

Seminář odd. 26

Tenkých vrstev a nanostruktur

Fyzikální ústav AVČR, Cukrovarnická 10, Praha 6

datum: 1. 11. 2011 úterý

čas: 15:00

místo: knihovna, budova A, 1.p.

TÉMA

Teoretické studium optických vlastností křemíkových nanokrystalů metodou funkcionálu elektronové hustoty

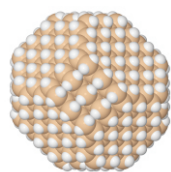
Prokop Hapala

Fyzikální ústav AVČR, v.v.i.

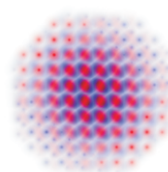
Objemový křemík je typickým představitelem polovodiče s nepřímým zakázaným pásem a tedy s velice nízkou kvantovou účinností luminiscence. Na druhou stranu křemíkové nanokrystalové vykazují podstatně lepší optické vlastnosti, a představují tak potenciální zdroj světla na bázi křemíku s širokými aplikačními možnostmi. Experimentálně bylo pozorováno, že vlastnosti křemíkových nanokrystalů velmi závisí na povrchové pasivaci. Organicky pasivované nanokrystalové vykazují výrazně vyšší kvantovou účinnost s kratší dobou doznívání než běžně připravované křemíkové nanokrystalové pokryté oxidovanou vrstvou.

Pro lepší pochopení vlivu povrchové pasivace na proces luminiscence jsme provedli rozsáhlé ab initio výpočty na modelových nanočásticích o velikosti 2-3nm. Vzhledem k velikosti modelovaných nanočástic, s poloměrem blízkým experimentu, je možné získat reálný obraz o atomární a elektronové struktuře a struktuře optických přechodů. V přednášce budeme zejména diskutovat možné faktory ovlivňující proces luminiscence, jako např. prostorovou lokalizaci náboje, geometrickou relaxaci vlivem pasivace, lokalizaci povrchových stavů, jakož i povrchový a celkový dipólový moment.

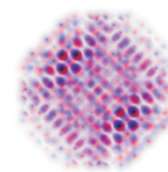
Provedené výpočty přiřítají dominantní roli ve zvýšené účinnosti luminiscence nepolárně pasivovaných nanočástic delokalizaci stavů v k-prostoru. Naopak zhoršení luminiscence u oxidovaných nanočástic je způsobeno silnou lokalizací povrchových stavů, a separací elektronu a díry v reálném prostoru díky silnému dipólovému momentu oxidovaných (-OH pokrytých) nanočástic při nízkých teplotách. V přednášce se také zabýváme otázkou existence pásové struktury v krystalech konečné velikosti a jejím významem pro optické přechody.



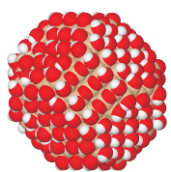
vodíkem
pasivovaná
nanočástice



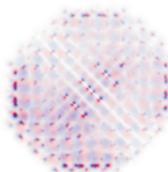
HOMO



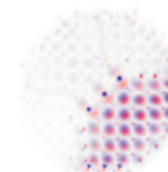
LUMO



oxidovaná (-OH)
pasivovaná
nanočástice



HOMO



LUMO

odborný garant: Ing. Pavel Jelínek, Ph.D.