

**Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық
университетінің 90 жылдығына арналған
«МАТЕМАТИКАЛЫҚ МОДЕЛЬДЕУ МЕН АҚПАРАТТЫҚ
ТЕХНОЛОГИЯЛАР БІЛІМДЕ ЖӘНЕ ҒЫЛЫМДА»
VIII Халықаралық ғылыми-әдістемелік конференция
МАТЕРИАЛДАРЫ**



МАТЕРИАЛЫ

**VIII Международной научно-методической конференции
«МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ
ТЕХНОЛОГИИ В ОБРАЗОВАНИИ И НАУКЕ»,
посвященная 90-летию Казахского национального
педагогического университета имени Абая**



MATERIALS

**VIII International scientific and methodical conference
«MATHEMATICAL MODELING AND INFORMATION
TECHNOLOGIES IN EDUCATION AND SCIENCE»
dedicated to the 90 th anniversary
of Abai Kazakh National Pedagogical University**

**3-4 қазан 2018 жыл
Алматы**

ӘОЖ 51 (063)

КБЖ 22.1

М34

Председатель: Балыкбаев Т.О.

Сопредседатели: Бектемесов М.А., Кулсариева А.Т., Бекпатшаев М.Ж., Бидайбеков Е.Ы., Григорьев С.Г., Гриншкун В.В.

Секретари: Сагимбаева А.Е., Бостанов Б.Г.

Члены программного комитета:

Apostolopoulos Nicollas, Абдиев К.С., Абдыкадыров А.А., Абылкасымова А.Е., Алдашев С.А., Andres S., Ахметов Б.С., Бектемесов М.А., Бекпатшаев М.Ж., Бердышев А.С., Григорьев С.Г., Гриншкун В.В., Далингер В.А., Жалдак М.И., Джумабаев Д.С., Исаков К.Т., Кабанихин С.И., Кальменов Т.Ш., Калимолдаев М.Н., Косов В.Н., Кулбек М.К., Лапчик М.П., Медеуов Е.У., Moriga Selji, Maciej Klakla, Нурбеков Б.Ж., Нурбекова Ж.К., Пак Н.И., Романов В.Г., Сыдыков Б.Д., Уалиев Г.У., Яхно В.Г., Яхно Т.М., Heinrich Begehr, Шарипбаев А.А.

Редакционная коллегия:

Бидайбеков Е.Ы. (отв.редактор), Сагимбаева А.Е. (отв.секретарь), Григорьев С.Г., Гриншкун В.В., Бекпатшаев М.Ж., Косов В.Н., Сыдыков Б.Д., Ахметов Б.С.

Организационный комитет:

Бектемесов М.А., Ишпекбаев Ж.Е., Сахиев С.К., Байымбетова Г.А., Бекпатшаев М.Ж., Бидайбеков Е.Ы., Абылкасымова А.Е., Косов В.Н., Бердышев А.С., Хамраев Ш.И., Уалиев З.Г., Сагимбаева А.Е., Бостанов Б.Г., Шекербекова Ш.Т., Абдулкаримова Г.А., Ошанова Н.Т., Омарова С.А., Медетов Б.Ж.

М 34 МАТЕМАТИКАЛЫҚ МОДЕЛЬДЕУ МЕН АҚПАРАТТЫҚ ТЕХНОЛОГИЯЛАР БІЛІМДЕ ЖӘНЕ ҒЫЛЫМДА: Абай атындағы Қазақ ұлттық педагогикалық университетінің 90 жылдық мерейтойына арналған VIII Халықаралық ғылыми-әдістемелік конференция материалдары=**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В ОБРАЗОВАНИИ И НАУКЕ:** Материалы VIII Международной научно-методической конференции посвященной 90-летию юбилею Казахского национального педагогического университета имени Абая=**MATHEMATICAL MODELING AND INFORMATION TECHNOLOGIES IN EDUCATION AND SCIENCE:** Materials VIII International scientific and methodical conference dedicated to the 90th anniversary of Abai Kazakh National Pedagogical University. – Алматы: ҚазҰПУ, 2018. – 428 б.- қазақша, орысша, ағылшынша

ISBN 978-601-298-715-7

ӘОЖ 51 (063)

КБЖ 22.1

ISBN 978-601-298-715-7

©Абай атындағы ҚазҰПУ «Ұлағат» баспасы, 2018
КазНПУ им.Абая, Издательство «Ұлағат», 2018

ОМИРХАН Ш.¹

КОЛЛОИДНЫЕ КВАНТОВЫЕ ТОЧКИ CdSe: ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА И ОСОБЕННОСТИ СИНТЕЗА

КАЗАХСТАН, АЛМАТЫ,
КАЗАХСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ПЕДАГОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ АБАЯ

В рамках данных работ детально изучены стадии роста нанокристаллов селенида кадмия CdSe, изучена природа свечения, проведена разработка и апробация методик получения монодисперсных коллоидных квантовых точек. Впервые нами проведены пробные варианты синтеза для установления наиболее приемлемых режимов роста и формирования бездефектных наночастиц. Изучены оптические характеристики, возможность применения новых наноматериалов для сенсibilизации действующих отечественных солнечных ячеек. Методами оптической спектроскопии проведена характеристика квантовых точек, определены физические величины

Ключевые слова: исследованию наноразмерных полупроводниковых частиц.

