20ПД1		

лучевая эпитаксия и химическое осаждение металлоорганических соединений из паровой фазы или метод самосборки, создали возможность изготовления полупроводниковых квантовых ям, проволок с квантовыми ямами и квантовых точек различных размеров и форм. приложения, охватывающие широкий спектр областей. Это позволяет проводить новые теоретические исследования для описания явлений, связанных с низкоразмерными наноструктурами.

Среди этих наборов систем удержания мы находим КТ, которые привлекли большое внимание в последние годы из-за их потенциального использования в оптоэлектронных устройствах для создания одиночного фотона и связанной с ним пары фотонов. Подход самосборки используется для создания двумерных тонких 2D-КТ наноструктур, таких как дисковые, плоские и изогнутые (наночешуйки) поверхности, с превосходным качеством и контролем на протяжении всего процесса выращивания; боковые диаметры значительно больше их толщины. Удержание носителей заряда в КТ по двум или трем пространственным направлениям имеет множество преимуществ с точки зрения управления их электронными энергиями и энергиями связи, а также их линейными и нелинейными оптическими свойствами. Это позволяет лучше оптимизировать фотофизические свойства в зависимости от формы и размера КТ. Благодаря симметричной волновой функции при линейном и циркулярно поляризованном падающем излучении при изменении размера КТ в условиях фиксированной геометрии можно выявить небольшие изменения амплитуды резонансного пика и прогрессивное красное смещение кривой.

Такое поведение может оказаться экспериментально важным в материаловедении в ближайшие годы. За последние тридцать лет ученые уделили значительное внимание форме наноструктур, которая является одним из наиболее важных факторов для изучения различных свойств КТ. Исследователи интересовались сферическими, цилиндрическими квантовыми точками, а также КТ, где ядро/оболочка существует при внешних возмущениях, таких как гидростатическое давление, температура, электрическое и магнитное поле.

Важно отметить, что об оптических свойствах, связанных с нецентральными водородными примесными состояниями, заключенными в цилиндрическую КТ с различными направлениями электрических и магнитных полей, сообщили Хейн и Дюк. В этом отчете авторы показывают, что вклад недонорной примеси приводит к чрезвычайно сложным энергетическим спектрам, уменьшению квадратов дипольных матричных элементов и коэффициентов оптического поглощения. Эти коэффициенты симметрии и феноменологию невозможно предсказать. Таким образом, доказано, что численные расчеты проясняют эти физические явления. Кроме того, Ши и др. исследовали эллиптическое цилиндрическое ядро/оболочку КТ и влияние неосевого электрического поля на энергию связи водородной примеси в центре. Они обнаружили, что энергия связи цилиндрической формы выше, чем у эллиптической формы цилиндра. Влияние азимутального угла, образующего системы различной геометрии, на электронные и оптические свойства цилиндрических и сферических наноструктур становится предметом многих исследований. Для θ - эффект азимутального угла цилиндрической КТ, недавно получили, что: (I) оптическая запрещенная зона сильно зависит от радиуса КТ и ее азимутального угла, (II) геометрические параметры ($p, \theta, \text{ЧАС}$), наличие примесей и их расположение на прямоугольной поверхности основания очень существенно влияют на энергию связи, (III) энергия связи принимает критическое значение при угле точки почти равном 40° и принимает значения $2D$ -КТ, угол раскрытия стремится к 0° . Вместо этого свойства энергетического состояния зоны проводимости электрона, взаимодействующего с донорными примесными центрами в сферическом сегменте (коническом) $\text{GaAs}/\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}$, поскольку КТ были теоретически изучены.

В данной работе показано, что смешанное изменение коэффициента оптического поглощения в красном и синем цветах можно обнаружить при смещении примесей вдоль оси конуса для заданного размера конуса. После пояснения низкоразмерных наноструктур (роль формы и размера в $3D$ -КТ) и их участие в науке о нанотехнологиях, уместно отметить, что ультратонкие

наноструктуры 2D-КТ обладают некоторыми характеристиками и свойствами, которые 3D-КТ не могут предоставить. При контроле удерживающего потенциала или размера точки для фиксированного значения между ними носители заряда переходят из объемного состояния в состояние поверхностной ловушки, поскольку поверхностная поляризация вызывает притяжение носителей, захваченных внутри КТ, для их спонтанного захвата на поверхность точки. Совместное влияние неустойчивостей поверхностной поляризации экситона в сферической полупроводниковой КТ и окружающего ее отталкивающего квантового потенциала исследовано в данной работе. Взаимодействие этих эффектов приводит к удержанию электронно-дырочной пары внутри КТ или вблизи ее поверхности при ее возбуждении. Следовательно, поверхности КТ, особенно ультратонкие 2D-КТ, в последнее время стали важными из-за большого соотношения поверхность/объем, подходящего для этих наноструктур.

Прамджорн и Амтонг исследовали влияние электрического поля на нецентральные донорные примесные состояния, расположенные в искривленном двумерном InGaAs/GaAs с постоянной кривизной, с использованием метода конечных разностей (*FDM*). Они обнаружили, что размер системы, радиус изогнутой плоскости, направление электрического поля и положение примеси существенно влияют на энергию связи. Контроль над этими состояниями, основным и первым возбужденным состояниями ограниченных атомов примеси, которые рассматриваются как логические состояния или квантовые биты, приводит к улучшению обработки и хранения квантовой информации. С другой стороны, исследование удержания нецентрального донора в полупроводниковой КТ играет ключевую роль в адаптации квантовых устройств. До сих пор нет известных теоретических или экспериментальных сообщений о примесных состояниях, заключенных в ультратонких наночешуйках, полученных из сферической поверхности КТ. Следовательно, существует заинтересованность в изучении электронных свойств нецентрального донора, заключенного в ультратонкие наночешуйки различной геометрии для дальнейшего применения. В этой работе исследована энергия связи донора, связанную с электронными и

примесными состояниями в ультратонких 2D-КТ различной геометрии, называемых наночешуйками, изготовленными из GaAs. Различная геометрия наночешуек, полученных из сферической поверхности КТ, характеризуется углами α (полярный) и φ (азимутальный) и его радиус. В работе учитывается наличие одного донора и электрона и взаимодействие между ними через кулоновский потенциал; они удерживаются на одной поверхности GaAs. После получения гамильтониана сферической поверхности КТ с бесконечным удерживающим потенциалом собственные значения получаются с использованием *FDM* для решения двумерного дифференциального уравнения в частных производных эффективной массы. Исследована зависимость энергий электрона, донора и связи основного состояния от сферических координат и множества различных донорных позиций [8, 9].

3.2 Моделирование электронной структуры и физических процессов в полупроводниковых наночешуйках

Рассмотрим тончайшую сферическую КТ GaAs, характеризующуюся толщиной атомного масштаба, определяемой сферическими координатами (R, α, φ) , с $0 \leq \alpha \leq \pi$ и $0 \leq \varphi \leq 2\pi$, что позволяет создавать ультратонкие наноструктуры различной формы, называемые наночешуйками, с варьированием сферических параметров (рисунок 9). Независимое изменение α -полярный и φ -азимутальные углы соответственно меняют форму сферической поверхности. Кроме того, кривизной наночешуек можно управлять с помощью радиуса сферической поверхности. Существует предположение, что ионизованный атом-донор расположен на атомной поверхности, имеющей нулевой потенциал удержания, погруженной в матрицу материалов с рассматриваемым бесконечным потенциалом удержания. В приближении эффективной массы в присутствии донорной примеси гамильтониан в уравнении для электрона, удерживаемого на сферической поверхности наночешуйки, принимает вид:

$$H_D = -\frac{\hbar^2}{2m_e^+} \nabla^2 + V_D(\theta, \varphi) + V_C(\theta, \varphi) \quad (25)$$

					ПГУ 2. 11.03.04. 003 ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата		32

где m - эффективная масса электрона.

Что касается уравнения (25), оператор кинетической энергии электрона представлен первым членом, а вторым членом является кулоновское взаимодействие между донорной примесью (с $r = R$, α и координатами) и электроном (с $r = R$, 0 и координатами), которое задается через

$$V_D(\theta, \varphi) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r\epsilon_{ie}} \quad (26)$$

Здесь диэлектрическая проницаемость вакуума, статическая диэлектрическая проницаемость GaAs, а r - расстояние между электронами и примесями, которое может быть аппроксимировано:

$$r_{ie} = |\vec{r}_i - \vec{r}| = \sqrt{2R^2[1 - \cos\theta \cos\alpha_i - \sin\theta \sin\alpha_i \cos(\varphi - \varphi_i)]} \quad (27)$$

где $\varphi(\theta)$ и $\varphi(i)$ - соответственно азимутальные (полярные) угловые положения электрона и примеси. Последний член уравнения (25) описывается потенциалом квантового удержания поверхностной системы, который определяется как:

$$V_C(\theta, \varphi) = \begin{cases} 0, & \text{if } 0 \leq \theta \leq \alpha \text{ and } 0 \leq \varphi \\ \infty, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (28)$$

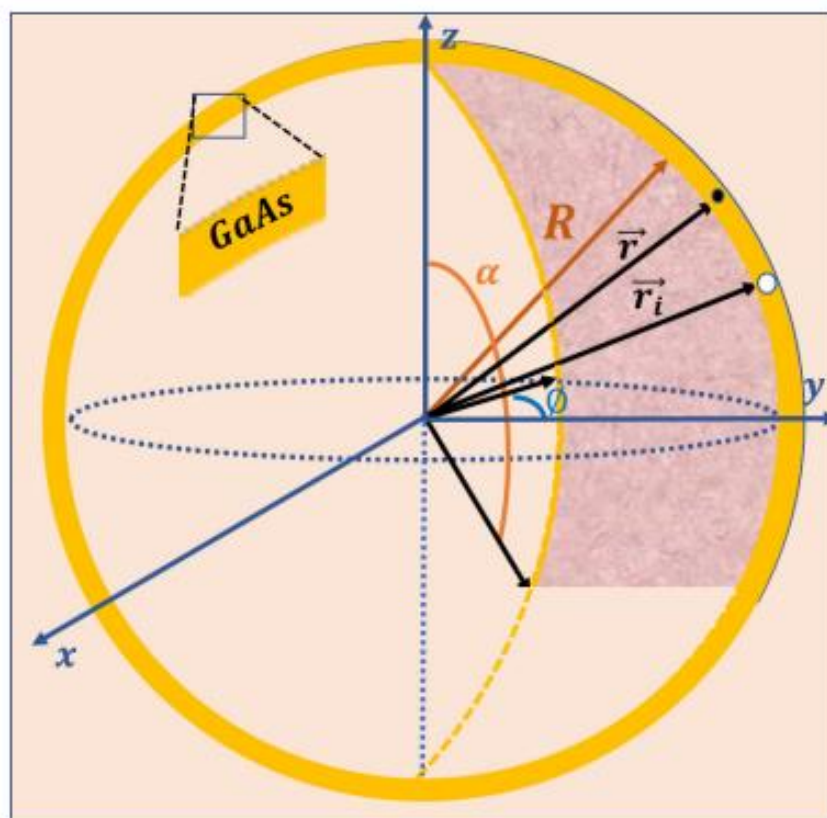


Рисунок 9 – Иллюстрация геометрии ультратонких нанопластинок, полученной из координат KTV сферической поверхности (R, a, φ). Положения электрона и атома-донора были, соответственно, рассмотрены $\vec{r}$ и $\vec{r}_i$.

Вне сферической поверхности квантовой точки плотность вероятности электрона равна нулю. Это означает, что волновая функция основного состояния также равна нулю. Внутри сферической поверхности OD – независимое от времени уравнение Шредингера на собственные значения без примесей, которое дает электронную энергию основного состояния, E_0 , и соответствующая волновая функция, $\psi_0(\theta, \varphi)$, записывается в виде:

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left(\frac{1}{R^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{R^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) + V_c(\theta, \varphi) \right] \psi_0(\theta, \varphi) = E_0 \psi_0(\theta, \varphi) \quad (29)$$

В присутствии донорной примеси можно записать следующее уравнение Шредингера:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left(\frac{1}{R^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{R^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) + V_D(\theta, \varphi) + V_c(\theta, \varphi) \right] \psi_D(\theta, \varphi) = E_D \psi_D(\theta, \varphi) \quad (30)$$

где E_D и $\psi_D(\theta, \varphi)$, соответственно, являются собственным значением и соответствующей ему собственной функцией единственного донора, заключенного в сферической поверхности КТ. Выбор сферических координат позволяет получать различные геометрические формы, связанные с изменением азимутальных и полярных углов, с гетероструктурами в диапазоне от сферических поверхностей до форм луны и зонта. Возможно, что при изменении радиуса можно управлять его кривизной. С другой стороны, например, цилиндрические координаты дают только геометрию, управляемую радиусом кривизны [10].

Чтобы решить уравнения Шредингера наносистемы, следует использовать FDM для определения собственных решений уравнений в частных производных. В этом вычислении уравнение (30) для наночастиц дискретизируется на однородной двумерной сетке, содержащей $N\theta \times N\varphi$ точек сетки в соответствии с методом конечных разностей. Необходимо поделить интервалы $[0, \alpha]$, а на $(N\theta+1)$ и $[0, \varphi]$ на $(N\varphi+1)$ части. $r\theta_i = i\Delta\theta$ и $\varphi_j = j\Delta\varphi$, где $1 \leq i \leq N\theta$ и $1 \leq j \leq N\varphi$ – это, соответственно, целые числа, определяющие положения сетки точки вдоль поверхности нанослоя, обозначенного θ и φ углами, а расстояния между сетками вдоль поверхности представлены $\Delta\theta$ и $\Delta\varphi$. Используя аппроксимацию для

$\frac{\partial \psi_D(\theta, \varphi)}{\partial \theta}$, $\frac{\partial^2 \psi_D(\theta, \varphi)}{\partial \theta^2}$ и $\frac{\partial^2 \psi_D(\theta, \varphi)}{\partial \varphi^2}$, и получаем дискретизированное уравнение (30) в точке сетки (i, j) в виде

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left[\left(\frac{1}{R^2(\Delta\theta)^2} + \frac{1}{2} \frac{\cos(i\Delta\theta)}{R^2 \sin(i\Delta\theta)\Delta\theta} \right) \psi_D^{i+1,j} - \left(\frac{2}{R^2(\Delta\theta)^2} + \frac{2}{R^2 \sin^2(i\Delta\theta)(\Delta\varphi)^2} + \frac{2m_e^*}{\hbar^2} (V_D^{i,j} - V_C^{i,j}) \right) \psi_D^{i,j} \right] + \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left[\left(\frac{-1}{R^2(\Delta\theta)^2} + \frac{1}{2} \frac{\cos(i\Delta\theta)}{R^2 \sin(i\Delta\theta)\Delta\theta} \right) \psi_D^{i-1,j} + \frac{1}{R^2 \sin^2(i\Delta\theta)(\Delta\varphi)^2} \psi_D^{i,j-1} + \frac{1}{R^2 \sin^2(i\Delta\theta)(\Delta\varphi)^2} \psi_D^{i,j+1} \right] = E_D \psi_D^{i,j}, \quad (31)$$

$$\text{где } V_C^{i,j}(\theta, \varphi) (V_D^{i,j} = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r\sqrt{2R^2[1-\cos(i\Delta\theta)\cos\alpha_i - \sin(i\Delta\theta)\sin\alpha_i\cos(j\Delta\varphi - \varphi_i)]}}) -$$

ограничивающий (кулоновский) потенциал в точке (i, j) , а $\Delta\theta = \frac{\alpha}{N_{\theta}+1}$ ($\Delta\varphi = \frac{\varphi}{N_{\varphi}+1}$) – угол наклона между двумя последовательными точками сетки в направлении e^{θ} (e^{φ}). Чтобы детализировать расчет, следует записать уравнение

