

УДК 544.164

## ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ СВОЙСТВ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК «ЯДРО/ОБОЛОЧКА»<sup>1</sup>

Романова К.А., Крайнов А.А., Галяметдинов Ю.Г.

*Казанский национальный исследовательский технологический университет  
420015, г. Казань, ул. Карла Маркса, д. 68  
e-mail: ksenuya@mail.ru*

Теоретическое моделирование, обеспечивающее надежный результат, необходимо для систематического изучения, объяснения и прогнозирования свойств<sup>2</sup> полупроводниковых квантовых точек (КТ). Функциональные материалы на основе КТ могут проявлять разнообразные свойства в зависимости от формы, размера, природы КТ и их оболочек. Было проведено сравнение теоретически рассчитанных свойств гибридных КТ селенидов и сульфидов кадмия и цинка различного диаметра, покрытых оболочкой различной толщины из полупроводникового материала. Результаты расчетов согласуются с экспериментальными данными. Произведена оценка влияния радиуса КТ и природы оболочки на положение валентной зоны, зоны проводимости и на ширину запрещенной зоны. Установлено, что использование в качестве оболочки сульфида кадмия приводит к уменьшению эффективной ширины запрещенной зоны, что смещает излучение в красную область спектра. Увеличение эффективности люминесценции можно достичь при использовании в качестве оболочки сульфида цинка вследствие локализации электрон-дырочной пары внутри ядра.

Квантово-химические расчеты были проведены с использованием суперкомпьютера МВС-100К «Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН» и вычислительных ресурсов системы «Ломоносов» суперкомпьютерного комплекса МГУ им. М.В. Ломоносова.

### Литература

1. Romanova K.A., Freidzon A.Ya., Bagaturyants A.A., Galyametdinov Yu.G. Journal of Physical Chemistry A, 2014. 118. P. 11244.

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект № 18-33-00062 мол\_a