Осы жұмыс аясында кадмий селенид нанокристалдарының өсу кезеңдері мұқият зерттелді, люминесценция табиғаты зерттелді, монодисперсті коллоидты кванттық нүктелерді алу әдістемелері жасалды. Бірінші рет ақаусыз нанобөлшектерді өсіру режимдеріне синтез нұсқалары жасалды. Оптикалық қасиеттері, жаңа наноматериалдарды отандық күн элементтерінде қолдану жұмыстары қарастырылды. Оптикалық спектроскопия әдістерімен кванттық нүктелерге сиппату жұмыстары жасалды.

Кілттік сөздер: наноөлшемді жартылай өткізгіш бөлшектерді зерттеу.

The growth stages of nanocrystals of cadmium selenide CdSe have been studied, the nature of the emission has been studied, and the methods for obtaining monodisperse colloidal quantum dots have been developed and tested. We conducted trial synthesis variants to establish the most acceptable growth regimes and the formation of defect-free nanoparticles. Optical characteristics, the possibility of using new nanomaterials for sensitizing existing domestic solar cells are studied. The methods of optical spectroscopy are used to characterize quantum dots, and physical quantities are determined.

Keywords: research of nanoscale semiconductor particles.

Введение. Интерес к синтезу и исследованию наноразмерных полупроводниковых частиц, так называемых квантовых точек (КТ) связана с изучением их энергетических спектров и перспективных практических применений [1].

Ключевую роль в оптических свойствах КТ играют квантово-размерные эффекты, позволяющие управлять длиной волны оптического поглощения или полосой люминесценции варьируя линейными размерами наночастиц. В зависимости от условий синтеза можно получить люминесцирующую наночастицу с заданными спектральными характеристиками, например при изменении температуре и времени синтеза, подбора химических реагентов, условия заморозки получаемых наночастиц и др. Зависимость энергетического спектра полупроводниковых нанокристаллов от ее размера дает огромный потенциал для их практического применения [2,3]. В настоящей работе изложены результаты исследований КТ CdSe нашей группой.

Экспериментальная часть. Для синтеза КТ CdSe используется модифицированная методика приведенная в работе [4]. Синтез квантовых точек проводился при 170°C, 200°C и 240°C. Для всех синтезируемых КТ берутся аликвоты небольшого объема (~0,1 мл) во время роста через регулярные промежутки времени после инъекции прекурсора селена и разбавляются в толуоле. Для изучения оптических характеристик аликвот не применялись постпрепаративные процедуры очистки.

Характеризация. Все оптические измерения выполнены в течение 2-4 часов после синтеза. Фотолюминесцентные измерения выполнены на спектрофлуориметре CM2203 позволяющем измерять спектры возбуждения и испускания в широкой спектральной области от 200 до 820 нм. Спектры люминесценции регистрируются при 90°C от пучка возбуждения. Спектры оптического поглощения получены на спектрофотометре Jasco V770. Измерения выполнены в кварцевых кюветах.

Энергия экситонного перехода, полученная из максимума первого экситонного пика поглощения использована для оценки среднего диаметра нанокристаллов по эмпирической формуле, откалиброванной к имеющимся экспериментальным данным. Квантовый выход люминесценции был определен методом сравнения с эталоном с известным квантовым выходом (Родамин 6Ж в этаноле) по следующей формуле [5]: $\varphi = \varphi_R \frac{I \cdot D_R \cdot n^2}{I_R \cdot D \cdot n_R^2}$, где I - интегральная интенсивность свечения объекта, D - оптическая плотность на длине волны возбуждения, n – показатель преломления растворителя, индекс R относится к параметрам эталонного образца.

Обсуждение результатов. На первом этапе нами проведены исследования по выявлению различия люминесценции между КТ и фоновым излучением прекурсоров. На рисунке 1 приведены спектры возбуждения (кривая 1) и люминесценции (кривая 2) прекурсора кадмия, т.е. олеата кадмия. При возбуждении фотонами с длиной волны 450 нм замечено яркое свечение с максимумом при 556 нм. Для всех синтезированных квантовых точек присутствует это свечение, например для КТ синтезированных при 170 °С, рисунок 1 (а). Также для всех квантовых точек найдены квантовые выходы люминесценции, рисунок 1 (с).

