



Студенттер мен жас ғалымдардың
«ҒЫЛЫМ ЖӘНЕ БІЛІМ - 2018»
XIII Халықаралық ғылыми конференциясы

СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ

XIII Международная научная конференция
студентов и молодых ученых
«НАУКА И ОБРАЗОВАНИЕ - 2018»

The XIII International Scientific Conference
for Students and Young Scientists
«SCIENCE AND EDUCATION - 2018»



12th April 2018, Astana

**ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ БІЛІМ ЖӘНЕ ҒЫЛЫМ МИНИСТРЛІГІ
Л.Н. ГУМИЛЕВ АТЫНДАҒЫ ЕУРАЗИЯ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІ**

**Студенттер мен жас ғалымдардың
«Ғылым және білім - 2018»
атты XIII Халықаралық ғылыми конференциясының
БАЯНДАМАЛАР ЖИНАҒЫ**

**СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ
XIII Международной научной конференции
студентов и молодых ученых
«Наука и образование - 2018»**

**PROCEEDINGS
of the XIII International Scientific Conference
for students and young scholars
«Science and education - 2018»**

2018 жыл 12 сәуір

Астана

УДК 378

ББК 74.58

Ғ 96

Ғ 96

«Ғылым және білім – 2018» атты студенттер мен жас ғалымдардың XIII Халықаралық ғылыми конференциясы = XIII Международная научная конференция студентов и молодых ученых «Наука и образование - 2018» = The XIII International Scientific Conference for students and young scholars «Science and education - 2018». – Астана: <http://www.enu.kz/ru/nauka/nauka-i-obrazovanie/>, 2018. – 7513 стр. (қазақша, орысша, ағылшынша).

ISBN 978-9965-31-997-6

Жинаққа студенттердің, магистранттардың, докторанттардың және жас ғалымдардың жаратылыстану-техникалық және гуманитарлық ғылымдардың өзекті мәселелері бойынша баяндамалары енгізілген.

The proceedings are the papers of students, undergraduates, doctoral students and young researchers on topical issues of natural and technical sciences and humanities.

В сборник вошли доклады студентов, магистрантов, докторантов и молодых ученых по актуальным вопросам естественно-технических и гуманитарных наук.

УДК 378

ББК 74.58

ISBN 978-9965-31-997-6

©Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия
ұлттық университеті, 2018

КОЛЛОИДНЫЕ КВАНТОВЫЕ ТОЧКИ ТЕЛЛУРИДА КАДМИЯ CdTe

Думич Алина Сергеевна

Студентка 4 курса обучения специальности «Техническая физика» ЕНУ им. Л.Н. Гумилева
Научный руководитель – А.Ж. Қайнарбай

Введение. Квантовые точки (КТ) представляют собой полупроводниковые нанокристаллы, размеры которых достаточно малы и лежат в промежутке от 10-20 нм. Известно, что одна квантовая точка может состоять из нескольких сотен атомов, поэтому квантовые точки лежат в интервале между твердыми телами и отдельными атомами. В основном различают два типа квантовых точек, по способу их создания: коллоидные и эпитаксиальные. Также существует два главных метода создания квантовых точек: синтез в коллоиде, при котором вещества смешиваются в растворе, и эпитаксия — метод выращивания кристаллов на поверхности подложки. Основными особенностями квантовых точек является то, что в них проявляются квантовые (т.е. дискретные) свойства электронов, из-за столь малых размеров. Подобно настоящему атому, квантовая точка может содержать один или несколько свободных электронов[1].

1. Физико-химические особенности квантовых точек. КТ обладают рядом преимуществ таких как: широкий спектр поглощения, высокая фотостабильность и яркость свечения. Положение максимума флуоресценции определяется размером частиц, широкий спектр возбуждения от УФ до ИК (400 – 200 нм), высокая чистота цвета из-за высоких пиков флуоресценции (25-40 нм), высокая устойчивость к химической деградации и т.д [2].

Из-за малого размера КТ электроны в наночастицах ведут себя совсем не так как в объемных полупроводниках. Энергетический спектр квантовой точки неоднороден, в нем есть отдельные уровни энергии для электрона (отрицательно заряженной частицы) и дырки. В настоящее время КТ находят все большее применение в различных областях науки и техники, а именно в производстве высокопроизводительных солнечных батарей, фотодиодов и фотодетекторов, также стали развиваться дисплеи и лазеры на квантовых точках [3].