(31) в системе $N\theta \times N\varphi$ с учетом граничных условий на границе Дирихле и Неймана в следующей матричной форме:

$$\begin{bmatrix} \beta_{11} - E_D & u_{11} & 0 & \dots & \gamma_{11} & \dots & \dots & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \omega_{12} & \beta_{12} - E_D & u_{12} & 0 & \dots & \gamma_{12} & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \omega_{13} & \beta_{13} - E_D & u_{13} & 0 & \dots & \gamma_{13} & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & 0 & \omega_{14} & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \delta_{21} & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \delta_{22} & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \gamma_{N_\theta N_\varphi - 2} & \dots & \dots \\ \dots & 0 & \delta_{23} & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \gamma_{N_\theta N_\varphi - 1} & 0 \\ \dots & \dots & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \gamma_{N_\theta N_\varphi} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \delta_{N_\theta N_\varphi - 2} & \dots & \dots & \omega_{N_\theta N_\varphi - 2} & \beta_{N_\theta N_\varphi - 2} - E_D & u_{N_\theta N_\varphi - 2} & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \delta_{N_\theta N_\varphi - 1} & \dots & \dots & \omega_{N_\theta N_\varphi - 1} & \beta_{N_\theta N_\varphi - 1} - E_D & u_{N_\theta N_\varphi - 1} \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \delta_{N_\theta N_\varphi} & \dots & \dots & \omega_{N_\theta N_\varphi} & \beta_{N_\theta N_\varphi} - E_D \end{bmatrix}.$$

$$\begin{bmatrix} \psi_D^{1,1} \\ \psi_D^{1,2} \\ \psi_D^{1,3} \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ \psi_D^{N_\theta N_\varphi - 2} \\ \psi_D^{N_\theta N_\varphi - 1} \\ \psi_D^{N_\theta N_\varphi} \end{bmatrix} = 0 \quad (32)$$

где

$$\begin{aligned} \beta_{i,j} &= \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left[\frac{2}{R^2(\Delta\theta)^2} + \frac{2}{R^2} \frac{1}{\sin(i\Delta\theta)^2(\Delta\varphi)^2} \right] + V_D^{i,j} - V_C^{i,j}, \gamma_{i,j} = \\ &= \frac{-\hbar^2}{2m_e^*} \left[\frac{1}{R^2(\Delta\theta)^2} + \frac{1}{2R^2} \frac{\cos(i\Delta\theta)}{\sin(i\Delta\theta)(\Delta\theta)} \right], \\ \delta_{i,j} &= \frac{-\hbar^2}{2m_e^*} \left[\frac{2}{R^2(\Delta\theta)^2} - \frac{1}{2R^2} \frac{\cos(i\Delta\theta)}{\sin(i\Delta\theta)(\Delta\theta)} \right] \text{ и } u_{i,j} = \omega_{i,j} = \frac{-\hbar^2}{2m_e^*} \left[\frac{1}{R^2} \frac{1}{\sin(i\Delta\theta)^2(\Delta\varphi)^2} \right]. \end{aligned}$$

После численного решения матрицы размерности $N\theta \times N\varphi$ неизвестных, собственная энергия донора и собственная функция (ED) и $\psi D(\theta, \varphi)$) будет найдена. Кроме того, собственная энергия ($E0$) и собственная функция ($\psi 0(\theta, \varphi)$) электрона могут быть получены с помощью *FDM*. При отсутствии примесей полученные численные результаты совпадают с точными собственными энергиями. В этой работе также была исследована энергия связи донора основного состояния, которая определяется как:

$$E_B = E_0 - E_D \quad (33)$$

3.3 Результаты и выводы

В численном расчете исследование энергии электрона основного состояния, донора и связи нецентральной примеси в различных геометриях наночастиц, полученных из тончайшей сферической 2D-КТ GaAs, проводилось в приближении сферических координат (R, α, φ) с $0 \leq \alpha \leq \pi$ и $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ и в рамках модели, описанной выше. Обозначим сферические координаты R , α и φ , чтобы не путать их с пространственной координатой электрона. Примесь расположена вдоль основных осей нанопластинок, то есть осей, которые делят двумерную поверхность на две равные области. Значения эффективной массы электрона $m_e^*(\text{GaAs}) = 0.067m_0$, где m_0 – масса свободного электрона, а диэлектрическая проницаемость GaAs равна 12,4. Для обсуждения численных результатов, FDM был принят для $N=60 \times 60$ узлов, а поверхность нанопластинок QD равна $S_{nf} = R^2\varphi(1 - \cos \alpha)$, где φ и α – максимальные азимутальный и полярный углы, соответствующие краям нанопластинок соответственно.

Чтобы изучить поверхностные электронные состояния девяти геометрий наночастиц, на рисунках иллюстрация изменения электронной энергии основного состояния в зависимости от радиуса (рисунок 11), угла θ (рисунок 12) и угла α (рисунок 13) сферической КТ. Некоррелированная энергия электрона (без примеси) получается путем решения уравнения Шредингера путем исключения кулоновского потенциала ($VD = 0$) и использования электронной волновой функции. На рисунках 11, 12, 13 можно увидеть, что энергия электрона сохраняет такое же поведение в зависимости от геометрических параметров, при которых оно увеличивается с уменьшением поверхности нанопластинок. Из-за уменьшения радиуса и углов (α и φ), происходит уменьшение поверхности зоны удержания. При максимальных значениях α и φ , т.е. $\alpha = 180^\circ$ и $\varphi = 360^\circ$, энергетическое поведение системы аналогично поведению ультратонкой сферической квантовой точки. С другой стороны, при заданном значении $\varphi \leq 360^\circ$ и $\alpha \leq 180^\circ$ увеличение радиуса кривизны приводит к образованию почти плоских нанопластинок, и их энергия их электронов стремится к собственным энергиям

квантовой ямы, которая изображена на рисунке 11. Можно отметить, что увеличение радиуса двумерной квантовой точки с $\varphi \leq 360^\circ$ и $\alpha \leq 180^\circ$ уменьшает удержание частиц и увеличивает степень их свободы вдоль поверхности, а когда поверхность становится тоньше, энергия электронов стремится к их энергии в хорошо ограниченной квантовой яме. Опять же, при заданном значении радиуса и бесконечных комбинациях углов θ и α мы можем получить одинаковые значения поверхности наночастиц (S_{nf}). Однако расчеты показывают, что энергия электронов в двух различных структурах с одной и той же поверхностью различна, что объясняет, почему значение энергии электронов основного состояния нанопластинок, с геометрией $\varphi = 360^\circ$ и $\alpha = 120^\circ$ и $\varphi = 270^\circ$ и $\alpha = 180^\circ$ ($S_{nf} = 942 \text{ нм}^2$) или $\varphi = 360^\circ$ и $\alpha = 90^\circ$ и $\varphi = 180^\circ$ и $\alpha = 180^\circ$ ($S_{nf} = 628 \text{ нм}^2$) различаются из-за угловой симметрии и характера кривизны системы. Следовательно, форма наносистемы создает эффект, который может быть добавлен к эффекту размера. Результаты показывают, что угловое ограничение двумерных наносистем может значительно изменить энергию зоны проводимости, вызванную высокой плотностью и сильным квантовым ограничением электронов, что приводит к большей ширине запрещенной зоны в нанопластинках, чем общая ширина запрещенной зоны объемного материала и других квантовых систем. Такое поведение может быть полезно для возможности улучшения электрических свойств оптоэлектронных устройств за счет улучшения омического контакта нанопластинок различной толщины [11, 12].

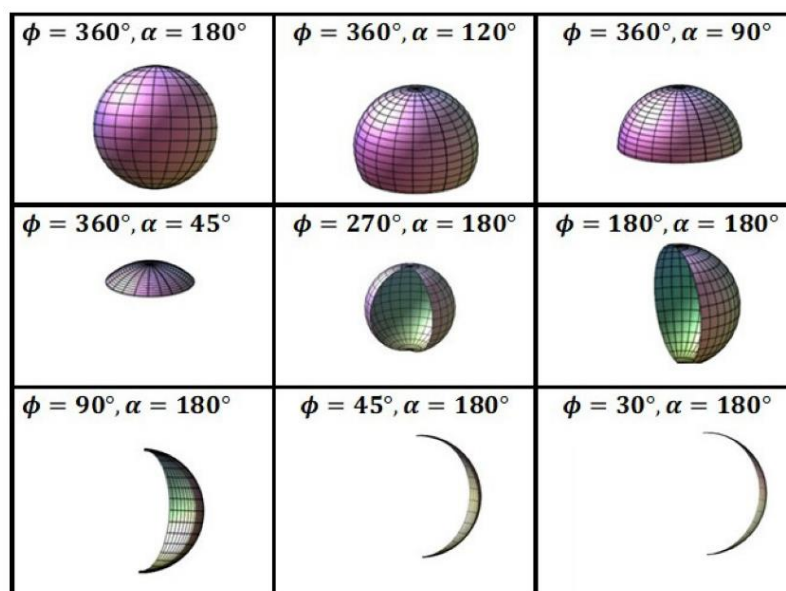


Рисунок 10 – Схематический вид девяти геометрий ультратонких наночастиц 2D-КТ

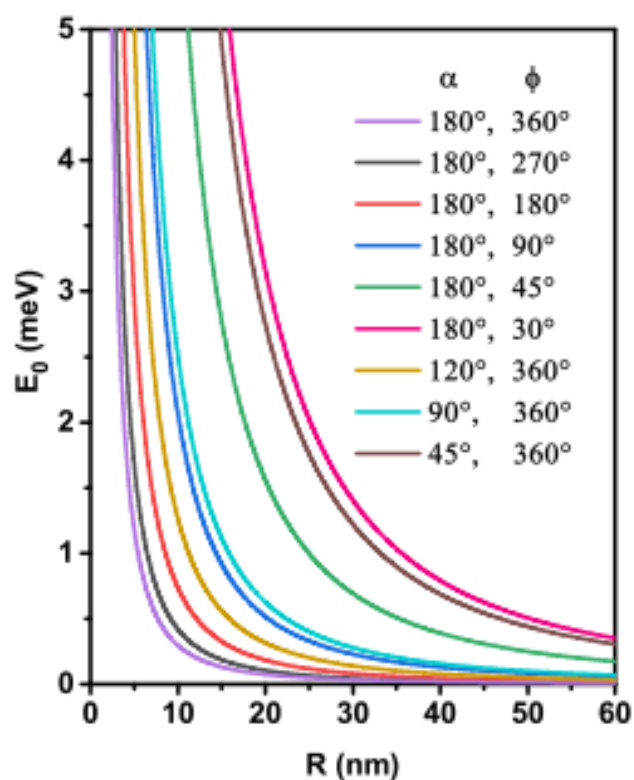


Рисунок 11 – Энергия электронов как функция радиуса для девяти форм нанопластинок

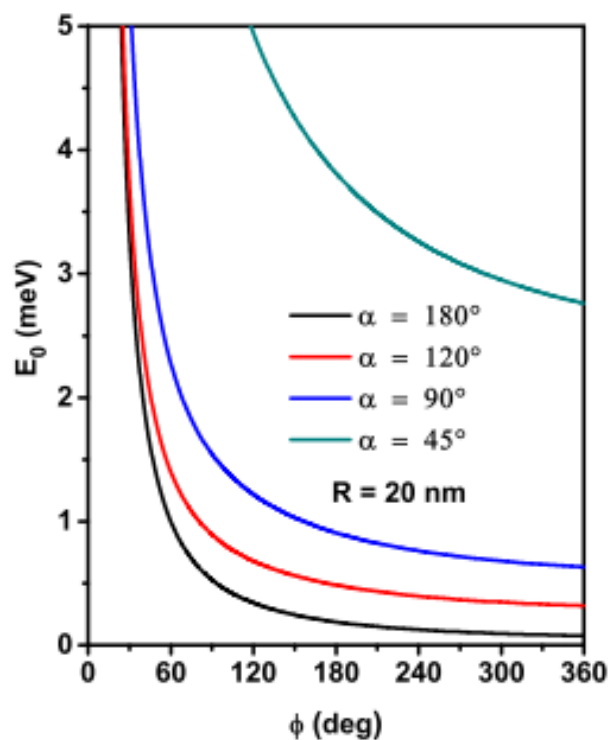


Рисунок 12 – Зависимость θ -угла для энергии электрона с несколькими значениями α -угла при $R = 20$ нм

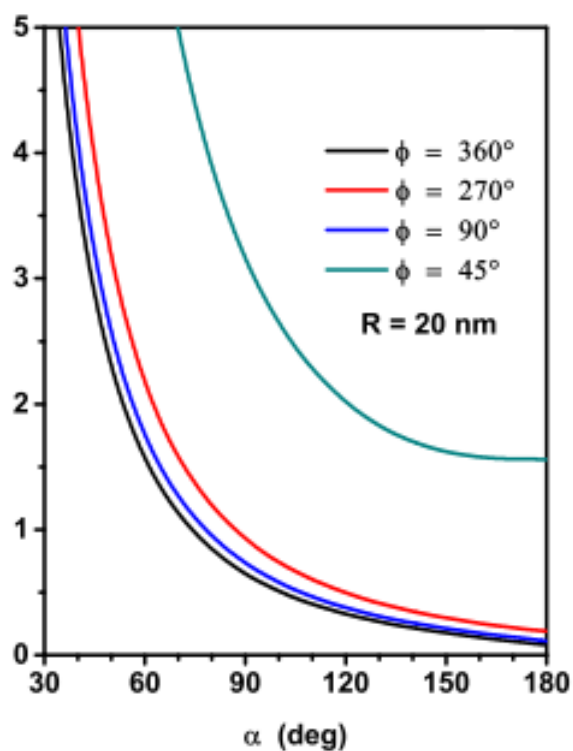


Рисунок 13 – Зависимость энергии электронов от α -угла для нескольких значений ϕ -угла при $R = 20$ нм

Чтобы исследовать характеристики квантовых состояний, рассмотрим задачу на наличие в центре донорного примесного атома. Необходимо приблизиться к точному основному состоянию двумерного атома водорода в различных геометриях наночастиц. На рисунке 14 можно заметить, что энергия донорного состояния зависит от ϕ , α и R -радиуса. Этот рисунок показывает, что вариации кривых энергии донора нестабильны под влиянием радиуса для различных ϕ и α углов из-за конкуренции между типами взаимодействия (притягивающим и отталкивающим). Взаимодействие между электроном и атомом-донором описывается кулоновским потенциалом, который сильно зависит от r_{ie} -расстояния между частицами. Если r_{ie} является большим, постоянная Ван Дер Ваальса будет доминировать, что объясняет величину энергии донора, близкую к -8 МэВ, когда радиус поверхности более значителен, и эта энергия в основном состоянии становится больше в сферической 2D-КТ. С другой стороны, когда радиус поверхности уменьшается, плотность вероятности электрона приближается к атому-донору, расположенному в центре нанопластинок, что создает между ними притягивающее взаимодействие, ответственное за появление минимума. Этот критический радиус становится более важным, при котором атом-донор становится более стабильным, когда нанопластинки достигают сферических поверхностей из-за резкого перехода от сил притяжения к силам отталкивания донора в случае сферических 2D-КТ.

Для сильного удержания, когда расстояние между частицами становится очень маленьким, силы отталкивания становятся более значительными по сравнению с силами притяжения и вызывают быстрое увеличение энергии донора за счет сил отталкивания, и тогда могут быть сформированы количественные состояния. В этом режиме удержания значение донорной энергии в нанопластинках с небольшими поверхностями более значительно, чем в нанопластинках с большими поверхностями. В правой части рисунка показаны результаты нормализованных волновых функций, соответствующих основному и первым трем возбужденным состояниям для $R = 10$ нм, $\alpha = 180^\circ$, и $\phi = 30^\circ$. Можно заметить, что волновые функции обращаются в нуль на границах

структуры, что накладывается условиями Дирихле в задаче. Из-за относительно небольшого значения ϕ -угла ($\phi = 30^\circ$) ясно, что возбужденные состояния фундаментально связаны с появлением пучностей вдоль самого длинного измерения структуры[13].

