

ФИЗИКА

УДК 538.911

DOI: 10.18384/2949-5067-2024-2-6-18

МОДЕЛИРОВАНИЕ АТОМНЫХ КОНФИГУРАЦИЙ НАНОКРИСТАЛЛОВ НА СТАДИИ ЗАРОДЫШЕОБРАЗОВАНИЯ

Жуков Н. Д.¹, Клецов А. А.², Мосияш Д. С.¹, Беляев В. В.^{3,4}

¹ *Общество с ограниченной ответственностью «НПП Волга»
410033, г. Саратов, пр-т им. 50 лет Октября, д. 101, оф. 31, Российская Федерация*

² *Саратовский национальный исследовательский государственный университет
им. Н. Г. Чернышевского
410012, г. Саратов, ул. Астраханская, д. 83, Российская Федерация*

³ *Государственный университет просвещения
141014, Московская обл., г. Мытищи, ул. Веры Волошиной, д. 24, Российская
Федерация*

⁴ *Российский университет дружбы народов имени Патриса Лумумбы
117198, г. Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 6, Российская Федерация*

Аннотация.

Цель. Изучение модели нанокристалла зародышевого размера и выявление его свойств и закономерностей.

Процедура и методы. Построена модель и проведены численные расчёты на примере бинарного полупроводника GaAs, которые показали, что при самопроизвольном образовании нанокристалла формируется кристаллическая решётка с размером элементарной ячейки 0,4–0,5 нм, что больше длины связи атомов галлия и мышьяка при их возможном соединении в молекуле (сумма атомных радиусов 0,273 нм) и меньше постоянной решётки арсенида галлия (0,565 нм). Размер нанокристалла, вычисленный как кубический корень из произведения числа атомов на объём элементарной ячейки, составляет 0,6–1,4 нм. Эти значения достаточно точно соответствуют оценке длины волны де Бройля для электрона объёмного кристалла. Ширина запрещённой зоны уменьшается с увеличением числа атомов, изменяясь от величины электронного сродства материала (4,1 эВ) до ширины запрещённой зоны объёмного кристалла – 1,42 эВ.

Результаты. При размерах нанокристалла более минимального (элементарной ячейки) к нанокристаллу применимы физические модели и подходы, используемые для объёмного кристалла.

© СС ВУ Жуков Н. Д., Клецов А. А., Мосияш Д. С., Беляев В. В., 2024.

Теоретическая и практическая значимость. Разработана модель свойств наноразмерной системы GaAs, легированной Zn, обеспечивающая предсказание новых функциональных возможностей таких материалов.

Ключевые слова: наночастица, квантовая точка, нанокристалл, размерное ограничение, размерное квантование, зародышевый размер, атомные конфигурации, квантово-химическая программа, методы пропагаторов

MODELLING OF NANOCRYSTALS ATOMIC CONFIGURATIONS AT NUCLEI FORMATION

N. Zhukov¹, A. Kletsov², D. Mosiyash¹, V. Belyaev^{3,4}

¹ *Limited Liability Company "NPP "Volga"
prospekt imeni 50 let Oktyabrya 101, office 31, Saratov 410033, Russian Federation*

² *Saratov State University
ulitsa Astrakhanskaya 83, Saratov 410012, Russian Federation*

³ *Federal State University of Education
ulitsa Very Voloshinoy 24, Mytishchi 141014, Moscow Region, Russian Federation*

⁴ *Peoples' Friendship University of Russia named after Patrice Lumumba
ulitsa Miklukho-Maklaya 6, Moscow 117198, Russian Federation*

Abstract.

Aim. Study of the model of nucleus-sized nanocrystal and identification of its properties and patterns.

Methodology. A model was developed and numerical calculations were carried out on the example of the binary semiconductor GaAs, which showed that during the spontaneous formation of a nanocrystal, the crystal lattice with an elementary cell size of 0.4 – 0.5 nm is formed, which is greater than the length of the bond of both gallium and arsenic atoms when they are possible combined in the molecule (the sum of atomic radii is 0.273 nm) and less than the lattice constant of gallium arsenide (0.565 nm). The size of the nanocrystal, calculated as the cubic root of the product of the number of atoms and the volume of the unit cell, is 0.6 – 1.4 nm. These values correspond quite accurately to the estimation of the de Broglie wavelength for the electron of the bulk crystal. The bandgap decreases with the number of atoms, varying from the electron affinity of the material (4.1 eV) to the bandgap of the bulk crystal (1.42 eV).

Results. If the size of the nanocrystal is more than the minimum (unit cell), the physical models and approaches used for the bulk crystal are applicable to the nanocrystal.

Research implications. A model of properties of a nanosized system GaAs doped with Zn has been developed that provides prediction of new functionality of these materials.