В настоящее время имеется достаточно большое число способов синтеза нанокристаллов. Одним из наиболее распространенных является метод молекулярно-лучевой эпитаксии. Этот метод позволяет выращивать КТ на тщательно очищенных подложках. В условиях глубокого вакуума на подложку направляют поток атомов или молекул, получаемый испарением вещества со специально подготовленных источников. Если в качестве источников по очереди использовать вещества с различной шириной запрещенной зоны, можно вырастить на подложке характерную «пирамидку».

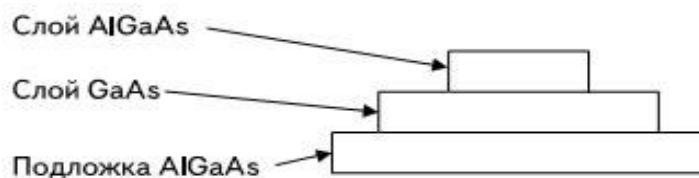


Рисунок 1. Схема метода молекулярно-лучевой эпитаксии

В большинстве случаев все эти параметры подбираются экспериментальным путем. Важно, чтобы геометрические размеры получаемых КТ были по возможности наиболее близкими. На данный момент разработаны техпроцессы, при которых получаемые КТ различаются по размерам всего в пределах 2-3%.

Квантовые точки наилучшего качества получены методом роста в неполярных средах – методом, предложенным С. В. Murray в 1992 году [4].

Метод роста коллоидных квантовых точек в неполярных средах обладает рядом преимуществ: возможность контроля процесса роста квантовых точек, хорошая пассивация поверхностных состояний КТ, узкое распределение по размерам (на уровне 5-8%), возможность последующего выделения и очистки КТ. Синтез проходит в 3 основные стадии: нуклеация, рост зародышей и стадия созревания Оствальда. В перенасыщенном растворе нуклеация происходит спонтанно: в некоторых нестабильных участках раствора молекулы или ионы растворенного вещества сами по себе способны кристаллизоваться, образуя зародыши. Чем быстрее образуются зародыши, тем больше возникает центров кристаллизации и тем ближе по размеру оказываются коллоидные частицы к некоторому среднему значению. При образовании зародышей появляется новая поверхность раздела фаз. Этот процесс увеличивает свободную энергию системы пропорционально квадрату диаметра частиц. Процесс образования кристаллической грани протекает с большой скоростью и зависит только от скорости диффузии. Поскольку процесс является диффузионным, основным параметром для его регулирования является температура.

На рисунке 1 показана кинетика роста наночастиц CdTe (экспериментальные данные и аппроксимация выражением для роста сферических наночастиц), взятая из работ авторов [5].

Когда реагенты исчерпаны из-за роста частиц, начинается процесс созревания Оствальда, при котором большие частицы продолжают расти за счет растворения более мелких, уменьшая поверхностную энергию системы. При уменьшении степени пересыщения критический размер зародышей растет и частицы меньше этого критического размера растворяются. Размер оставшихся после полного исчезновения пересыщения частиц может достигать нескольких микрометров.

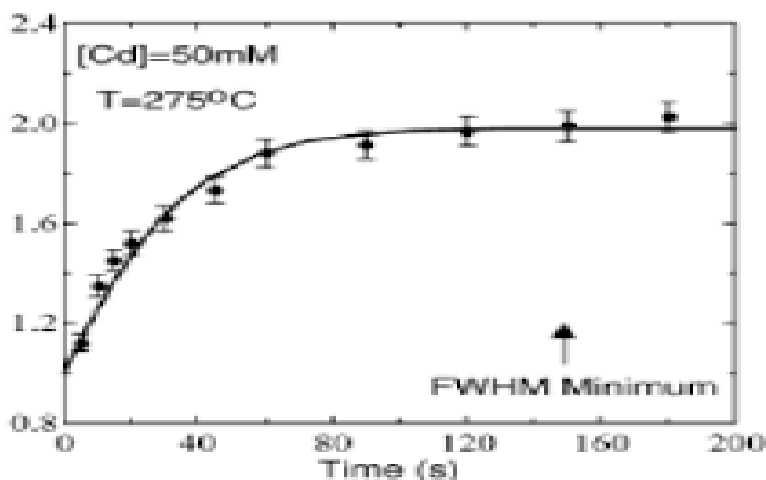


Рисунок 2. Зависимость размера нанокристаллов CdTe от времени роста.

2. Экспериментальная часть. Синтез квантовых точек.