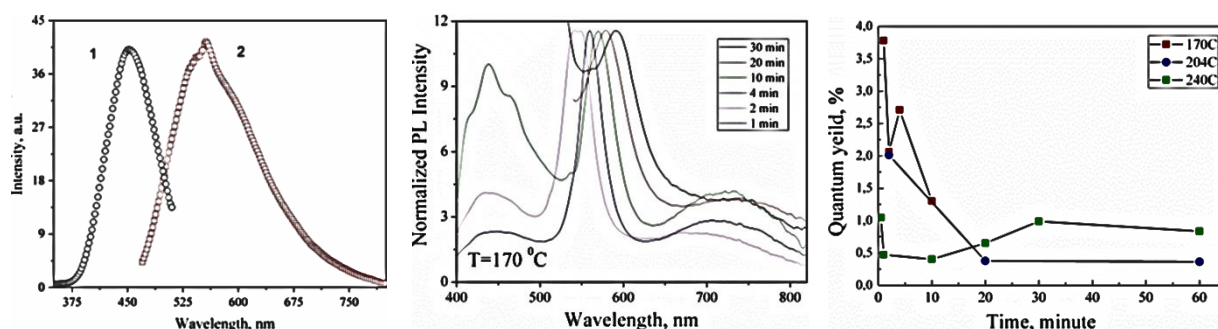


Рисунок 1 – Спектры люминесценции (1) и возбуждения (2) олеата кадмия (а), квантовых точек синтезированных при 170 °С(б), квантовые выходы люминесценции (с)

Спектр люминесценции, рисунок 1(б) всех образцов КТ состоит из коротковолнового свечения неизвестной природы, собственного излучения КТ и длинноволнового свечения. Относительная интенсивность длинноволновой полосы люминесценция (широкая полоса с максимумом на 725 нм) сильно зависит от времени синтеза, что дает возможность предположить о необходимом времени «залечивания» дефектов. По предположению авторов [6] полоса люминесценции связана с поверхностными дефектами (вакансиями селена).

На рисунке 2 приведены спектры оптического поглощения аликвот КТ CdSe выращенные при 170°С 200°С и 240°С. Для всех КТ отношение прекурсоров Cd:Se равно 1:5. Такое отношение прекурсоров выбрано на основании результатов авторов [7], которые показали, что соотношение 1:5 Cd: Se приводит к максимальному квантовому выходу люминесценции.

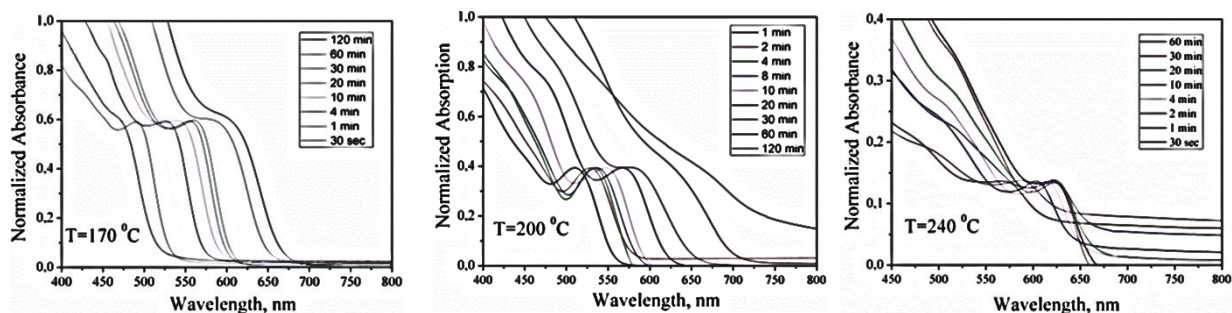


Рисунок 2 – Спектры оптического поглощения КТ CdSe синтезированных при различных температурах

Вид спектров поглощения наглядно демонстрирует рост наночастиц со временем (проявление квантово-размерного эффекта), которое также видно на рисунке 1 (б). По данным спектров поглощения для всех КТ рассчитаны линейные размеры по известной эмпирической формуле:

$D = (9.8127 \times 10^{-7})\lambda^3 - (1.7147 \times 10^{-3})\lambda^2 + (1.0064)\lambda - (194.84)$ [8], и найдены значения ширины запрещенной зоны, результаты приведены в таблице 1.