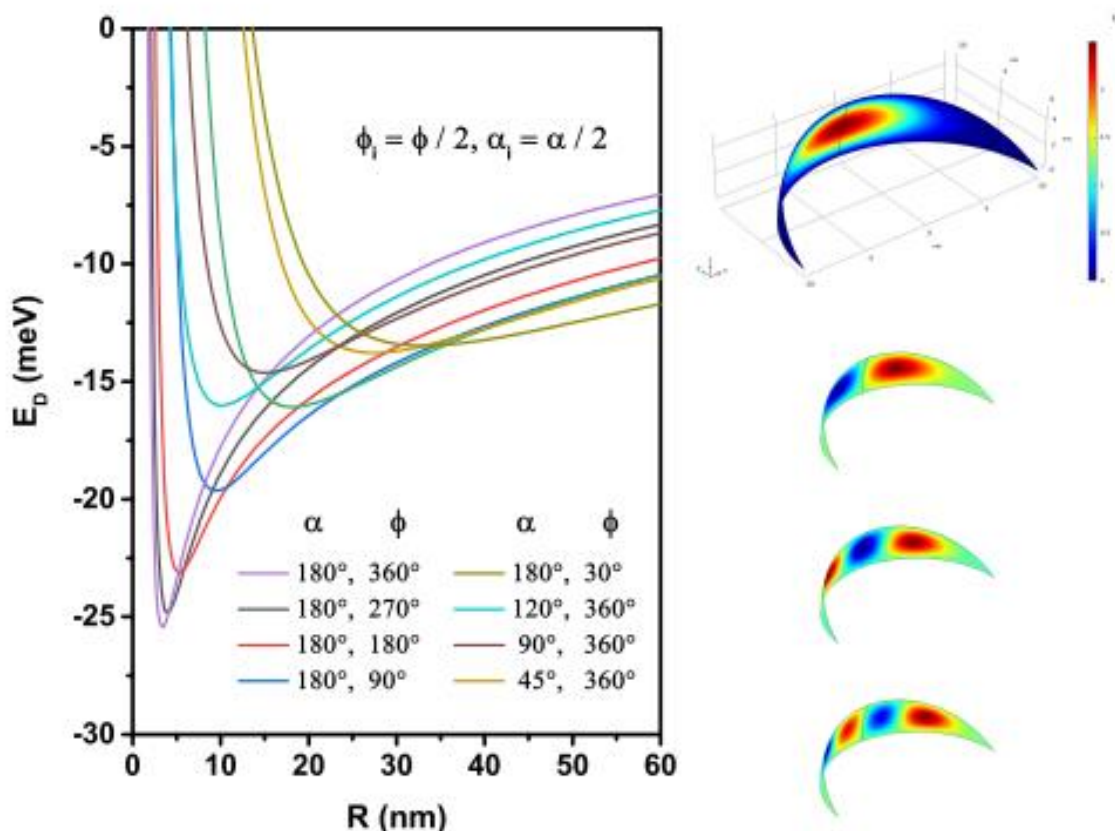
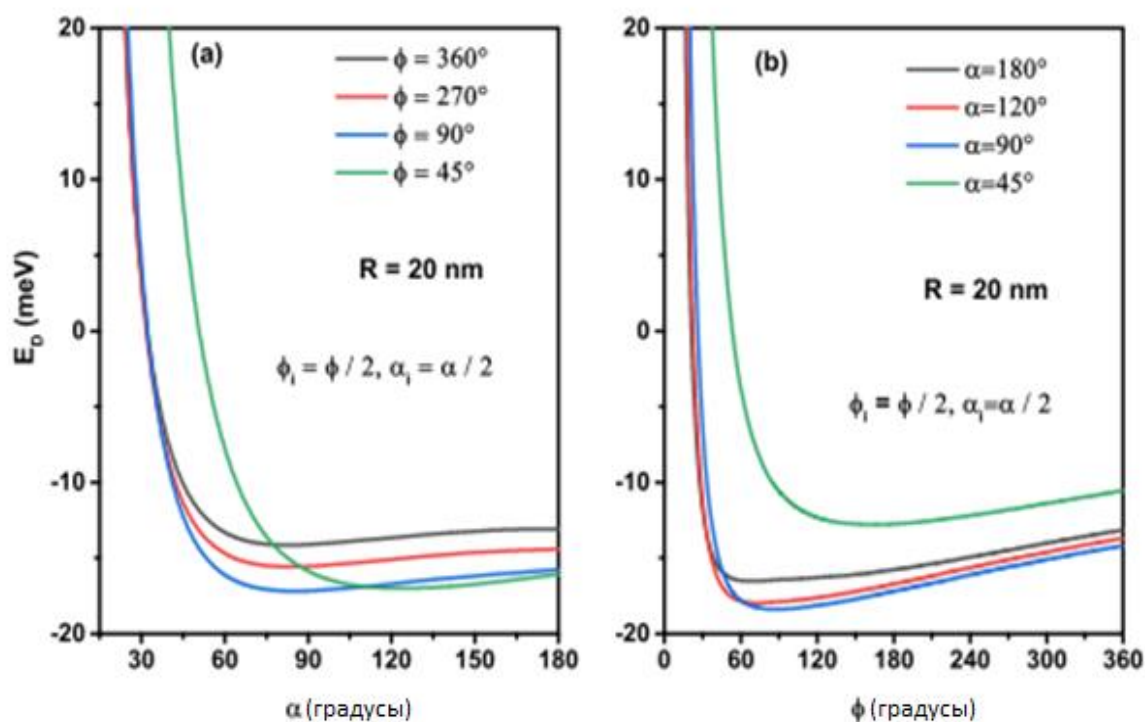


Рисунок 14 – Изменение энергии основного состояния донорной примеси в центре в зависимости от радиуса нанопластинок при различных установках углов α и ϕ .

На рисунке справа показаны результаты нормализованных волновых функций, соответствующих основному и первым трем возбужденным состояниям для $R = 10$ нм, $\alpha = 180^\circ$ и $\phi = 30^\circ$. Красный и синий цвета соответствуют максимуму и минимуму волновой функции соответственно.

Чтобы четко понять эффекты ϕ и α -угла, соответствующие различным формам наночастиц, на атом-донор основного состояния, рассмотрим на рисунке 15 энергию донора как функцию ϕ -азимутального (а) и α -полярного углов (б) для заданного значения радиуса искривления ($R = 20$ нм), при этом донор примеси всегда локализован в центре тяжести нанослойки. При некоторых значительных

значениях полярного угла энергия донора быстро уменьшается по мере увеличения азимутального угла, пока не достигнет минимума, в котором атом будет более стабильным, а затем слабо увеличится. Действительно, энергия донора выше, когда система удержания более значительна. Поскольку углы удержания меньше, энергия атома-донора выше. Однако численные расчеты показывают, что энергия донора увеличивается за счет увеличения полярного угла при большом значении азимутального угла. Это поведение может быть объяснено, поскольку кулоновский эффект притяжения более значим, чем эффект удержания; следовательно, преобладает сила притяжения. Результаты показывают, что изменение энергии донорного атома в зависимости от наименьшего сферического радиуса и углов φ и α принимает, соответственно, типы проводящей связи и вторичной связи, соответствующие кривым Леннарда Джонса. Комбинированное изменение углов и радиуса искривления наночастиц приводит к регулировке энергии двумерного атома водорода, и они могут насыщать его атомы электронным путем. В результате связей, которые атом-донор связывает с соседними атомами того же материала создают адсорбционный тип на поверхности путем улучшения термодинамических свойств двумерных нанопластинок, что открывает новые технологические возможности[14].



а) как функция угла α для нескольких значений угла ϕ ; б) как функция угла ϕ для нескольких значений угла α . Расчеты предназначены для $R = 20$ нм.

Рисунок 15 – Энергия донорной примеси в центре

Рассмотрим на рисунках 16-18 поведение электрона, который взаимодействует с донорной примесью, специально исследуя влияние координат сферической поверхности и положения примеси на энергию связи. На рисунке 16 изучение эффекта размера, скорректированного радиусом кривизны, для девяти геометрий наночастиц с примесью, расположенной в центре тяжести каждой наночастицы. Согласно принятой модели потенциала ямы с бесконечно высокими стенками, поведение энергии связи следует хорошо известной тенденции, которая увеличивается с усилением эффекта удержания. Аналогично, энергия связи донора монотонно уменьшается с увеличением R , что связано с увеличением эффективного r_{ie} , расстояния между частицами из-за расширения площади нанопластинок. Как можно заметить, на интервале рассматриваемого радиуса, было обнаружено небольшое увеличение энергии связи при уменьшении полярного (α) или азимутального (ϕ) углов, главным образом, в нанопластинках малого радиуса. Увеличение эффекта удержания (двумерная система стремится к

нулю, т.е. x стремится 0 и φ стремится 0) приводит к большей пространственной локализации электронов доноров в небольшой области, и их кинетическая энергия становится более существенной. Важно, что существуют пересечения между некоторыми кривыми энергии связи (например, $R = 15$ нм), что важно для изготовления нанопластинок. Для больших значений радиуса, R стремится к бесконечности, его могут создать два эффекта удержания: (I) для нанопластины при $\alpha = 45^\circ$ и $\varphi = 360^\circ$ его энергия связи принимает значение ультратонкого двумерного квантового диска, и (II) при $\varphi = 45^\circ$ и $\alpha = 180^\circ$ нанослой стремится приблизиться к ультратонкой форме, напоминающей форму «плоскости глаза», и их энергия связи равна меньше, чем энергия связи в двумерном квантовом диске. Таким образом, управление площадью нанопластины приводит к энергетическому сдвигу оптических откликов в сторону высокой энергии (синее смещение) за счет уменьшения радиуса искривления и углов в нем.

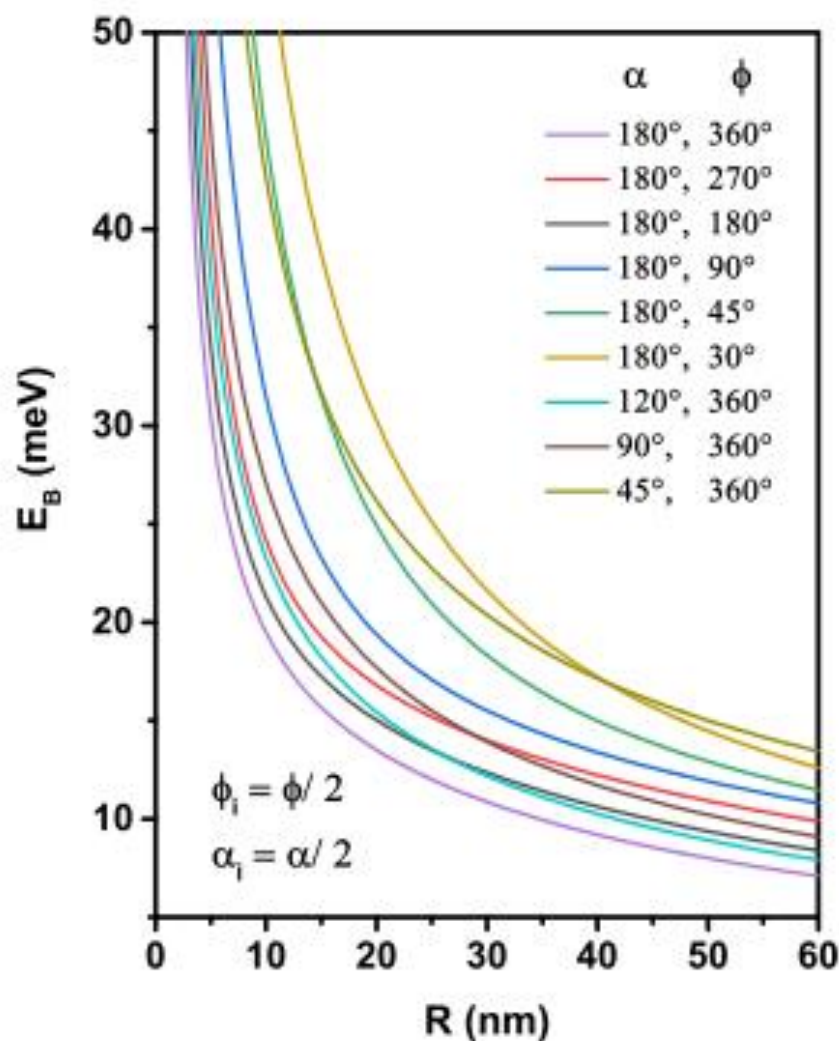
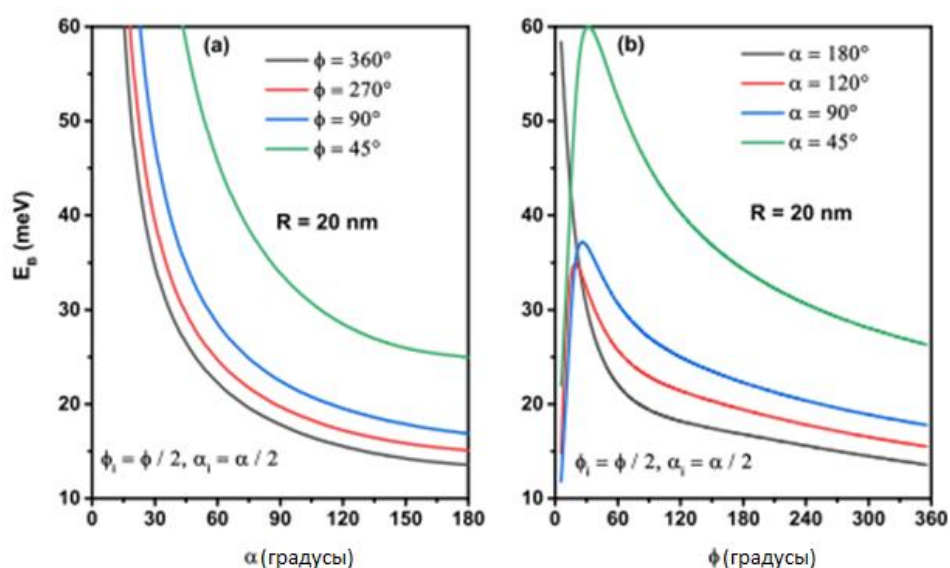


Рисунок 16 – Изменение энергии связи донорной примеси в центре в зависимости от радиуса нанопластинок для девяти различных настроек α и ϕ углов

Чтобы дать больше информации о влиянии углов, описывающих края нанопластинок, на энергию связи донорной примеси, размещенной в центре наноструктуры с изогнутым радиусом $R = 20$ нм, представим на рисунке 17 ее изменение в зависимости от ϕ -полярного угла для нескольких азимутальных углов. На рисунке 17а энергия связи донора показывает монотонное уменьшение с увеличением полярного угла наноструктуры. Увеличение азимутального угла означает увеличение площади квантовой точки, поэтому орбиталь монодонора более вытянута, и, следовательно, притяжение донора-электрона уменьшается. На рисунке 17б изображено изменение энергии связи в зависимости от ϕ для того,

чтобы визуализировать критическое значение энергии связи монодонора, когда система более стабильна. При $\alpha=180^\circ$, когда ϕ уменьшается с 360° до нуля, энергия связи увеличивается и перемещается от самой тонкой сферической поверхности к полукругу, что можно рассмотреть как 1D квантовую проволоку, а и волновая функция электрона, следовательно, обладает s-образной симметрией. При повороте на $\alpha \leq 180^\circ$ наблюдалось сильное изменение энергии связи. Действительно, при фиксированном полярном угле энергия связи увеличивается за счет уменьшения азимутального угла до тех пор, пока он не достигнет критического значения, при этом достигается максимальная стабильность системы, которая может быть достигнута, а затем уменьшается. Этот эффект становится более значительным при малых ϕ из-за формы нанопластинок, в которых не сохраняется симметричного распределения волновой функции [15].



а) как функция азимутального угла для нескольких значений α – угла; б) как функция полярного угла для нескольких значений ϕ – угла. Результаты приведены для $R = 20$ нм.