Keywords: nanoparticle, quantum dot, nanocrystal, dimensional constraint, dimensional quantization, nucleus size, atomic configurations, quantum-chemical program, propagator methods

Введение

Теоретические и экспериментальные исследования наночастиц (НЧ) и квантовых точек (КТ; Нобелевская премия по химии в 2023 г.) позволили сформировать наноиндустрию материалов и структур с физическими свойствами, обеспечивающими широкую сферу новых применений [1; 2]. В последние годы развиваются перспективные направления нанoeлектроники как основы становления и развития самых современных направлений цифровых интеллектуальных технологий, например, квантовых компьютеров [3].

Актуальным является направление физики и химии полупроводниковых нанокристаллов как самостоятельного раздела науки и техники [4]. Принципиальное значение имеет получение требуемых физических свойств нанокристаллов через управление параметрами их технологического синтеза. Анализ литературы за последние пять лет (около тысячи наименований) показал, что исследования, в основном, касаются получения конкретных вариантов геометрии и формы нанокристаллов – наностержней, нанополосок, нанопластинок, наноллистов и др. Особо актуальными являются исследования, обобщающие вопросы управляемого синтеза полупроводниковых НЧ и их свойств, в том числе получения нанокристаллов атомарной и кристаллографической точности [5].

Форма и размеры нанокристалла образуются как геометрические суммы транслируемых элементарных ячеек. Строго говоря, предельно минимальные размеры нанокристалла могут быть равны размерам элементарной ячейки, в среднем равным постоянной решётки, а число атомов в нём – числу атомов в элементарной ячейке. Практически при самоорганизованном образовании нанокристаллов в процессе синтеза, например, коллоидного, минимальные размеры зародышей равны нескольким постоянным решётки.

В данном исследовании рассмотрены некоторые теоретические представления об электронных процессах в нанокристаллах (квантовых точках) минимальных размеров, пригодных для их самоорганизованного синтеза, на примере бинарного полупроводника арсенида галлия – одного из самых используемых на практике материалов. Целью является выработка исходных позиций для исследований коллоидных КТ зародышевых размеров – до двух нанометров.

Метод данного исследования (квантовой химии) может быть применён как вариант моделирования атомных конфигураций, проводимый обычно методами молекулярной динамики [6]. Расчёты с использованием компьютерной программы квантовой химии выполнены Клецовым А. А. [7], в том числе в рамках гранта РФФИ 14-07-00255 (научный руководитель – Н. Д. Жуков).

Задачей нашего исследования явилось моделирование свойств наноразмерного GaAs, легированного Zn, с целью предсказания новых функциональных возможностей таких материалов. Свидетельством актуальности данной задачи является большое количество зарубежных статей по данной тематике. В частности, в них изучается зависимость концентрации

дырок от концентрации легирующей примеси (атомов Zn), зависимость ширины запрещённой зоны от уровня легирования и др. [8]. Наша конкретная задача состоит в том, чтобы определить минимальные размеры нанокристалла бинарного состава, после которых можно использовать методы исследований как для объёмного кристалла.

Физическая модель и схема расчёта

Фундаментальным уравнением, описывающим состояние электрона в кристалле, является уравнение Шрёдингера:

$$ih(d\Psi/dt)=[-(h/2m)\Delta + U(x,y,z,t)]\Psi,$$

где: Ψ – искомая волновая функция состояния электрона, h – постоянная Планка, m – масса электрона, U – оператор потенциальной энергии системы кристалла, $\Delta=(d^2/dx^2 + d^2/dy^2 + d^2/dz^2)$ – оператор волнового вектора.

Уравнение Шрёдингера описывает движение одного электрона. Чтобы описать состояние всей электронной системы, необходимо совместно решать столько уравнений, сколько электронов в системе. Для большого кристалла эта задача сводится к одноэлектронной введением параметра эффективной массы электрона. Для квантоворазмерной структуры, в которой мало электронов, приходится решать систему уравнений. Поиск путей решения этой системы логически приводит к использованию модели «большого атома», то есть к использованию теорий, развитых для квантовохимического описания молекулы.

Метод молекулярных орбиталей даёт представление о распределении электронной плотности и объясняет свойства молекул. В этой теории квантовомеханические зависимости для атома распространены на более сложную систему – молекулу. Молекула рассматривается как целое, а не как совокупность сохранивших индивидуальность атомов. В молекуле (как и в атоме) имеются дискретные энергетические состояния отдельных электронов (молекулярные орбитали) с их самосогласованным движением в поле друг друга и всех ядер молекулы. Все электроны данной молекулы (как и в атоме) распределяются по соответствующим орбиталям. Состояние электрона в атоме описывается одноэлектронной волновой функцией Ψ , являющейся решением уравнения Шрёдингера. Волновая функция, зависящая от четырёх квантовых чисел, имеющая конкретный математический вид и удовлетворяющая условию нормировки и однозначности, называется молекулярной орбиталью (МО) (по аналогии с атомной). Каждая орбиталь характеризуется своим набором квантовых чисел, отражающих свойства электронов в данном энергетическом состоянии. В отличие от одноцентровых орбиталей атомов, орбитали молекул многоцентровые, то есть молекулы имеют общие орбитали для двух или более атомных ядер. Каждая молекулярная орбиталь обладает определённой энергией, приближённо характеризующейся соответствующим потенциалом ионизации.

