

УДК 535.37:544.164

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ И МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК «ЯДРО/ОБОЛОЧКА» CDS/ZNS МЕТОДОМ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

К.А. Романова, к.х.н., доцент

Казанский национальный исследовательский технологический университет
г. Казань

Повышенный спрос на передовые материалы, отвечающие требованиям современных технологий, обуславливает научный интерес в изучении материалов на основе квантовых точек. Основные преимущества полупроводниковых квантовых точек по сравнению с другими излучающими веществами заключаются в возможности настройки цвета излучения путем варьирования их размеров, узкой полосе излучения и возможности создания устройств с использованием высокопроизводительных процессов. Квантовые точки, имеющие строение «ядро/оболочка», состоят из двух полупроводниковых материалов и обладают большей эффективностью, чем соответствующие им отдельные наночастицы. Чтобы выявить оптимальные подходы к созданию эффективных полупроводниковых структур, экспериментальные исследования необходимо дополнять результатами теоретического моделирования. В настоящей работе было проведено моделирование строения и физико-химических свойств квантовых точек сульфида кадмия с различной толщиной оболочки сульфида цинка, имеющих гексагональную структуру вюрцита. Были выбраны системы, имеющие следующие соотношения количества монослоев в ядре и оболочке квантовой точки CdS/ZnS: 3:7, 5:5, 7:3. Моделирование было проведено с помощью метода теории функционала плотности с использованием обменно-корреляционного функционала PBE приближения обобщенных градиентов (GGA) с базисным набором плоских волн в рамках метода проекционных присоединений волн (PAW). Кинетическая энергия обрезания была выбрана равной 400 эВ. Для поверхности Ферми использовали приближение Methfessel-Paxton с шириной 0,1 эВ; полученные энергии были экстраполированы до нулевой ширины. Процесс релаксации проводился пока остаточная сила на каждом атоме не была ниже $2 \cdot 10^{-4}$ эВ·пм⁻¹.

На первом этапе было проведено моделирование CdS, в качестве критерия оценки точности проведенных расчетов было использовано значение ширины запрещенной зоны, экспериментальное значение которой составляет в различных литературных источниках от 1.75 до 1.83 эВ. Рассчитанное значение составило 1.673 эВ при параметрах ячейки $a = b = 4.125 \text{ \AA}$ и $c = 6.865 \text{ \AA}$. Далее были получены квантовые точки CdS/ZnS с разным числом монослоев в ядре и оболочке (3:7, 5:5, 7:3). Проведена оптимизация геометрии, моделирование диаграмм распределения электронной плотности и рассчитаны значения ширины запрещенной зоны. Установлено понижение ширины запрещенной

зоны при увеличении толщины оболочки. На основе данных квантово-химических расчетов выявлено влияние природы и толщины оболочки на свойства квантовых точек, эффективность их излучения и перспективность использования в оптоэлектронике. Полученные по результатам моделирования данные близки к экспериментальным.

Квантово-химические расчеты были проведены с использованием суперкомпьютеров МВС-10П и МВС-100К «Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН» и вычислительных ресурсов системы «Ломоносов» суперкомпьютерного комплекса МГУ имени М.В. Ломоносова [1]. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект № 18-33-00062 мол_а.

Список литературы:

1. *Voevodin, Vl.V. Practice of «Lomonosov» Supercomputer / Vl.V. Voevodin, S.A. Zhumatiy, S.I. Sobolev, A.S. Antonov, P.A. Bryzgalov, D.A. Nikitenko, K.S. Stefanov, Vad.V. Voevodin // Open Systems J. – 2012. – № 7. – P. 36-39.*