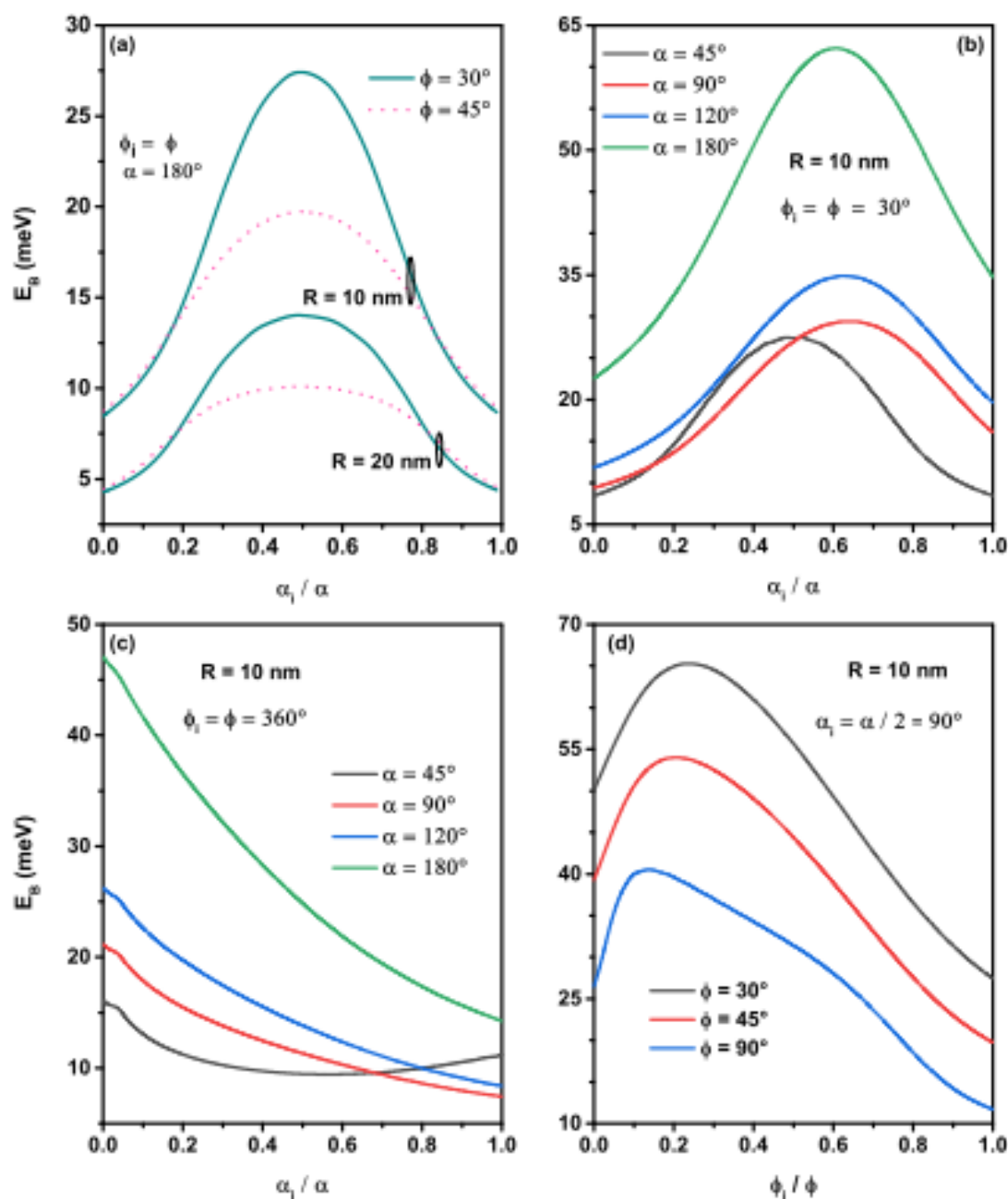
Рисунок 17 – Энергия связи донора в центре

Атом-донор может располагаться в любом месте нанопластинок, и его смещение в различных направлениях систем квантового удержания рассматривается как существенный фактор, связанный с изменением энергии

связи. Чтобы объяснить эффект смещения наряду с основными направлениями каждой формы нанопластинок, рассмотрим на рисунке 18 изменение энергии связи примеси в основном состоянии, соответствующее формам, показанным на рисунке 10а. Как видно на рисунке 18а-с, энергия связи принимает максимальное значение, когда примесь расположена в центре тяжести наноструктур, обусловлено максимальной плотностью вероятности нахождения электронов в этом положении. Следовательно, связь электрон-донор является более важной.

Для каждой кривой на рисунке 18а,б обнаружено, что энергия связи увеличивается до тех пор, пока не достигнет максимального значения, затем она уменьшается, когда смещение донора составляет от 0 до α в соответствии с направлением вдоль края нанопластинок ($\phi_i = \phi$). Следовательно, электронно-донорное взаимодействие является менее связанным, когда примесь находится при $\alpha_i = 0^\circ$ и 180° . Для заданного значения радиуса ($R = 10$ нм и 20 нм) на рисунке показано, что влияние d -азимутального угла на энергию связи более значительно, когда положение примеси находится вблизи центра ($\alpha = \alpha_i/2$). По этой причине рассмотрим полярное положение донора $\alpha = \alpha_i/2$ на предыдущих рисунках. Кроме того, на том же рисунке мы можем видеть, что по мере уменьшения R -радиуса уменьшение азимутального угла приводит к увеличению энергии связи, и этот эффект более четкий при $R = 10$ нм, чем при 20 нм, из-за существенного ограничения электронной волновой функции. Напротив, увеличение азимутального угла увеличивает энергию связи, когда примесь находится вблизи угла структур наночастиц. Это поведение можно описать следующим образом: (I) симметрия атомных орбиталей ограничена углом и (II) плотность вероятности распространяется вблизи положения донора. Увеличение энергии связи с увеличением апертуры наноструктур, когда примесь локализуется в углу. Также можно увидеть из рисунка 18б, что максимальное значение энергии связи будет смещено от центра (α_i не равно 0.5α), когда полярный угол не является полным, т.е. $\alpha < 180^\circ$, поскольку система не сохраняет свою симметрию, и максимальное значение увеличивается при уменьшении полярного угла[16].

Для полного значения азимутального угла, $\varphi = 360^\circ$, изменение энергии связи в зависимости от положения полярной примеси для различных полярных углов показано на графике рисунка 18с. Из рисунка следует, что энергия связи максимальна, когда донор расположен в сферическом колпачке ($\alpha_i = 0^\circ$), и монотонно уменьшается, при трех полярных углах ($\alpha = 45^\circ$, $\alpha = 90^\circ$ и $\alpha = 120^\circ$). Из-за слабой локализации волновой функции электрона кулоновское взаимодействие электрон-донор уменьшается по мере продвижения донора к краям, что приводит к уменьшению энергии связи. Важно отметить, что энергия связи принимает одинаковое значение при $\alpha_i = 0$ и 180° , что является причиной симметрии наноструктуры при $\alpha = 180^\circ$, и волновая функция основного состояния, а также кулоновский потенциал донора смещаются вдоль направления.



а) с учетом двух азимутальных углов ($\phi = 30^\circ$ и 45°) и двух радиусов наночастиц ($R = 10$ нм и 20 нм); б) различные полярные углы ($\alpha = 45^\circ, 90^\circ, 120^\circ$, и 180°) с $\phi_1 = \phi = 30^\circ$ и $R = 10$ нм ; в) с различными полярными углами ($\alpha = 45^\circ, 90^\circ, 120^\circ$, и 180°) при $\phi_1 = \phi = 360^\circ$ и $R = 10$ нм; г) результаты являются функцией азимутального положения примеси для трех азимутальных углов ($\phi = 30^\circ, 45^\circ$ и 90°) при $\alpha_1 = \alpha = 90^\circ$ и $R = 10$ нм.

Рисунок 18 – Энергия связи основного состояния в зависимости от положения примеси

Чтобы дать больше информации об эффекте смещения примеси наряду с направлением, на рисунке 18d показано изменение энергии связи в зависимости от азимутального положения примеси для трех азимутальных углов, $\varphi = 30^\circ, 45^\circ$ и 90° с $\alpha i = \alpha/2 = 90^\circ$. Поскольку положению примеси позволено смещаться от первого края нанопластины ко второму краю, энергия связи в основном состоянии первоначально увеличивается, достигает предела, а затем уменьшается. Это более важно в $\varphi i = 0^\circ$, чем в $\varphi i = \varphi$. Максимальное значение энергии связи смещается по мере того, как примесь смещается примерно на $\varphi i = 0,2\varphi$. Различные максимумы могут быть объяснены тем фактом, что примесь расположена вблизи центра тяжести и взаимодействием электронной плотности с кулоновским потенциалом донора. Также можно показать, что при меньшем азимутальном угле $\varphi = 30$ энергия связи больше, и их максимум равен 65,30 МэВ для одиночного донора, расположенного при $\varphi i = 7^\circ$ и $\alpha i = 90^\circ$ и заключенного в нанопластинку размером $R = 10$ нм, $\varphi = 30^\circ$ и $\alpha = 90^\circ$.

3.4 Выводы

В данном разделе представлено теоретическое исследование нескольких геоматериалов из ультратонких наночастиц GaAs путем изучения их энергетических характеристик. Были получены вогнутые и плоские наночастицы 2D-КТ, с контролируемым радиусом кривизны. Структуры нанопластинок, полученные из сферической поверхности КТ, характеризуются соблюдением параметров (радиус R и два угла α и φ). При бесконечном потенциальном барьере собственная энергия основного состояния и волновая функция заключенного электрона определяются на основе решения двумерного уравнения Шредингера в приближении эффективной массы с использованием метода конечных разностей. Рассматривается наличие донорной примеси в центре или вне центра в любом месте нанопластинок. Без донорной примеси результаты показывают, что энергия электронов монотонно уменьшается при увеличении параметров наночастиц (R , α и φ). Значение энергии электронов для вертикальной полусферической поверхностной наноструктуры более выражено, чем для горизонтальной

полусферической поверхностной формы, хотя они имеют одинаковые значения поверхности.

В присутствии донорного атома, локализованного в гравитационном центре каждой нанопластинки, при меньшем радиусе кривизны энергия донора возрастает, когда площадь нанопластинок становится маленькой, за счет уменьшения азимутального и полярного углов.

Вычисления также были приложены к привязке энергия для центрированного и нецентрированного атома-донора. Было обнаружено небольшое увеличение энергии связи с уменьшением парных углов (α , ϕ), главным образом в нанопластинках малого радиуса, и было обнаружено пересечение между двумя энергиями связи двух разных геометрий.

Наблюдалось странное поведение изменения энергии связи с уменьшением полярного угла, что объясняет переход от двумерной системы к трехмерной. Смещение донорной примеси к краям, особенно в основной оси наноструктур, создает максимальное значение энергии связи, и амплитуда этого максимума увеличивается с уменьшением площади нанопластинок. Напротив, положение примеси обладает высокой энергетической эффективностью в поверхностных состояниях, что может улучшить производительность оптоэлектронных устройств на основе очень тонких двумерных нанопластинок.

В ходе выполнения работы выполнено теоретическое моделирование свойств электронов, связанных со смещенной от центра донорной примесью, заключенной в ультратонких нанопластинках различной геометрии. В данной модели рассмотрена поверхность с кривизной, которая соответствует сферической геометрии, то есть система состоит из поверхности, взятой как часть сферы с нулевой толщиной. В этом смысле модель идеальна, поскольку в целом слоистые системы имеют толщину не менее атома. Кроме того, в модели был рассмотрен потенциал ямы с бесконечно высокими стенками, который является отличной моделью для описания наночастиц, окруженных вакуумом или воздухом, который преобразуется в бесконечный потенциал удержания, который предотвращает выход носителей заряда из гетероструктуры.

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

В рамках исследований в области нанотехнологий, инженер-исследователь сталкивается с задачей разработки методов получения, исследования и контроля параметров наноструктур. Эта работа требует взаимодействия с различным технологическим и исследовательским оборудованием. Однако, чтобы обеспечить оптимальные условия труда, необходимо уделить внимание организации рабочих помещений, в которых будет работать инженер-исследователь.

В лаборатории, где инженер-исследователь занимается научной деятельностью, стены окрашены в бежевый цвет, потолок окрашен в белый цвет, а на полу уложен линолеум. Однако, для обеспечения нормальных условий труда необходимо учитывать размеры помещения, количество работников и размещение технологического и исследовательского оборудования.

Согласно санитарно-гигиеническим нормам, на каждого работника должны быть предусмотрены следующие ограничения: объем помещения не менее 19,5 м³ и площадь помещения, огороженного стенами или перегородками, не менее 6 м². Помещение также должно соответствовать требованиям по чистоте воздуха (согласно ГОСТ 12.1.005-88), температуре (согласно ГОСТ 12.1.005-88), освещению (согласно СП 52.13330.2016), шумоизоляции (согласно ГОСТ 12.1.003-2014) и другим аспектам, связанным с охраной труда.

Важно отметить, что создание оптимальных условий труда во всех аспектах, связанных с научной работой в области нанотехнологий, играет важную роль в повышении эффективности работы инженера-исследователя и, в конечном итоге, в достижении научных результатов.

				ПГУ 2. 11.03.04. 003 ПЗ			
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата			
Разраб	Голубева						
Провер	Игашина						
И. Контр	Рыжова						
Утверд							
Анализ влияния освещенности научно-исследовательской лаборатории на работу инженера-исследователя					Лист	Лист	Листов
						53	73
					Гр.20ПД1		

Рабочее место инженера-исследователя является ключевым элементом производственной цепочки и должно соответствовать стандартам, обеспечивающим комфортную работу и экономию времени и энергии оператора. Важно использовать стандартные размеры рабочего стола (1100x650 мм) для размещения необходимого оборудования. Однако также важно учитывать рациональное использование производственных ресурсов и удобство обслуживания компьютерных устройств, а также соблюдение требований по охране труда. Отсутствие должных условий на рабочем месте может иметь серьезные последствия, что недопустимо при выполнении исследовательских задач.

Ключевым элементом рабочего места инженера-исследователя является комплект оборудования, размещенный на стандартном рабочем столе. Этот комплект включает в себя компьютер с системным блоком, жидкокристаллическим монитором, клавиатурой и мышью, а также экраном и классной доской. Для более эффективного выполнения задач рабочее место руководителя лаборатории оснащено четырьмя персональными компьютерами. Важно учитывать, что планировка рабочего места должна соответствовать стандартам, чтобы обеспечить комфортную работу, экономию энергии и времени оператора, рациональное использование производственных ресурсов и соблюдение правил охраны труда.

Для обеспечения комфортной и безопасной работы оператора-исследователя в рабочих условиях необходимо должным образом оборудовать рабочее место.

Первой зоной работы инженера-исследователя является исследование фотопроводимости. Рабочее место должно быть оборудовано компьютером, включающим в себя системный блок, монитор, клавиатуру, мышь, а также установку для измерений.

Второй зоной работы инженера-исследователя является изучение электропроводности полупроводников в широком диапазоне температур. Рабочее место должно в себя включать блок питания, амперметр и вольтметр, а также

установку для контроля изменения температур полупроводников в диапазоне 70 – 850 К. Данный набор оборудования необходим для исследования свойств полупроводников в широком температурном диапазоне и применения их в различных областях промышленности.

Третья зона работы связана с изучением свойств фотодиодов. Рабочее место должно быть оборудовано установкой, включающей в себя фотодиоды и соответствующие им светодиоды различных цветов, блоком питания, осциллографом, вольтметром. Такой набор оборудования необходим для анализа поведения фотодиода при освещении его излучением различных длин волн. Работа в лаборатории требует концентрации и внимательности. Надлежащее оборудование рабочего места позволит инженеру-исследователю выполнять свои задачи более эффективно, а также снизит риск возможного вредного воздействия на здоровье.

Исследование влияния факторов окружающей среды на рабочее состояние человека и его производительность представляет собой важную задачу в области улучшения условий труда и обеспечения защиты здоровья сотрудников. Естественное или искусственное освещение рабочего места, уровень влажности, температура воздуха, а также шум и электромагнитное излучение, могут негативно повлиять на работника. Кроме того, перенапряжение зрительного аппарата, запыленность воздуха и уровень статического электричества также могут оказать вредное воздействие.

Применение анализа указанных факторов и оценка их уровня играют важную роль в определении мер по улучшению условий труда. Например, контроль температуры и влажности, регулирование освещения, а также снижение уровня шума и электромагнитного излучения могут существенно снизить риски для работников и повысить общую производительность. Для обеспечения безопасности и комфорта работников также необходимо реализовать защитные и профилактические меры. Это может включать в себя непрерывный мониторинг уровня шума и электромагнитного излучения, установку фильтров и систем вентиляции для очистки воздуха от загрязнений, а также обеспечение

					ПГУ 2. 11.03.04. 003 ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата		55

соответствующего освещения и поддержание оптимального температурного режима.

Лаборатории – это места, где проводятся научные эксперименты и исследования в различных областях знаний. Работа в таких помещениях требует учета рисков для здоровья и безопасности сотрудников. Особую озабоченность вызывают уровни ионизирующего излучения, которые, в соответствии с ГОСТ Р 52241-2004 может представлять опасность для здоровья человека, если допустимые пределы этого параметра превышены, и должны быть приняты соответствующие защитные меры. Работники научных лабораторий также подвергаются риску поражения электрическим током при работе с электрооборудованием; ГОСТ 12.4.026-2015 определяет соответствующие меры, которые необходимо принять для предотвращения подобных инцидентов.

Стресс также может стать причиной заболеваний и психических расстройств работников научных лабораториях. В то же время умственное переутомление может негативно сказаться на качестве и точности исследований.

В области безопасности научных лабораторий важным фактором является предотвращение пожаров. ГОСТ 12.1.044-2018 устанавливает различные меры по профилактике и тушению пожаров в лабораторных помещениях. Также следует отметить, что безопасность персонала напрямую зависит от соблюдения определенных параметров микроклимата. Работа в условиях повышенной температуры воздуха или сильного загрязнения может представлять риск для здоровья. В соответствии с ГОСТом 12.1.005-88 установлены стандарты предельно допустимых параметров микроклимата для научных лабораторий, которые должны строго соблюдаться и регулироваться соответствующим образом.