Таблица 1- Характеризация квантовых точек

t, мин	0,5	1	2	4	8	10	20	30	60	120
D _{170C} , нм	1,16	2,28	-	2,54	-	2,66	2,78	2,86	2,99	3,05
Eg _{170C} , эВ	10,4	6,7	-	6,2	-	6	5,9	5,8	5,6	5,5
D _{200C} , нм	-	2,41	2,53	2,58	2,60	2,67	2,81	2,99	3,28	3,49
Eg _{200C} , эВ	-	6,4	6,2	6,1	6,1	6	5,8	5,6	5,3	5,1
D _{240C} , нм	3,48	4,06	4,76	5,37		5,4	5,6	5,62	5,72	
Eg _{240C} , эВ	2,18	2,11	2,05	2,01		1,98	1,97	1,97	1,97	

Как мы видим из таблицы 1, температура и время синтеза оказывают решающее значение на величины D, Eg. Режимы роста квантовых точек CdSe определенная из измерения полной ширины при половинном максимуме (FWHM) для полос люминесценции для неочищенных образцов представлены на рисунке 5. Наночастицы при определенных условиях синтеза растут с «фокусировкой по размеру» и полидисперсность частиц стабилизируется в минимуме когда этот рост прекращается.

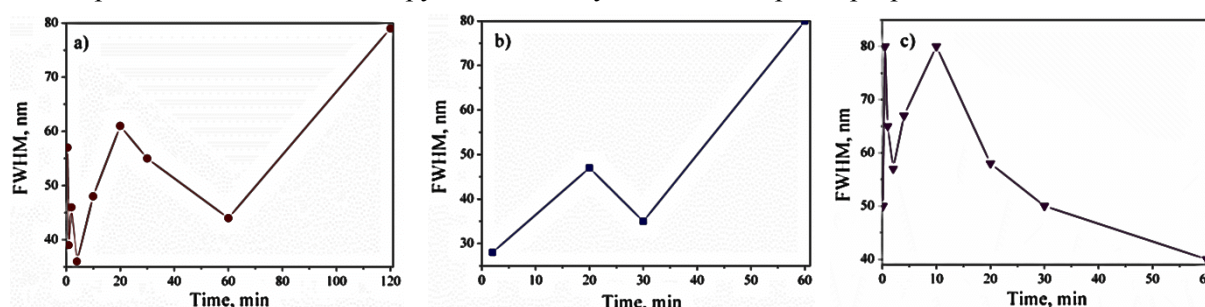


Рисунок 3 – Режимы роста квантовых точек CdSe синтезированных при 170 °C(a), 200 °C(b), 240 °C(c)

Физический смысл кривых сводится к определению режимов получения моно и полидисперсных наночастиц. Наиболее малая наблюдаемая величина FWHM составляет 30 нм, что подразумевает монодисперсный ансамбль формируемых наночастиц.

Закключение.

В работе были исследованы ключевые факторы для получения коллоидных нанокристаллов CdSe высокого качества как температура синтеза, отношение прекурсоров, монодисперсность, квантовый выход люминесценции. Результаты люминесцентных измерений показывают, что поверхность коллоидных нанокристаллов CdSe содержит дефекты, и может подвергаться реконструкции. Высокая температура синтеза и ее длительность благоприятствуют упорядочению поверхности и получению наночастиц без дефектов.

Благодарность. Работа выполнена при поддержке гранта ИРН AP05131725 «Люминесцентные преобразователи солнечного излучения на основе квантовых точек полупроводников для увеличения КПД действующих кремниевых солнечных элементов» Комитета науки МОН РК за 2018 г.

Литературы

1. T.-T.Xuan, J.-Q.Liu, H.L.Li, H.-C.Sun, L.-K.Pan, X.-H.Chen and Z.Sun. RSC Adv. 5(2015). 7673–7678.
2. A.P. Alivisatos. Journal of Physical Chemistry. 100 (1996). 13226 -13239.
3. S.V. Gaponenko. Optical Properties of Semiconductor Nanocrystals. Cambridge University Press, Cambridge. 1998. 245.
4. C.M. Donega, S.G. Hickey, S.F. Wuister, D. Vanmaekelbergh and A. Meijerink. J. Phys. Chem. B. 107 (2003). 489-496.
5. S.N. Contreras Ortiz E.M. Ospino and R. Cabanzo. Journal of Physics: Conference Series. 687 (2016). 012097.
6. R.W. Meulenberg, T. van Buuren, K.M. Hanif, T.M. Willey, G.F. Strouse, L.J. Terminello. Nano Letters. 4 (11). 2004. P. 2277-2285.
7. L. Qu, Z. A. Peng, X. Peng. Nano Lett. 1(2001). 333.
8. W.W. Yu, L. Qu, W. Guo, X. Peng. Chem.Mater.,15(14), 2003.2854-2860.