В нашем случае, для синтеза коллоидных наночастиц CdTe была использована следующая методика. В трехгорлую колбу помещали 5 мл дифенилового эфира, растворяли в нем 0,5649 г олеиновой кислоты и 0,1332 г дигидрата ацетата кадмия $\text{Cd}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$. Полученную смесь, при постоянном перемешивании с помощью магнитной мешалки, выдерживали 45 мин при 145°C в токе аргона для удаления воды и уксусной кислоты и формирования олеата кадмия. Навеска порошка теллура массой 0.064 г в отдельной емкости была диспергирована в 0,5 мл три-н-октилфосфина (ТОР) и растворена при нагревании до 50°C . При этом происходило образование три-н-октилфосфинтеллурида (ТОРТе) в ТОР. Для получения квантовых точек CdTe после образования олеата кадмия температуру в

трехгорлой колбе стабилизировали на уровне 160⁰С и проводили инъекцию раствора ТОРТе. При этом через определенный промежуток времени, т.е. 0,5 1, 2, 4, 10, 20, 30, 60, 90 минут брали аликвоты из раствора.

После 90 минут выдержки коллоидного раствора квантовых точек при температуре 160⁰С его охладили до комнатной температуры, поместив трехгорлую колбу с раствором в холодильник.

Последующим этапом было измерение спектра поглощения квантовых точек. Для получения спектральной кривой поглощения необходимо получить спектр сигнала пропускания растворителя I₀(λ) (в нашем случае гексана C₆H₁₄) и спектр образца I(λ) (образец CdTe квантовых точек). Полученные спектры пропускания были сохранены и объединены в общий график (рис 2).

С помощью графиков можно определить длину волны λ, на которую приходится максимум пика поглощения, и величину оптической плотности А в максимуме поглощения. Зная длину волны, определяем диаметр квантовых точек по формуле:

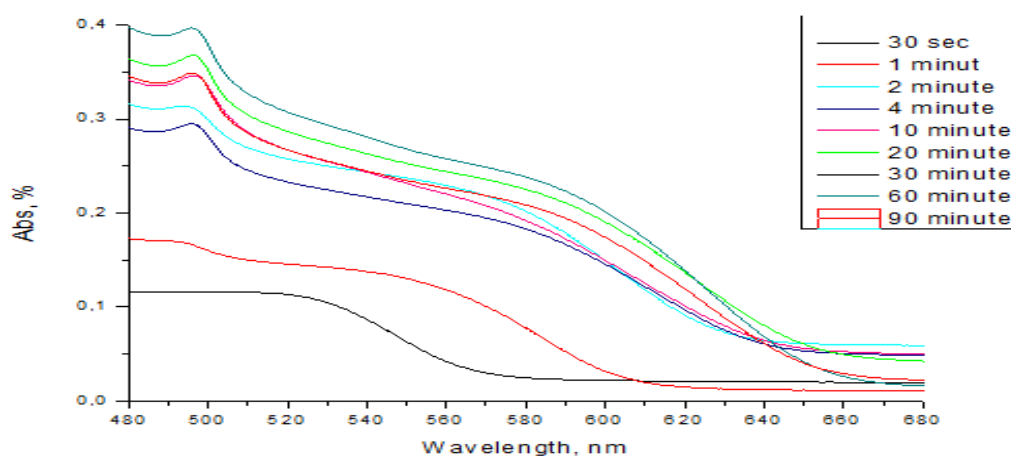


Рисунок 3. Спектры поглощения для девяти времен термообработки (0,5 1, 2, 4, 10, 20, 30, 60, 90 мин) при T=160⁰С

$$D = (9.8127 \times 10^{-7})\lambda^3 - (1.7147 \times 10^{-3})\lambda^2 + (1.0064)\lambda - (194.84)$$

Получив значения диаметра КТ, находим следующие параметры: коэффициент экстинкции: $E=10043(D)^{2.12}$, где D-диаметр КТ(нм). Концентрацию квантовых точек в растворе $C=A/E*l$, где l- толщина слоя (в нашем случае толщина кюветы с l=1см).