Рабочие зоны инженеров в институте соответствуют установленным нормам по уровню шума, не превышающим 60 дБА, в соответствии с требованиями ГОСТ 12.1.012-2004. Оценка воздействия электромагнитных полей на человека также проводится в соответствии с текущими стандартами.

Допустимые значения электромагнитных параметров определены в соответствии с ГОСТ Р 54148-2010, который устанавливает методы определения параметров электрических и магнитных полей, создаваемых бытовым и аналогичным электрооборудованием на частотах до 300 ГГц.

Рабочие места инженеров-исследователей оснащены 17-дюймовыми ЖК-мониторами *Samsung SyncMaster 710N*, которые обладают разрешением 1280×724 пикселей и частотой обновления 75 Гц. Эти мониторы соответствуют стандартам ТСО-99 и обеспечивают необходимый уровень электромагнитного излучения.

Электробезопасность лаборатории обеспечена в соответствии с требованиями ГОСТ 12.4.026-2015. Помещение, где проводятся работы, относится к группе помещений с низким риском поражения электрическим током. Это обусловлено отсутствием возможности контакта человека одновременно с заземленной металлической конструкцией или металлическим корпусом электрооборудования, отсутствием токопроводящей пыли, а также тем, что тип пола является токопроводящим в соответствии с ПУЭ 1.1.13.

Устройства питаются от сети переменного тока с напряжением 220 В и имеют номинальное напряжение до 1000 В благодаря заземлению. Все устройства герметизированы для обеспечения безопасности сотрудников. Защитное заземление предусмотрено в соответствии с ПУЭ 1.7.55 для предотвращения несчастных случаев, вызванных прикосновением к корпусу в случае короткого замыкания активного кабеля в корпусе оборудования.

Таким образом, институт обеспечивает высокий уровень электробезопасности своих сотрудников, должным образом следуя инструкциям и техническим требованиям.

Согласно ГОСТ 12.1.030-81, компьютер подключается к сети переменного тока напряжением 220 вольт через трехконтактную вилку, третий контакт которой заземлен. При проведении исследований, эксплуатации, обслуживании и ремонте компьютера необходимо соблюдать ряд правил. В частности, запрещается менять вилку любого электрического оборудования, подключенного к сети. Запрещается обслуживать или открывать корпус, когда он находится под напряжением, во

избежание несчастного случая. Не рекомендуется работать с неизвестным электрооборудованием или если оборудование ненадежно заземлено.

При проведении научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ в лаборатории необходимо учитывать возможность возникновения пожара. Согласно статистике, основными причинами пожаров являются неисправное электрооборудование, неисправности в электрических сетях и нарушение правил эксплуатации и пожарной безопасности.

Для снижения риска возникновения пожара ГОСТ 12.1.044-2018 предусматривает различные меры. Например, применение автоматических выключателей прямого доступа для быстрого отключения оборудования в случае неисправности. Кроме того, огнетушители, заряженные огнетушащим веществом(ОТВ) массой 2 кг предназначены для тушения пожаров на технологическом оборудовании и комплектуются в соответствии с требованиями технических условий.

Аварийные выходы представляют собой еще один важный элемент безопасности, обеспечивающий быструю эвакуацию из лаборатории в случае пожара. Также целесообразно провести инструктаж по пожарной безопасности, чтобы предоставить сотрудникам полезную информацию о предотвращении пожара и правильном поведении в случае его возникновения.

Правильное освещение в лаборатории играет ключевую роль в работе инженеров-исследователей. Его внедрение требует соблюдения гигиенических, технических и экономических требований. Качественное освещение способствует улучшению работоспособности и благополучия сотрудников, а также направлено на повышение производительности труда.

Недостаточная освещенность или недостаток естественного света могут негативно сказаться на зрительном восприятии и функционировании центральной нервной системы. Эти условия могут вызвать головные боли, раздражительность и снижение концентрации внимания, что в свою очередь приводит к уменьшению производительности и затрудняет восприятие информации. С другой стороны, избыточное освещение на рабочем месте может привести к бликам и

					ПГУ 2. 11.03.04. 003 ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата		58

раздражению глаз. Неправильное направление света может вызывать резкие тени и блики на мониторах, что также мешает нормальной работе.

В свете вышеперечисленного важно обеспечить должное освещение в лабораториях. Это достигается правильным расположением и использованием как естественного, так и искусственного освещения, а также соблюдением соответствующих стандартов. Это поможет улучшить работоспособность исследователей и повысить общую производительность. При выборе системы освещения для лабораторной зоны необходимо учитывать требования, установленные в СП 52.13330.2016. Одним из ключевых параметров является освещенность, которая должна соответствовать виду выполняемой работы, особенно визуальной. Кроме того, важно, чтобы освещение было стабильным во время работы, яркость на рабочей поверхности распределялась равномерно, а лампы в осветительных приборах были правильно ориентированы. Электробезопасность, пожарная безопасность, удобство использования, долговечность, экономичность и эффективность системы освещения также играют важную роль.

При работе с наноструктурированными материалами важно, чтобы инженеры-исследователи были осторожны при использовании компьютерных экранов и составлении научно-технической документации. Для обеспечения удобства работы, согласно СП 52.13330.2016, рекомендуется использовать в рабочей зоне комбинированное освещение с уровнем освещенности 200 люкс. Дополнительное искусственное освещение может быть установлено для поддержания постоянной яркости и может использоваться как в светлое время суток, так и в темных помещениях.

Одностороннее естественное освещение предпочтительно для лабораторий. Однако при работе с компьютерными экранами важно помнить, что прямые солнечные лучи и отраженный свет могут вызывать усталость глаз и негативно сказываться на зрении. Поэтому, если это возможно, экраны компьютеров следует располагать напротив окна. В случае невозможности этого, экраны можно установить под углом к окну, чтобы снизить воздействие естественного света.

В лабораториях стены окрашены в светло-бежевые цвета с высокой отражательной способностью, что способствует более равномерному распределению света.

В лаборатории используются люминесцентные лампы *G13* в качестве искусственных источников света. Они обладают более рассеянным светом по сравнению с точечными источниками, такими как лампы накаливания, и имеют высокую светоотдачу, длительный срок службы (примерно 10 лет) и спектральный состав излучаемого света, приближенный к естественному.

Для обеспечения соответствия системы освещения требованиям СП 52.13330.2016 освещенность рассчитывается с использованием точечного метода. Этот метод позволяет получить точные значения освещенности в различных точках рабочей зоны, что обеспечивает возможность контроля и регулирования уровня освещенности в зависимости от выполняемых задач.

Освещенность рабочего места (E) определяется уравнением:

$$E = \frac{F \cdot m \cdot e \cdot p \cdot Y}{1000 \cdot K_3 \cdot h} \quad (34)$$

где m – коэффициент, учитывающий отраженную составляющую света и действие удаленных светильников (1,1 – 1,15); F – световой поток светильника, лм; $e = e_1 + e_2 + \dots + e_i$ – контрольная освещенность при установке в светильнике лампы мощностью 1000 лк; p – расстояние от плоскости опорной точки до плоскости проекции светильника, м; $Y = Y_1 + Y_2 + \dots + Y_i$ – коэффициент, учитывающий переход от горизонтальной плоскости к вертикальной; K_3 – коэффициент определенного запаса, который учитывает загрязнение светильников и износ источников света (1,2 – 2); h – высота подвеса светильника над расчетной поверхностью, м.

Лаборатория имеет длину 8,8 м, ширину 5,6 м и высоту 3,3 м и оснащена девятью источниками света. Каждый светильник оснащен двумя люминесцентными лампами *G13* со световым потоком 1350 лм, следовательно, $F = 2 \cdot 1350 = 2700$ лм. Расположение ламп в помещении показано на рисунке 19.

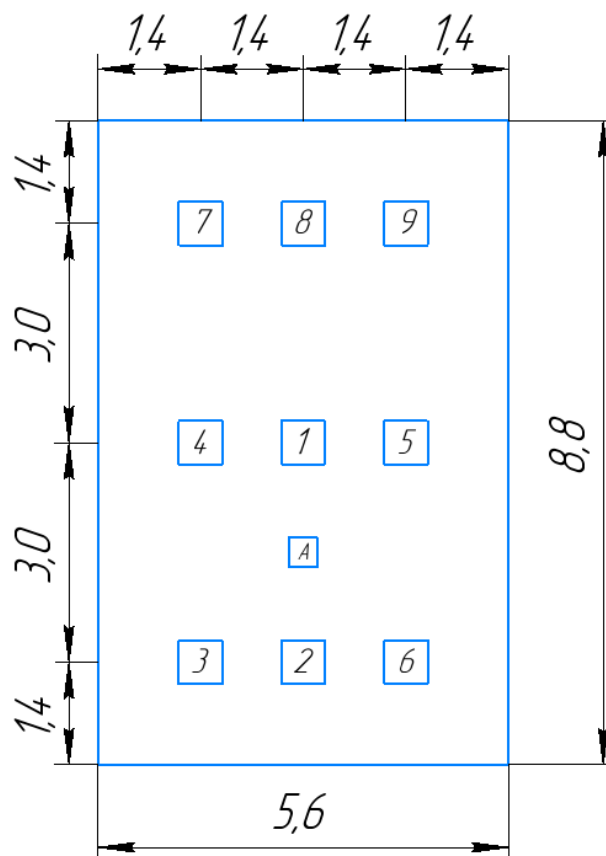


Рисунок 19 – Расположение светильников в научно-исследовательской лаборатории

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

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

$$e_i = \frac{I_\alpha \cos^3 \alpha_i}{h^2}, \quad (35)$$

где I_α – сила света по направлению к точке; α_i – угол между нормалью к поверхности, которой принадлежит точка и лучом падающего света, определяемый выражением:

$$\alpha_i = \arctg\left(\frac{d_i}{h}\right), \quad (36)$$

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

$$d_1=d_2=\sqrt{1,5^2+1^2}=1,8 \text{ м}, \quad (37)$$

$$d_3=d_4=d_5=d_6=\sqrt{1,5^2+1,4^2}=2,05 \text{ м}, \quad (38)$$

$$d_7=d_9=\sqrt{4,5^2+1,4^2}=4,71 \text{ м}, \quad (39)$$

$$d_8=\sqrt{4,5^2+1^2}=4,61 \text{ м}, \quad (40)$$

Определим α_i :

$$\alpha_1 = \alpha_2 = \arctg\left(\frac{1,8}{2,6}\right) = 34^\circ, \quad (41)$$

$$\alpha_3 = \alpha_4 = \alpha_5 = \alpha_6 = \arctg\left(\frac{2,05}{2,6}\right) = 38^\circ, \quad (42)$$

$$\alpha_7 = \alpha_9 = \arctg\left(\frac{4,71}{2,6}\right) = 61^\circ, \quad (43)$$

$$\alpha_8 = \arctg\left(\frac{4,61}{2,6}\right) = 60^\circ. \quad (44)$$

Определим:

$$I_1=I_2=132 \text{ кД}, \quad (45)$$

$$I_3=I_4=I_5=I_6=93 \text{ кД}, \quad (46)$$

$$I_7=I_9=65 \text{ кД}, \quad (47)$$

$$I_8=80 \text{ кД}, \quad (48)$$

$$e_1 = e_2 = \frac{132 \text{ кД} \cos^3 34^\circ}{(2,6 \text{ м})^2} = 11,1 \text{ лк}, \quad (49)$$

$$e_3 = e_4 = e_5 = e_6 = \frac{93 \text{ кД} \cos^3 38^\circ}{(2,6 \text{ м})^2} = 6,7 \text{ лк}, \quad (50)$$

$$e_7 = e_9 = \frac{65 \text{ кД} \cos^3 61^\circ}{(2,6 \text{ м})^2} = 1,6 \text{ лк}, \quad (51)$$

$$e_8 = \frac{80 \text{ кД} \cos^3 60^\circ}{(2,6 \text{ м})^2} = 1,7 \text{ лк}. \quad (52)$$

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

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

Рассчитаем Y_i , по выражению:

$$Y_i = \cos\theta + \frac{d_i}{h} \sin\theta, \quad (54)$$

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

$$Y_1 = Y_2 = 0,7, \quad (55)$$

$$Y_3 = Y_4 = Y_5 = Y_6 = 0,8, \quad (56)$$

$$Y_7 = Y_9 = 1,8, \quad (57)$$

$$Y_8 = 1,7. \quad (58)$$

$$Y = Y_1 + Y_2 + Y_3 + Y_4 + Y_5 + Y_6 + Y_7 + Y_8 + Y_9 = 9,9 \quad (59)$$

Следовательно, можно рассчитать освещенность рабочего места инженера исследователя по выражению (60):

$$E = \frac{2700 \cdot 1,1 \cdot 53,9 \cdot 1 \cdot 9,9}{1000 \cdot 1,5 \cdot 2,6} = 406 \text{лк} \quad (60)$$

Результаты анализа освещенности в рабочей зоне инженера-исследователя свидетельствуют о соответствии системы освещения установленным требованиям безопасности и комфорта, установленным в СП 52.13330.2016. Исследование, основанное на проведенных расчетах, демонстрирует, что условия работы в данном помещении соответствуют стандартам, предусмотренным ГОСТ 12.1.003-2014 и СП 52.13330.2016 для подобных помещений.

Необходимо отметить, что рассматриваемое помещение не является высокорискованным с точки зрения возможности поражения электрическим током. Оборудование, используемое в данном помещении, работает от сети переменного тока с частотой 50 Гц и напряжением 220 В. Приняты меры пожарной безопасности, соответствующие требованиям, предусмотренным в ГОСТ 12.1.004-91. К ним относятся применение выключателей прямого доступа, наличие огнетушителей ОУ-3, а также обеспечение наличия аварийных выходов для оперативной эвакуации в случае пожара.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в настоящей работе рассмотрена теоретическая модель для изучения электрофизических свойств наночешуек на основе арсенида галлия.

Показано, что энергия связи в основном состоянии сильно зависит от геометрии наночешуек, несмотря на одинаковую поверхность.

					ПГУ 2. 11.03.04. 003 ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата		64

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Serpone, N.; Lawless, D.; Disdier, J.; Herrmann, J.-M. *Langmuir* 10, 643, (1994).
2. Osterloh, F.E. *Chem. Mater.* 20, 35, (2008).
3. Bol, A.A.; Meijerink, A. *Phys. Rev. B* 58, (1998).
4. Radovanovic, P.V.; Gamelin, D.R. *Proc. SPIE Int. Soc. Opt. Eng.* 4809, 51, (2002).
5. Qu, F.; Hawrylak, P. *Phys. Rev. Lett.* 96, 157201, (2006).
6. Abolfath, R.M.; Hawrylak, P.; Žutic', I. *New J. Phys.* 9, 353, (2007).
7. Rakhlin, M.V.; Belyaev, K.G.; Klimko, G.V.; Mukhin, I.S.; Kirilenko, D.A.; Shubina, T.V.; Ivanov, S.V.; Toropov, A.A. *InAs/AlGaAs quantum dots for single-photon emission in a red spectral range. Sci. Rep.*, 256, 5299, (2018).
8. Siao, M.D.; Shen, W.C.; Chen, R.S.; Chang, Z.W.; Shih, M.C.; Chiu, Y.P.; Cheng, C.-M. *Two-dimensional electronic transport and surface electron accumulation in MoS₂. Nat. Commun.*, 9, 1442, (2018).
9. Lu, R.; Liu, J.; Luo, H.; Chikan, V.; Wu, J.Z. *Graphene/GaSe-nanosheet hybrid: Towards high gain and fast photoresponse. Sci. Rep.*, 6, 19161, (2016).
10. Gong, C.; Chu, J.; Qian, S.; Yin, C.; Hu, X.; Wang, H.; Wang, Y.; Ding, X.; Jiang, S.; Li, A.; et al. *Large-scale ultrathin 2D wide-bandgap BiOBr nanoflakes for gate-controlled deep-ultraviolet phototransistors. Adv. Mater.*, 32, 1908242, (2020).
11. Sari, H.; Kasapoglu, E.; Sakiroglu, S.; Sökmen, I.; Duque, C.A. *Impurity-related optical response in a 2D and 3D quantum dot with Gaussian confinement under intense laser field. Philos. Mag.*, 100, 619–641, (2020).
12. Kayanuma, Y.; Saito, N. *Wannier excitons on a microsphere. Solid State Commun.*, 84, 771–774, (1996).
13. Pramjorn, N.; Amthong, A. *Donor binding energies in a curved two-dimensional electron system. Appl. Surf. Sci.*, 508, 145195, (2020).
14. Kria, M.; Feddi, K.; Aghoutane, N.; El-Yadri, M.; Pérez, L.M.; Laroze, D.; Dujardin, F.; Feddi, E. *Thermodynamic properties of SnO₂/GaAs core/shell nanofiber. Physical A*, 560, 125104, (2020).

15. Paul, K.K.; Kim, J.-H.; Lee, Y.H. Hot carrier photovoltaics in van der Waals heterostructures. *Nat. Rev. Phys.*, 3, 178–192,(2020).

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

					ПГУ 2. 11.03.04. 003 ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата		66

ПРИЛОЖЕНИЕ А

(обязательное)

Задание на выпускную квалификационную работу

					ПГУ 2. 11.03.04. 003 ПЗ	Лист
						67
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата		

«Утверждаю»
Зав. кафедрой НИМЭ
Пронин И.А.
(фамилия, инициалы)
«05» июня 2024 г.

ЗАДАНИЕ
на бакалаврскую работу

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

Направление подготовки 11.03.04. «Электроника и нанoeлектроника»

Профиль Микроэлектроника и твердотельная электроника

Голубева Ирина Сергеевна

(фамилия, имя, отчество)

2. Руководитель Игошина Светлана Евгеньевна

(фамилия, имя, отчество)

3. Тема бакалаврской работы Теоретическое исследование энергетического спектра наночешуек на основе арсенида галлия

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

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

4.1 Анализ литературных источников с целью изучения физико-химических свойств выбранных в качестве объектов исследования квантовых точек арсенида галлия;

4.2 Анализ методов исследования электронной структуры и физических процессов в полупроводниковых наночешуйках арсенида галлия;

4.3 Моделирование энергетического спектра квантовых точек арсенида галлия различной геометрии.

Объект исследований: квантовые точки на основе арсенида галлия различной геометрии (сферическая, кубическая, цилиндрическая), наночешуйки на основе арсенида галлия в зависимости от радиуса R , углов θ и α сферической КТ.

5. Объем и содержание основной части бакалаврской работы

5. Объем и содержание основной части бакалаврской работы

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

1. Литературный обзор
2. Математические модели квантовых точек
3. Теоретическое исследование электрофизических свойств наночешуек на основе полупроводниковых соединений
4. Анализ влияния освещенности научно-исследовательской лаборатории на работу инженера-исследователя.

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

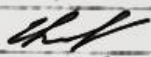
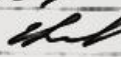
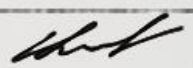
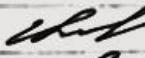
- | | |
|---|-------------------|
| 1. <u>Титульный слайд</u> | <u>Слайд 1</u> |
| 2. <u>Цели и задачи работы</u> | <u>Слайд 2</u> |
| 3. <u>Полупроводниковые нанокристаллы различной геометрии на основе арсенида галлия</u> | <u>Слайд 3, 4</u> |
| 4. <u>Математические модели квантовых точек</u> | <u>Слайд 5</u> |
| 5. <u>Модель ультратонких наночешуек в зависимости от геометрии</u> | <u>Слайд 6, 7</u> |
| 6. <u>Теоретическое исследование электрофизических свойств наночешуек на основе арсенида галлия</u> | <u>Слайд 7, 8</u> |
| 7. <u>Исследование электрофизических свойств наночешуек в присутствии примеси</u> | <u>Слайд 9,10</u> |
| 7. <u>Сравнительный анализ энергетических спектров квантовых точек</u> | <u>Слайд 11</u> |
| 8. <u>Выводы</u> | <u>Слайд 12</u> |

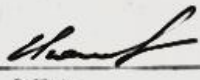
6. Консультанты и содержание дополнительных разделов

6.1. _____

Консультант _____

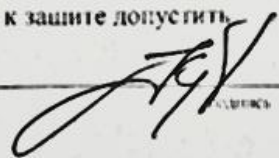
7. Календарный график по выполнению бакалаврской работы

Наименование этапов работы	Объем работы	Срок выполнения	Подпись руководителя, консультанта
Литературный обзор	10%	05.06.24	
Математические модели квантовых точек	20%	06.06.24	
Теоретическое исследование электрофизических свойств наночастиц на основе полупроводниковых соединений	30%	06.06.24	
Анализ влияния освещенности научно-исследовательской лаборатории на работу инженера-исследователя	15%	07.06.24	
Иллюстративная часть	15%	07.06.24	
Оформление пояснительной записки	10%	08.06.24	

Руководитель бакалаврской работы  Игошина С.Е.
Подпись Фамилия, имя, отчество

Дата выдачи задания «05» июня 2024 г.

Задание к исполнению принял  Голубева И.С.
Подпись Фамилия, имя, отчество
«05» июня 2024 г.

Бакалаврскую работу к защите допустить
Декан факультета  Кривчик В.Д.
Подпись Фамилия, имя, отчество
«11» июня 2024 г.

ПРИЛОЖЕНИЕ Б

(обязательное)

Результат проверки работы на оригинальность

					ПГУ 2. 11.03.04. 003 ПЗ	Лист
						71
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата		

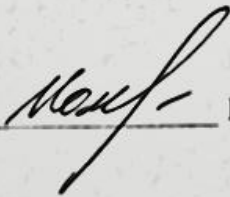
Ректору Пензенского
государственного университета
А. Д. Гулякову
студента 4 курса
очной формы обучения
Голубевой Ирины Сергеевны

ЗАЯВЛЕНИЕ

Я, Голубева Ирина Сергеевна, студент 4 курса очной формы обучения направления подготовки 11.03.04 Электроника и нанoeлектроника, профиль «Микроэлектроника и твердотельная электроника», прошу провести проверку с использованием системы «Антиплагиат ВУЗ» выпускной квалификационной работы на тему «Теоретическое исследование энергетического спектра наночешуек на основе арсенида галлия», 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 ознакомлена с действующим Стандартом университета «Выпускная квалификационная работа обучающихся по образовательным программам высшего образования – программам бакалавриата, программам специалитета и программам магистратуры», согласно которому обнаружение плагиата является основанием для недопуска ВКР к защите и отчисления из университета.

Студент  Голубева И.С. 08.06.24г.

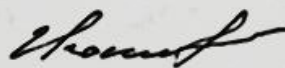
ВКР представлена на проверку 08.06.24

Руководитель ВКР  Игошина С.Е.

Протокол

Проверки на оригинальность в системе «Антиплагиат.ВУЗ» выпускной квалификационной работы на тему «Теоретическое исследование энергетического спектра наночешуек на основе арсенида галлия» студента 4 курса И.С. Голубевой направления подготовки/специальности 11.03.04 Электроника и наноэлектроника Бакалаврской программы «Микроэлектроника и твердотельная электроника» Руководитель ВКР С.Е. Игошина.
Скриншот справки о проверке на оригинальность в системе «Антиплагиат.ВУЗ» приложена на следующей странице.

«10» июнь 2024 г



Игошина С.Е.



АНТИПЛАГИАТ
СОВЕРШЕНСТВО В НАУКЕ

СПРАВКА

о результатах проверки текстового документа
на наличие заимствований

Пензенский государственный университет

ПРОВЕРКА ВЫПОЛНЕНА В СИСТЕМЕ АНТИПЛАГИАТ ВУЗ

Автор работы: Голубева Ирина Сергеевна
Самоцитирование
рассчитано для: Голубева Ирина Сергеевна
Название работы: Теоретическое исследование энергетического спектра наночешуек на основе арсенида галлия
Тип работы: Выпускная квалификационная работа
Подразделение: Кафедра "Нано- и микроэлектроника"

РЕЗУЛЬТАТЫ

■ ОТЧЕТ О ПРОВЕРКЕ КОРРЕКТИРОВАЛСЯ: НИКТО ПРЕДСТАВЛЕН РЕЗУЛЬТАТЫ ПРОВЕРКИ ДО КОРРЕКТИРОВКИ

СОВПАДЕНИЯ	41.97%	СОВПАДЕНИЯ	41.97%
ОРИГИНАЛЬНОСТЬ	55.68%	ОРИГИНАЛЬНОСТЬ	55.68%
ЦИТИРОВАНИЯ	2.34%	ЦИТИРОВАНИЯ	2.34%
САМОЦИТИРОВАНИЯ	0%	САМОЦИТИРОВАНИЯ	0%

ДАТА ПОСЛЕДНЕЙ ПРОВЕРКИ: 10.06.2024

ДАТА И ВРЕМЯ КОРРЕКТИРОВКИ: 10.06.2024 15:03

Структура документа: Проверенные разделы: библиография с 63-64, содержание с 1, основная часть с 2-62
Модули поиска: ИПС Адилет, Переводные заимствования*, Переводные заимствования по коллекции Интернет в русском сегменте, Шаблонные фразы, Диссертации ИББ, Цитирование, Кольцо вузов, СПС ГАРАНТ: нормативно-правовая документация, СМИ России и СНГ, СПС ГАРАНТ, аналитика, Библиография, Коллекция ИББ, Патенты СССР, РФ, СНГ, Перефразирования по Интернету (EN); Публикации eLIBRARY, Сводная коллекция ЗБС, IEEE, Перефразирования по коллекции IEEE, Публикации eLIBRARY (переводы и перефразирования), Перефразированные заимствования по коллекции Интернет в английском сегменте, Переводные заимствования IEEE, Публикации Rf B, Перефразирования по Интернету, Медицина, Переводные заимствования по Интернету (EnRu), Перефразированные заимствования по коллекции Интернет в русском сегменте, Переводные

Работу проверил: Головяшкин Алексей Николаевич

ФИО проверяющего

Дата подписи: 10.06.24r

Подпись проверяющего



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

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

ПРИЛОЖЕНИЕ В
(обязательное)
Презентация ВКР

					ПГУ 2. 11.03.04. 003 ПЗ	Лист
Изм.	Лист	№ докум.	Подпись	Дата		73



Теоретическое исследование энергетического спектра наночешуек на основе арсенида галлия

Выполнил: студент группы 20ПД1

Голубева И.С.

Руководитель: доцент Игошина С.Е.

Актуальность работы

- При изучении и работе с наноструктурами важно уделять внимание их форме, которая является одним из наиболее важных факторов для изучения различных свойств КТ.
- Ультратонкие квантовые точки или наночешуйки изучены мало по сравнению со сферическими, цилиндрическими квантовыми точками, а также КТ ядро/оболочка, свойства которых уже изучены достаточно глубоко.
- Ультратонкие 2D-КТ, в последнее время стали важными объектами для изучения также из-за большего соотношения площадь поверхности/объем, что важно для многих технических приложений.

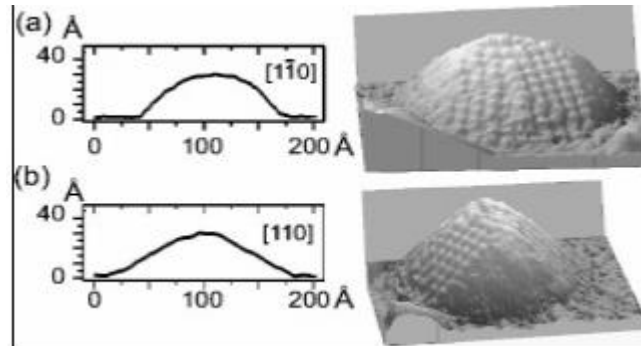
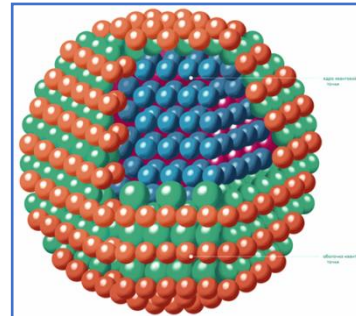
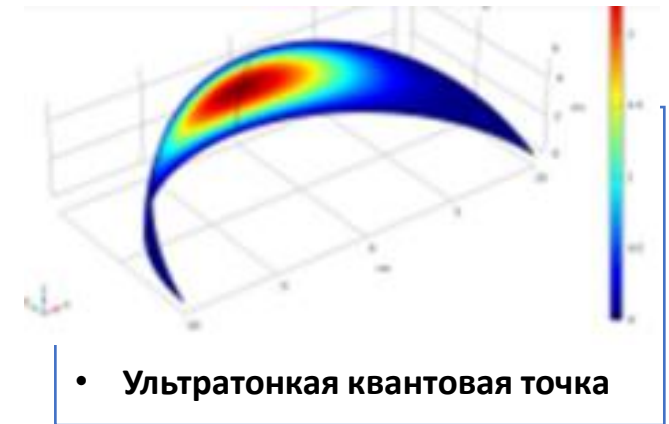
Постановка задачи

- Объект исследования: квантовые точки на основе арсенида галлия различной геометрии, наночешуйки на основе арсенида галлия в зависимости от радиуса R , углов α и θ и сферической квантовой точки.
- Цель работы: изучение энергетического спектра ультратонких наночешуек на основе арсенида галлия в зависимости от геометрической формы

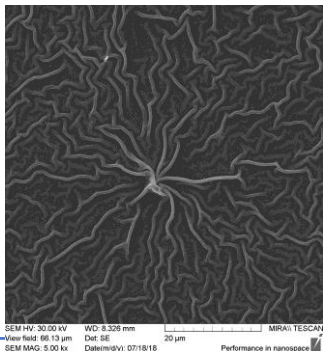
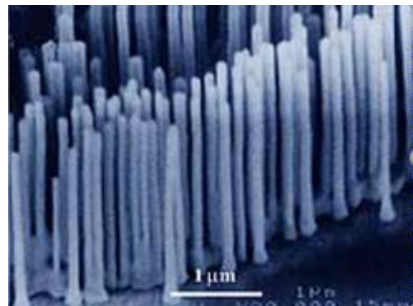
Общие свойства наноструктур: обладают новыми и необычными характеристиками; свойствами наноструктур можно управлять за счет изменения размеров и формы

Квантовая точка

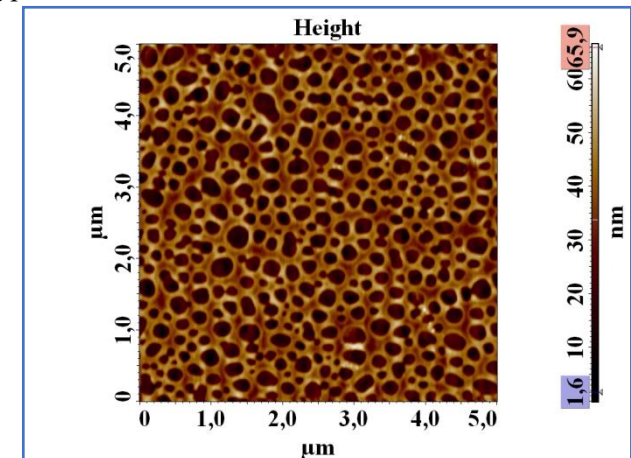
- 0 – мерный объект: квантовые точки InAs в матрице GaAs