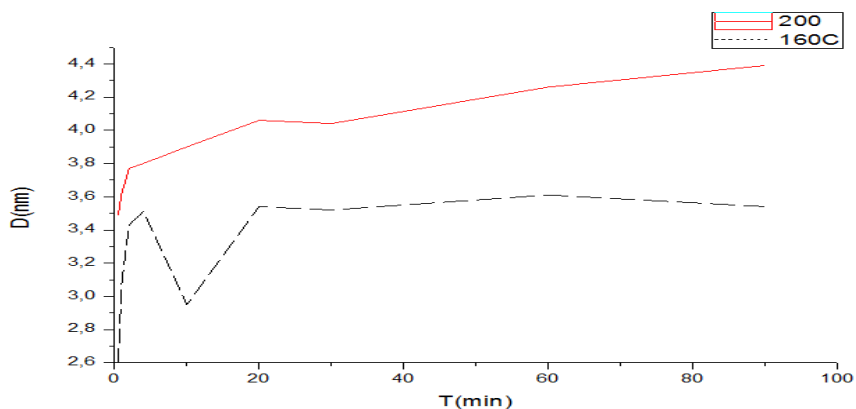


Рисунок 4. Зависимость размера КТ от времени при T₁=160 и T₂=200⁰С

Размер КТ, как показано на рисунке 3 увеличивается со временем и постепенно приближается к некоторому постоянному значению. Размер КТ можно контролировать временем синтеза и температурой, наиболее удобным параметром является температура. Увеличение температуры приводит к увеличению диаметра квантовых точек - это проявляется в положении экситонного пика в спектрах поглощения и люминесценции, как сдвиг характерных длин волн в красной области. При изменении температуры от 160 °С, 200 °С до 240 °С возможно варьировать диаметр в диапазоне 3-4 нм.

На рисунке 4 видно, что увеличение времени синтеза приводит в монотонному увеличению диаметра. По достижении величины радиуса экситона Бора для данного материала синтезируемые частицы будут терять квантовые эффекты, т.е. наночастицы будут попадать в область «микро», теряя таким образом свойства наночастиц.

3. Измерение спектров люминесценции показало, что с увеличением времени синтеза с 1 минуты до 90 минуты, наблюдается сдвиг пика люминесценции с 450 нм до 633 нм для случая синтеза с температурой 160 °С; для случая синтеза с температурой 200 °С с 633 нм до 668 нм. Как видно, на рисунке 4 (слева), для времени синтеза равной 1 минуте характерна полоса в синей области спектра. Этот факт заставляет нас думать о несформированном нанокристалле, полоса в этой области присуща смеси органического растворителя и поверхностно-активного вещества в которой выращивается нанокристалл. По мере увеличения времени пик люминесценции смещается в длинноволновую часть, демонстрируя проявление квантово-размерного эффекта, т.е. по мере увеличения размера или диаметра КТ спектр люминесценции сдвигается в длинноволновую область спектра.

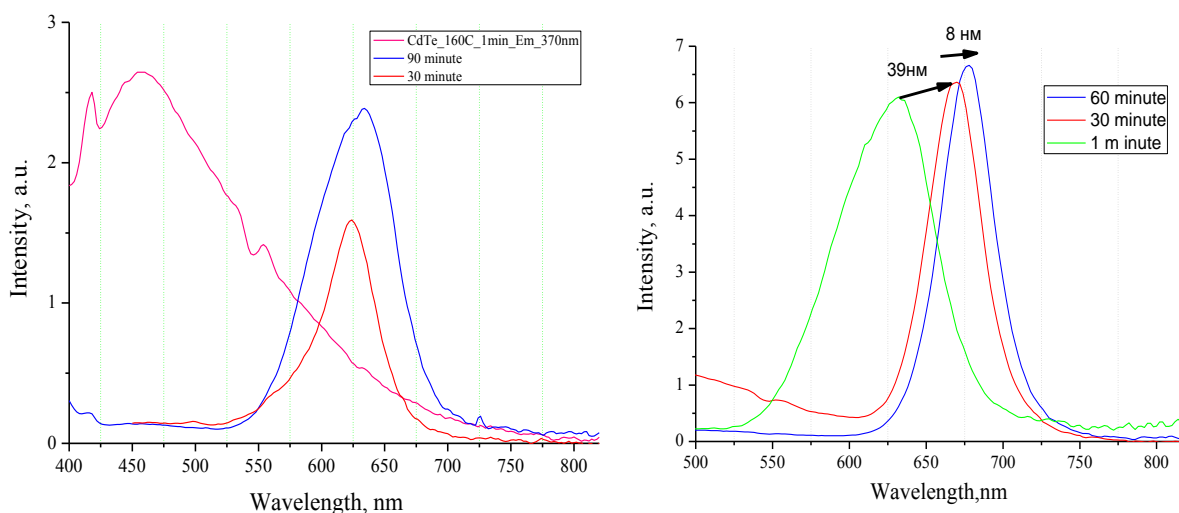


Рисунок 4. Спектры люминесценции КТ CdTe: для синтеза 160 °С(слева), 200 °С (справа) при возбуждении фотонами с длиной волны 370 нм