- 1-мерный объект – нанотрубка или нанопроволока

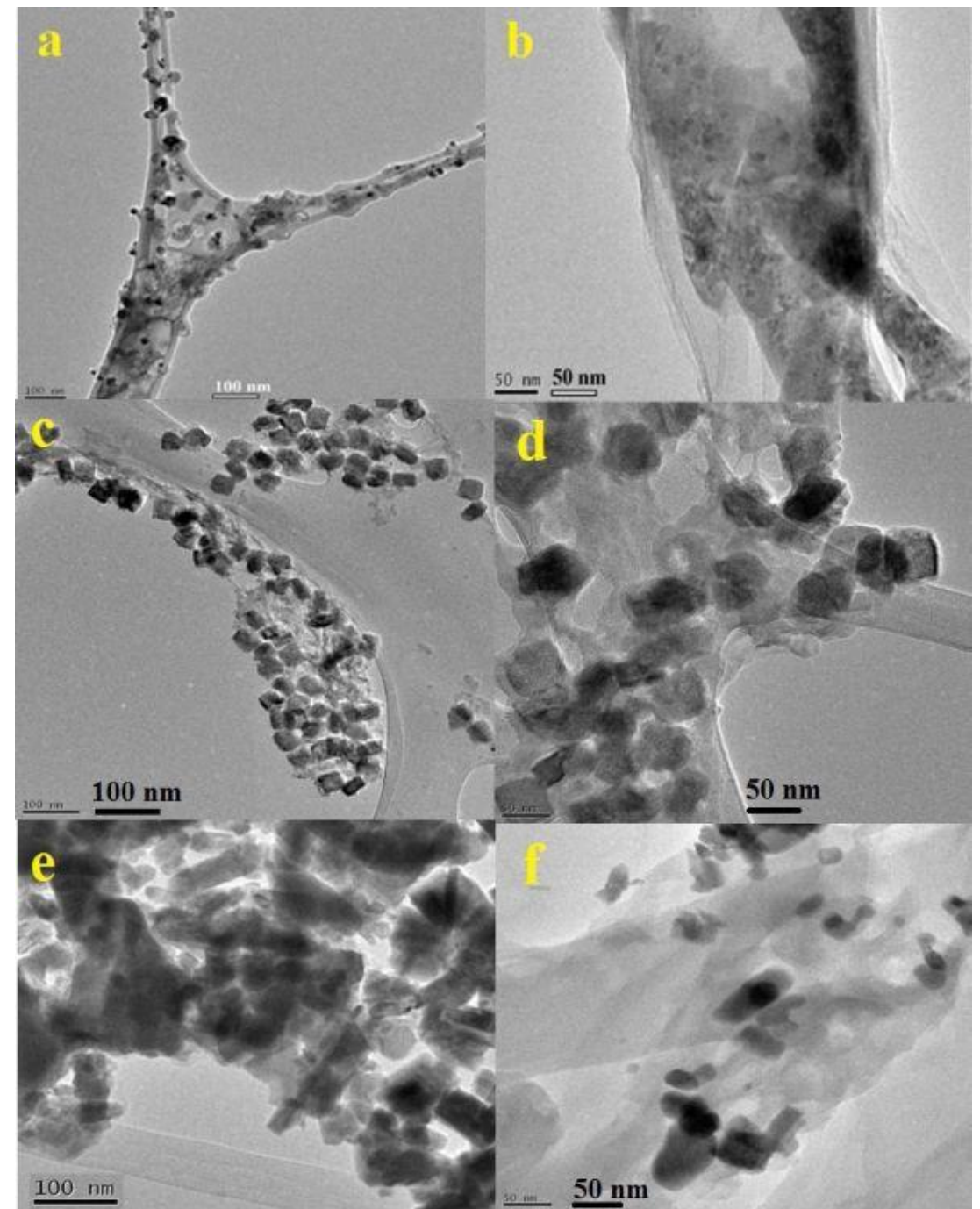


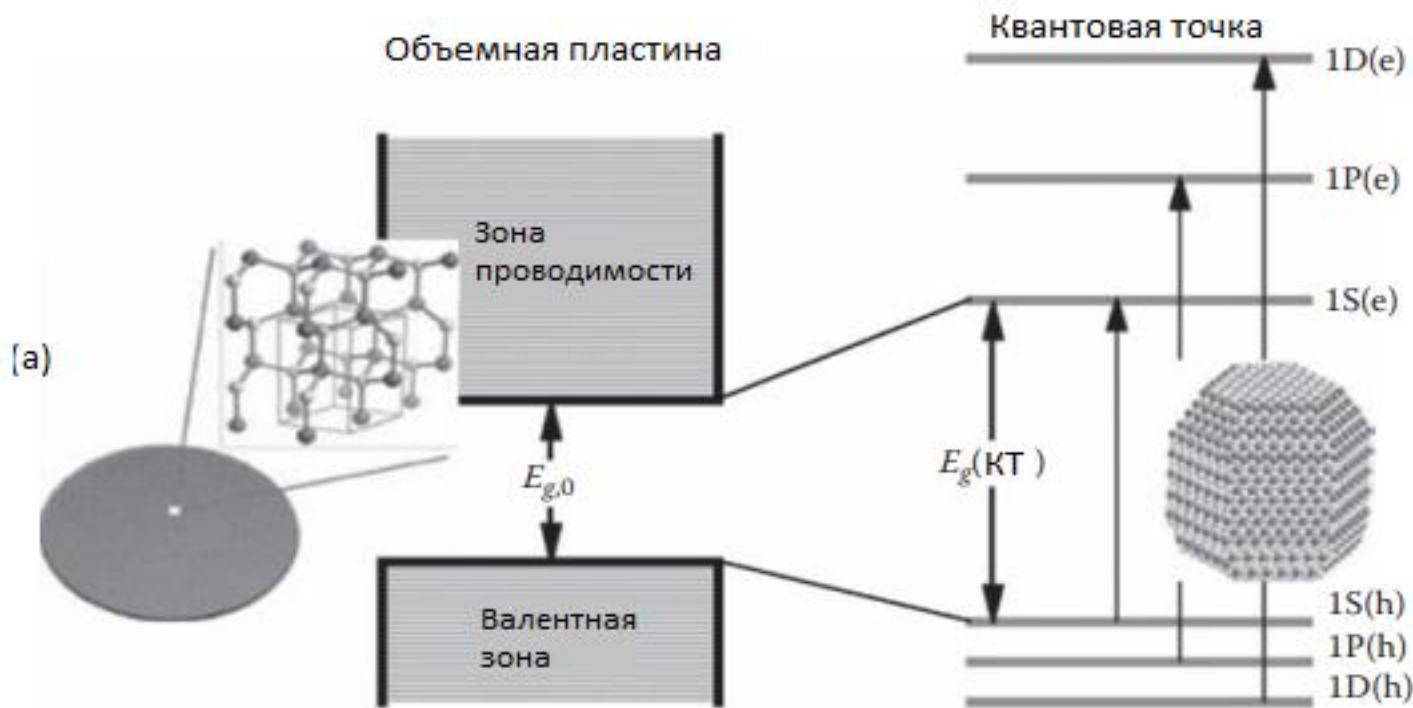
2-мерный объект- многослойная тонкопленочная структура



Изображение наночешуек, сделанное с помощью просвечивающего электронного микроскопа.

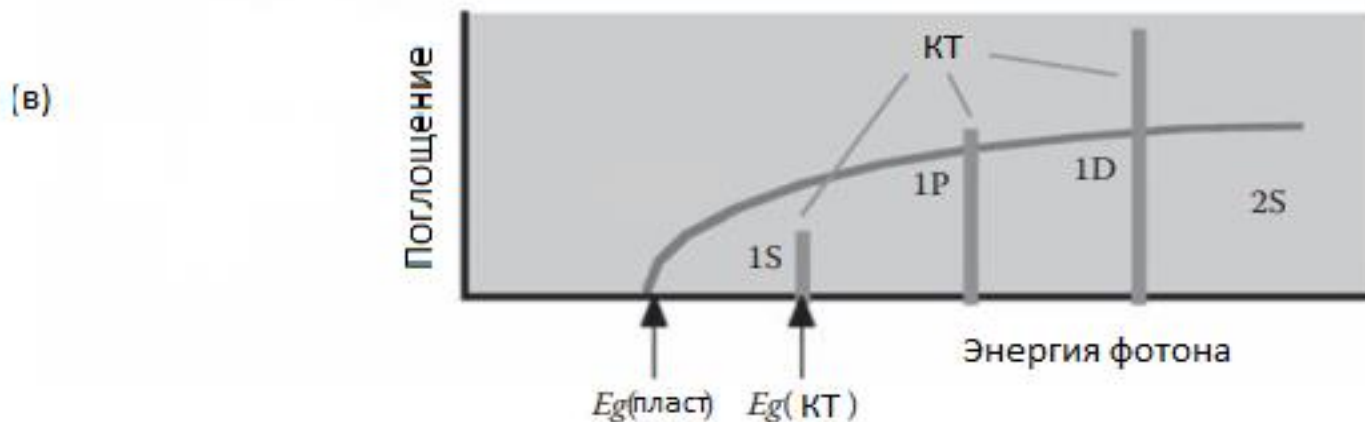
Технология самосборки используется для создания двумерных тонких 2D-КТ наноструктур, таких как дисковые, плоские и изогнутые (наночешуйки) поверхности.





(б)

$$E_g(KT) \approx E_{g,0} + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_{eh} R^2}$$



а) объемный полупроводник имеет непрерывные зоны проводимости и валентной зоны, разделенные фиксированной шириной запрещенной зоны (слева), в то время как квантовая точка характеризуется дискретными атомоподобными состояниями с энергиями, которые определяются радиусом R квантовой точки (справа);

б) выражение для энергии квантовой точки, полученная с использованием модели "квантовой ямы";

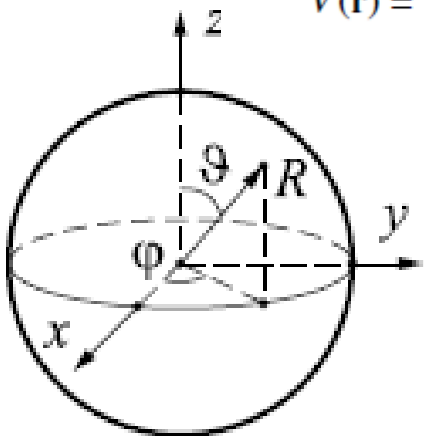
в) схематическое изображение - изображение непрерывного спектра поглощения объемного полупроводника (изогнутая линия) по сравнению с дискретным спектром поглощения квантовой точки (вертикальные полосы).

Математические модели квантовых точек

Модель сферической КТ

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

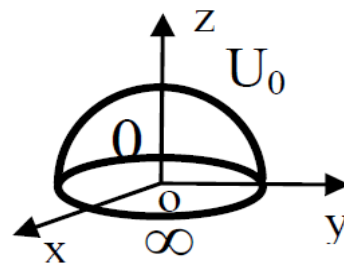
$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0, & \mathbf{r} \in \text{QD}, \\ \infty, & \mathbf{r} \notin \text{QD}. \end{cases}$$



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

Модель полусферической КТ с полубесконечным ограничивающим потенциалом

$$U(r, \theta) = U(r) + U(\theta)$$



$$\left\{ \frac{p^2}{2\mu} - \frac{e^2}{\epsilon r} + U(r, \theta) \right\} \Psi(r, \theta, \varphi) = E\Psi(r, \theta, \varphi)$$

$$U(r) = \begin{cases} 0 & r < r_0 \\ U_0 & r > r_0 \end{cases}, \quad U(\theta) = \begin{cases} 0 & \theta < \pi/2 \\ \infty & \theta > \pi/2 \end{cases}$$

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot Y(\theta, \varphi)$$

$$\begin{vmatrix} e^{-\gamma_1 r} r^\ell {}_1F_1[\ell+1-k_1, 2\ell+2; 2\gamma_1 r] & e^{-\gamma_2 r} r^\ell U[\ell+1-k_2, 2\ell+2; 2\gamma_2 r] \\ \left(e^{-\gamma_1 r} r^\ell {}_1F_1[\ell+1-k_1, 2\ell+2; 2\gamma_1 r] \right)' & \left(e^{-\gamma_2 r} r^\ell U[\ell+1-k_2, 2\ell+2; 2\gamma_2 r] \right)' \end{vmatrix} = 0$$

Математические модели квантовых точек

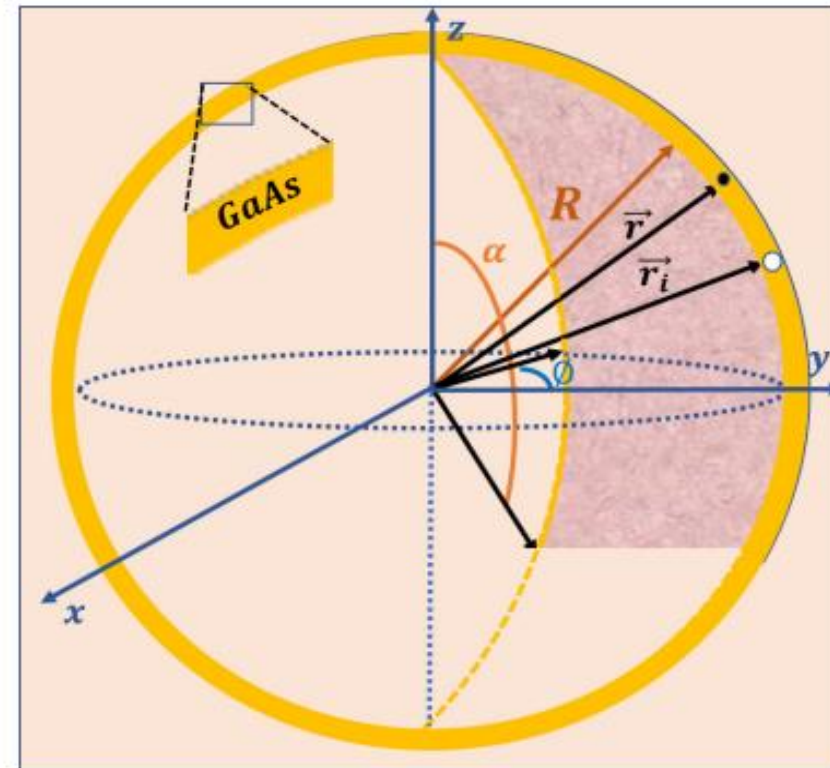
Ультратонкая нанопластинка сферической поверхности (R, a, φ) .

Рассмотрим поверхность с кривизной, которая соответствует сферической геометрии, то есть система состоит из поверхности, взятой как часть сферы с нулевой толщиной.

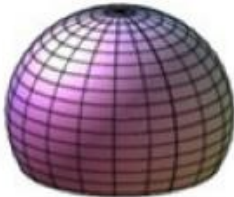
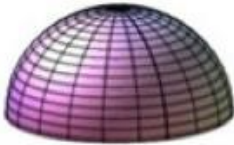
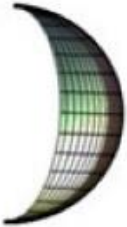
Внутри сферической поверхности стационарное уравнение Шредингера (без учета примесей, которое позволяет найти энергию электрона основного состояния, E_0 , и соответствующую волновую функцию, $\psi_0(\theta, \varphi)$, записывается в виде:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left(\frac{1}{R^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{R^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) + V_C(\theta, \varphi) \right] \psi_0(\theta, \varphi) = E_0 \psi_0(\theta, \varphi)$$

$$V_C(\theta, \varphi) = \begin{cases} 0, & \text{if } 0 \leq \theta \leq \alpha \text{ and } 0 \leq \varphi \leq \phi \\ \infty, & \text{otherwise.} \end{cases}$$

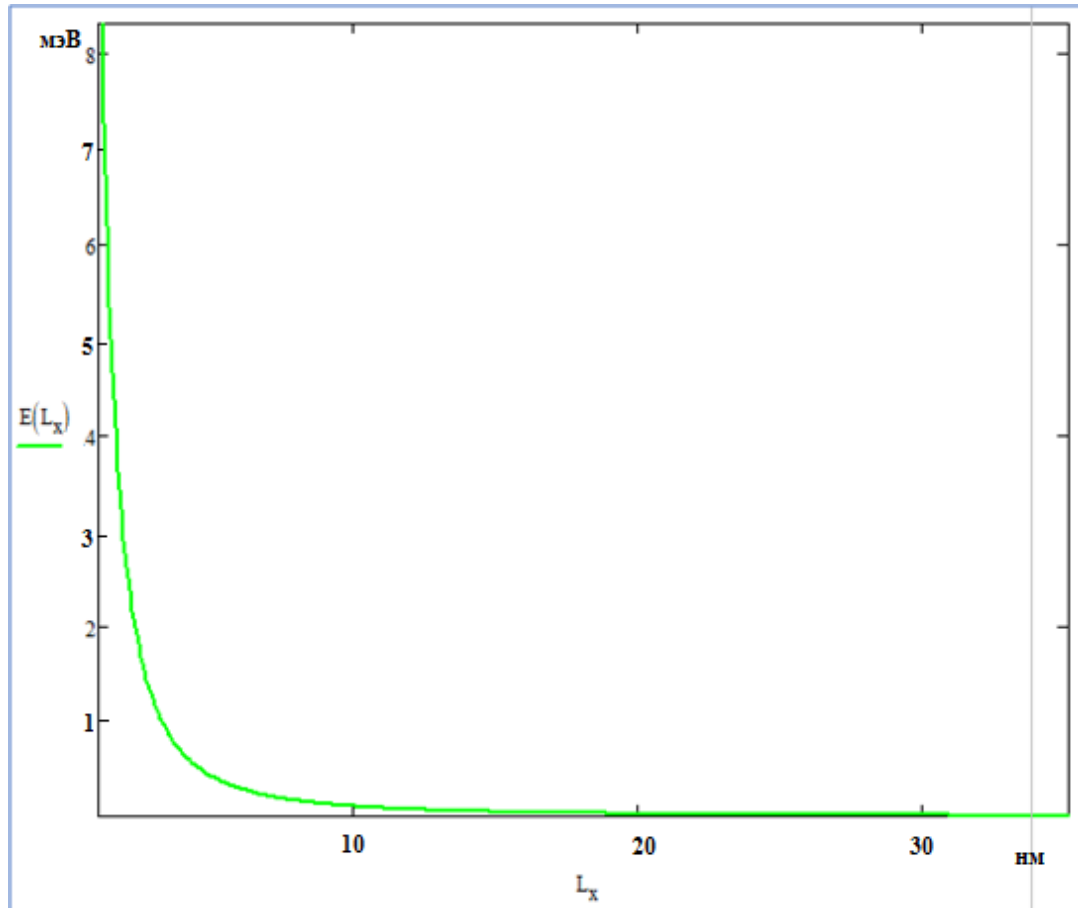


Математические модели ультратонких наночастиц $2D$ -QD.