На правой стороне рисунке 4 приведены спектры люминесценции этих нанокристаллов но выращенных при температуре 200 °С. Как мы видим, уже к первой минуте сформировываются нанокристаллы, об этом говорит наличие полосы люминесценции. И по мере увеличения времени синтеза смещения проявляется сильнее. Стоит обратить внимание на следующий факт, малую величины полуширины на полувысоте, равный 38 нм, для данного спектра люминесценции. Такие малые значения говорят о монодисперсности синтезированных квантовых точек. Как мы видим, пик люминесценции для 30 минуты синтеза сместился на 8 нм за 30 минут. Столь малое смещение при длительном времени говорит о проявлении Оствальтского созревания частиц.

Заключение

Таким образом, нами освоены метод одностадийного синтеза квантовых точек теллурида кадмия, иначе метод органометаллического синтеза в неполярном высококипящем растворителе. Получены предварительные данные о эволюции квантовых точек при росте,

изучены оптико-люминесцентные особенности. Далее нами, запланировано детальное изучение при более высоких температурах и длительном времени.

Список использованных источников

1. Васильев Р. Б., Дирин Д. Н. МГУ, Москва, 2007, С. 2–34.
2. Федоров А.В.. Оптика наноструктур. СПб «Недра» (2005).
3. Исследовательская группа V. Klimov <https://quantumdot.lanl.gov> 3. <https://pechatnick.com/articles/kvantovie-tochki-poligrafiya-i-drygie-oblasti-primeneniya>
4. Murray C.B., Sun S., Gaschler W., Doyle H., Betley T.A., Kagan C.R. IBM J. Res. and Dev., 45, 2001, С.47-56
5. Квантовые точки: синтез, свойства, применение. Васильев Р.Б., Дирин Д.Н.

УДК 539.19; 539.194

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ DFTВ МЕТОДА ДЛЯ ОЦЕНКИ ВЛИЯНИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЗАРЯДОВ НА СПЕКТР ПОГЛОЩЕНИЯ КЛАСТЕРОВ CdS

Зейнел Динара Ермуханбетқызы

Студентка кафедры «Техническая физика» ЕНУ им. Л.Н.Гумилева
Научный руководитель – А.А. Алдонгаров

Введение

Используя метод DFTВ, были рассчитаны спектры поглощения кластеров CdS до 394 атомов в общем было проанализировано 14 структур с различным количеством атомов. Из-за эффекта квантового ограничения можно изменять оптические свойства кластеров сульфида кадмия, изменив их размер.[6-11] На основе полученных данных предполагается, что спектры поглощения показывают зависимость самых низких незанятых молекулярных орбиталей от структурных свойств кластеров, особенно от числа односвязных поверхностных атомов. При увеличении размера кластера CdS ширина запрещенной зоны между наивысшими занятыми и низкими незанятыми молекулярными орбиталями (НОМО / LUMO) уменьшается в сторону объемной запрещенной зоны сульфида кадмия для кластеров без односвязных поверхностных атомов.[12-15]

Актуальность

Квантово-механические методы дают нам способ описания многоэлектронных систем. Но как мы знаем из стандартных курсов квантовой механики: если расчёт простейших систем удалось провести путём точного решения уравнения Шредингера, то описание многоэлектронных систем вызвало серьезные трудности. Суть проблемы состоит в том, что многоэлектронные системы обладают большим числом степеней свободы, поэтому в общем случае для них оказалось невозможным проинтегрировать уравнение Шредингера.[2] DFTВ метод, основанный на теории функционала плотности, сформулированной Хоэнбергом, Коном и Шамом позволил преодолеть данные трудности, где вместо волновой функции для расчета основных характеристик системы можно использовать электронную плотность. [4, 5] Полупроводниковые флуоресцентные нанокристаллы или квантовые точки - КТ находят широкое применение в самых различных областях физики. Благодаря уникальным оптическим свойствам - зависимость цвета эмиссии от состава и размера КТ, высокая фотостабильность, широкие спектры поглощения .[1, 3]

Оптимизация

В данной работе были взяты кластеры CdS с различным количеством атомов, начиная от 5 до 394 атомов (Рис. 1). CdS гексагональные кристаллы с структурой вюрцита были построены изначально в программе в GaussView после этого производилась оптимизация в программе deMon. Данная программа основана на методе функционала плотности.