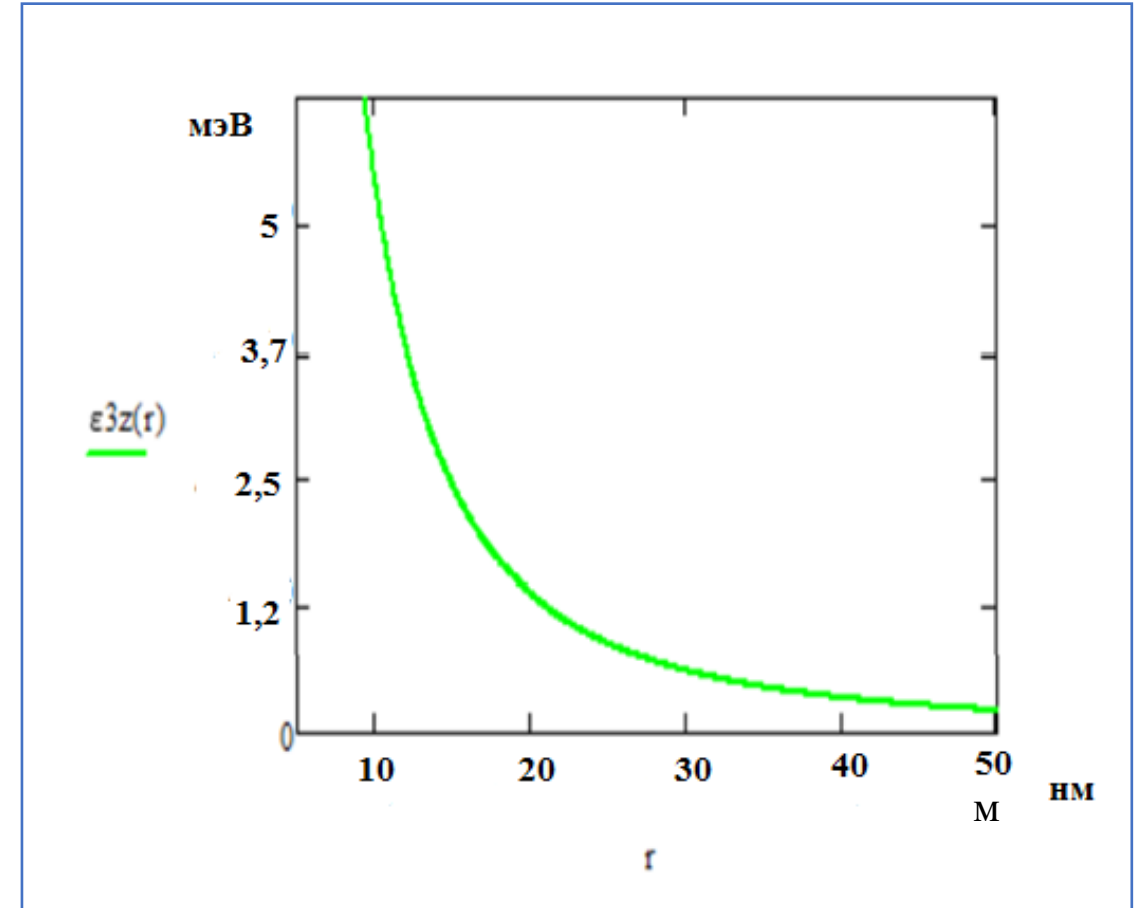
$\phi = 360^\circ, \alpha = 180^\circ$ 	$\phi = 360^\circ, \alpha = 120^\circ$ 	$\phi = 360^\circ, \alpha = 90^\circ$ 
$\phi = 360^\circ, \alpha = 45^\circ$ 	$\phi = 270^\circ, \alpha = 180^\circ$ 	$\phi = 180^\circ, \alpha = 180^\circ$ 
$\phi = 90^\circ, \alpha = 180^\circ$ 	$\phi = 45^\circ, \alpha = 180^\circ$ 	$\phi = 30^\circ, \alpha = 180^\circ$ 

Девять геометрий наночастиц в зависимости от радиуса, угла ϕ и угла α сферической КТ.

Рассчитанные значения энергии электрона для первого уровня КТ GaAs по сферической и полусферической модели



Расчетные кривые первого энергетического уровня в КТ для сферической модели

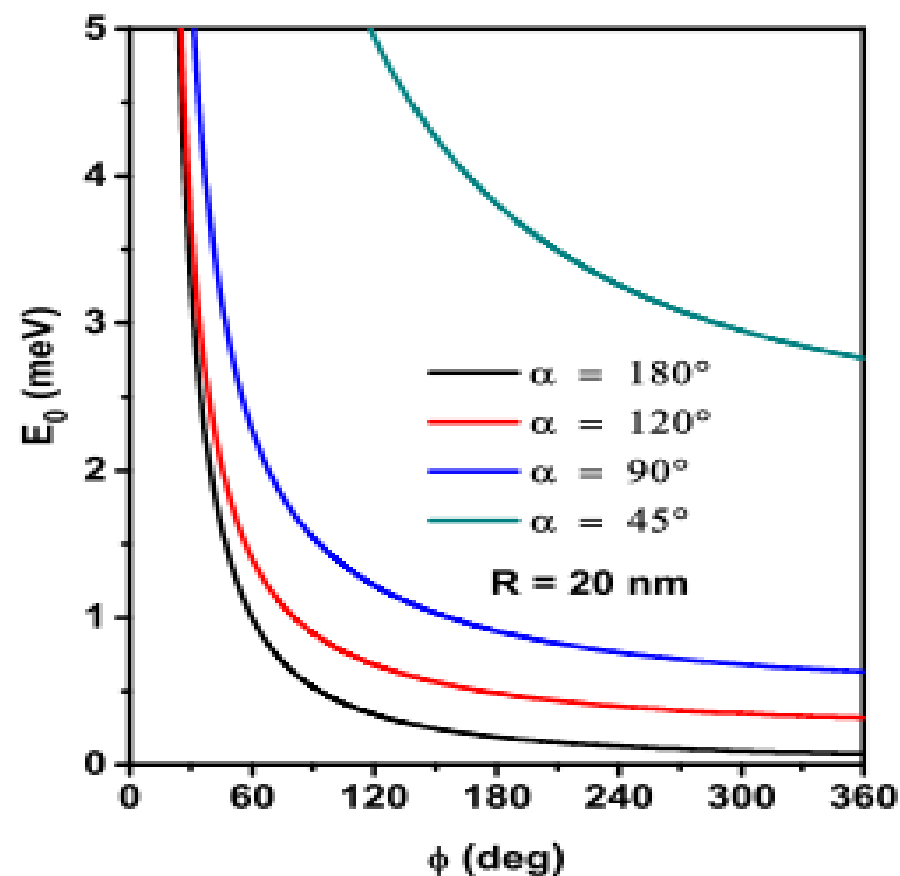


Расчетные кривые первого энергетического уровня в КТ для полусферической модели

Рассчитанные значения энергии электрона для первого уровня в нанопластинках GaAs

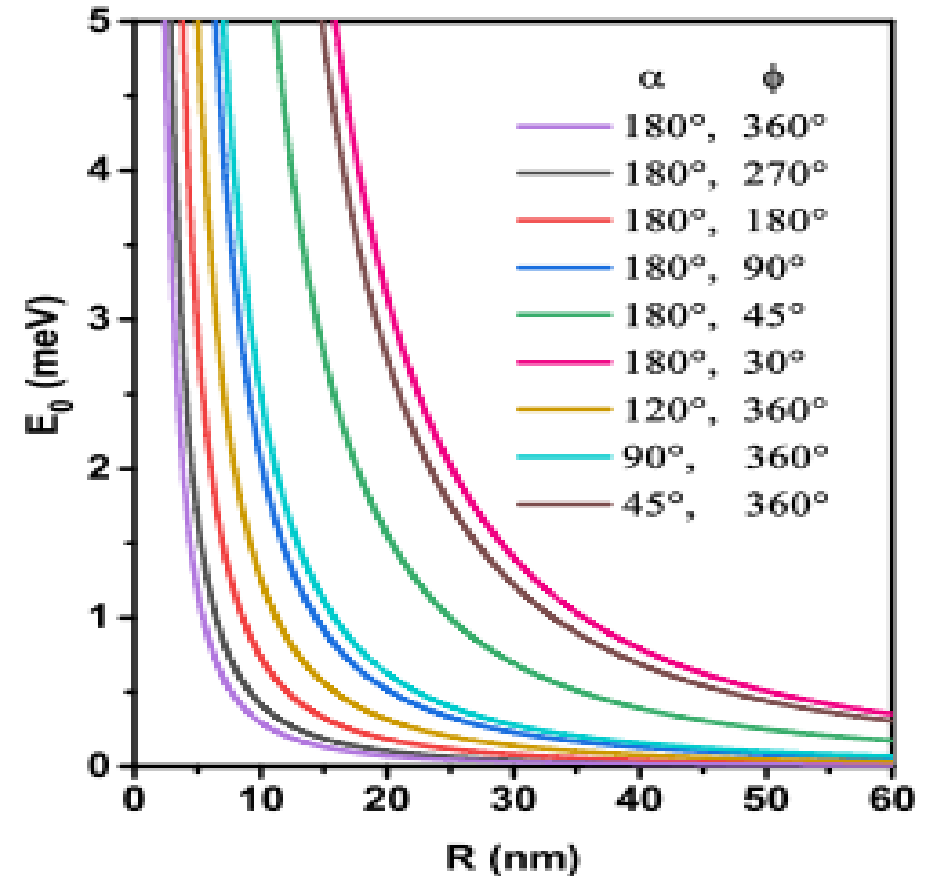
Зависимость энергии электрона от ϕ -угла при нескольких значениях α -угла при $R = 20$ нм

Изменение угловых размеров и кривизны двумерных наносистем может значительно изменить энергию зоны проводимости, вызванную высокой плотностью и сильным квантовым ограничением электрона, что приводит к большей ширине запрещенной зоны в нанопластинках, чем общая ширина запрещенной зоны объемного материала и других квантовых систем



Энергия электронов как функция радиуса для девяти форм нанопластинок GaAs

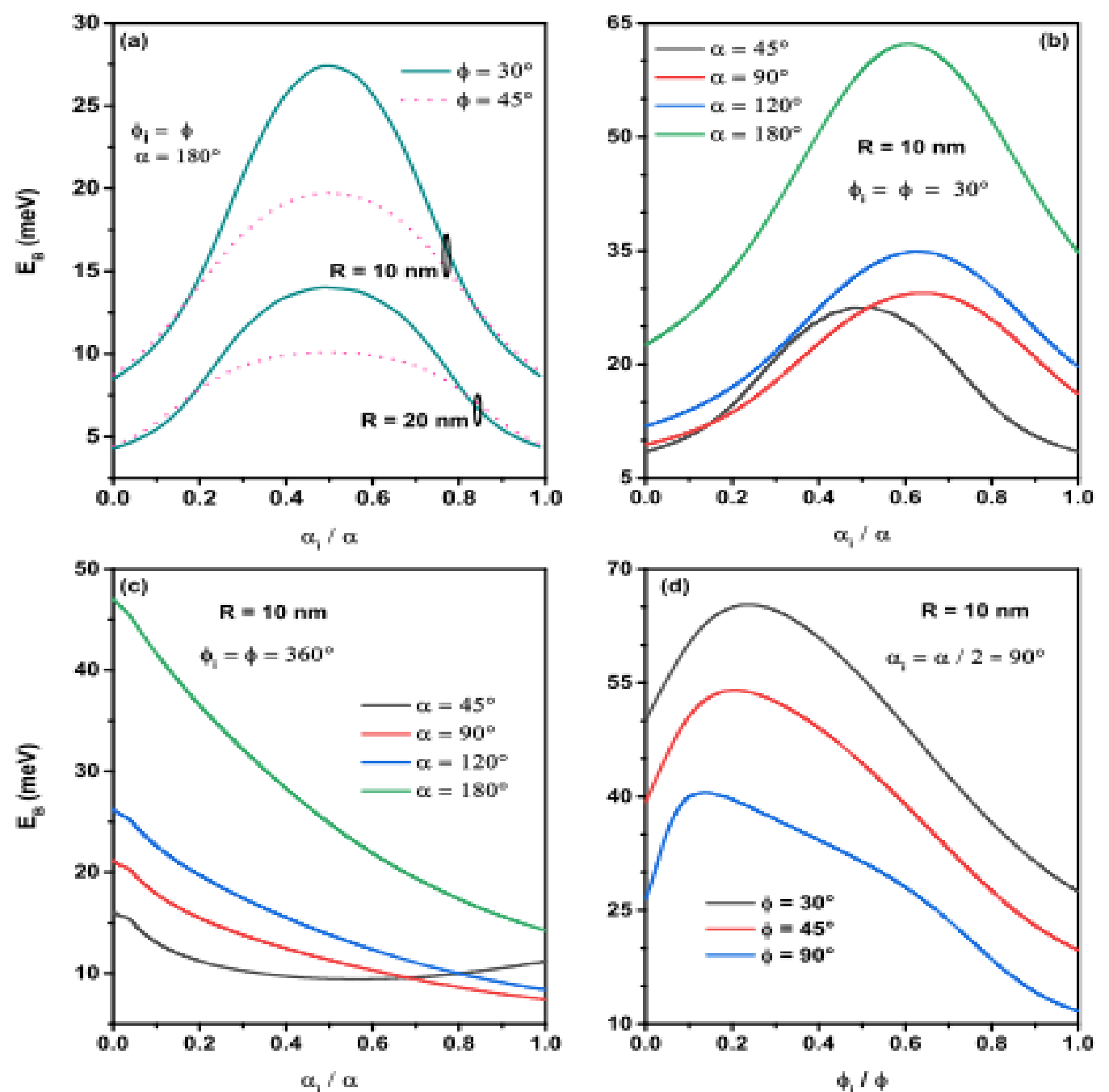
При максимальных значениях α и φ , т.е. $\alpha = 180^\circ$ и $\varphi = 360^\circ$, энергетическое поведение системы аналогично поведению ультратонкой сферической квантовой точки. С другой стороны, при заданном значении $\varphi \leq 360^\circ$ и $\alpha \leq 180^\circ$ увеличение радиуса кривизны приводит к образованию почти плоских нанопластинок, и их электронные энергии стремятся к собственным энергиям квантовой ямы.



Моделирование основного состояния двумерного атома водорода в различных геометриях наночастиц

Энергия связи основного
состояния в зависимости от
положения примеси:

- с учетом двух азимутальных углов ($\phi = 30^\circ$ и 45°) и двух радиусов наночастиц ($R = 10$ нм и 20 нм);
- различные полярные углы ($\alpha = 45^\circ, 90^\circ, 120^\circ$, и 180°) с $\phi_i = \phi = 30^\circ$ и $R = 10$ нм ;
- с различными полярными углами ($\alpha = 45^\circ, 90^\circ, 120^\circ$, и 180°) при $\phi_i = \phi = 360^\circ$ и $R = 10$ нм;
- результаты являются функцией азимутального положения примеси для трех азимутальных углов ($\phi = 30^\circ, 45^\circ$ и 90°) при $\alpha_i = \alpha = 90^\circ$ и $R = 10$ нм.



Выводы

- Теоретически изучены энергетические спектры вогнутых и плоских наночастиц $2D$ -КТ, с контролируемым радиусом кривизны. Энергия связи в основном состоянии сильно зависит от геометрии наночешуек.
- Было обнаружено небольшое увеличение энергии связи с уменьшением парных углов (α , φ), главным образом в нанопластинках малого радиуса.

Выводы

Таким образом, форма наносистемы создает эффект, который также является размерным эффектом.

Угловое ограничение двумерных наносистем может значительно изменить энергию зоны проводимости, вызванную высокой плотностью и сильным квантовым ограничением электрона, что приводит к большей ширине запрещенной зоны в нанопластинках, чем общая ширина запрещенной зоны объемного материала и других квантовых систем.

Такое поведение наносистем может быть полезно для возможности улучшения электрических свойств оптоэлектронных устройств.