Путём прямого решения уравнения Шрёдингера можно получить точные волновые функции только для водородоподобных атомов. Для более сложных атомов, с несколькими электронами, надо учитывать энергию электростатического отталкивания всех электронов друг от друга. В связи с этим рассматривают приближённые методы, наиболее существенным из которых является метод самосогласованного поля Хартри-Фока. Идея метода заключается в том, что взаимодействие каждого электрона в атоме со всеми остальными заменяется его взаимодействием с усреднённым полем, создаваемым ядром и остальными электронами.

Для рассмотрения взаимодействия некоторого электрона со всеми остальными электронами атома Хартри ввёл усреднённое (эффективное) поле как суммарное поле всех электронов, кроме данного. Введя это усреднённое поле, Хартри смог разбить уравнение Шрёдингера для волновой функции всех электронов атома на систему одноэлектронных уравнений, которую с помощью применения вариационных методов можно свести к одному уравнению. Решением этого уравнения получают величины, описывающие энергию электрона на i -ой орбитали. Уравнение Хартри является интегро-дифференциальным, решаемым численным интегрированием. В связи с этим волновая функция получается не в аналитической форме, а в виде таблиц числовых значений радиальной функции (или других функций на её основе) в зависимости от координат электронов [9].

Фок усовершенствовал метод Хартри, добавив в его уравнение дополнительный член, учитывающий наличие «обменной энергии». Обменная энергия не связана с кулоновским взаимодействием электронов. Всякое классическое взаимодействие двух одинаковых частиц ведёт к обменной энергии. Обменная энергия не имеет аналогов в классической механике. Открытие её существования является одним из фундаментальных результатов квантовой теории. Когда первый электрон перейдёт в состояние Ψ_A , а второй в Ψ_B – произойдёт обмен состояниями, откуда и берётся название «обменное взаимодействие». Физический смысл обменной энергии заключается в следующем. В соответствии с принципом Паули два электрона с параллельными спинами не могут находиться в одной точке пространства. Следовательно, среднее расстояние между электронами в этом случае будет больше, а электростатическая энергия их отталкивания меньше на некоторую величину, соответствующую обменной энергии.

Традиционный способ решения нелинейных интегро-дифференциальных уравнений Хартри-Фока заключается в простой итерации. Приняв некоторую начальную спин-орбиталь Ψ_{i0} , решают систему и находят функции Ψ_{i1} следующего шага итераций. Как правило, такой процесс сходится, хотя нередки случаи, когда сходимости достичь не удаётся, что приводит к необходимости применять специальные методы принудительной сходимости. В конечном итоге при такой итерационной процедуре на некотором шаге получаются функции, которые при использовании их в кулоновском и обменном операторах вновь

приводят в качестве решений к тем же функциям (в пределах заданной точности). Достижение подобной ситуации указывает на то, что поле, создаваемое электронами, и орбитальные распределения этих электронов согласованы. Поэтому такое поле является самосогласованным, и метод Хартри-Фока часто называют методом самосогласованного поля (ССП) [9].

Характер распределения электронов по молекулярным орбиталям определяет порядок (кратность) связи, её энергию, межядерные расстояния (длина связи), магнитные свойства молекул и др. Заполнение молекулярных орбиталей подчиняется тем же правилам, что и заполнение атомных: принципу энергетической выгоды, принципу Паули, правилу Хунда, принципу заполнения электронных структур Ауфбау. В общепринятом приближении молекулярная орбиталь рассматривается как линейная комбинация атомных орбиталей. В этой связи логически следует необходимость использования квантовомеханической теории многих тел и понятия пропагаторов – «распространителей» (функции Грина), которые вводятся для нахождения свойств фиктивных частиц (квазичастиц и коллективных возбуждений).

Самый простой способ вычисления пропагатора – разложение его в бесконечный ряд и приближительное его вычисление. Это делается с помощью диаграмм Фейнмана.

Процесс моделирования и изучения свойств данных наночастиц – нанокристаллов (NC) – проводился в 2 этапа.

1. Оптимизация структуры NC.
2. Расчёт и анализ электронных свойств.

Первый этап расчётов заключается в оптимизации структуры нанокристалла и электронных связей атомов в нём. Для этого используется квантово-химическая программа Gaussian, которая, решая уравнения Шрёдингера, находит оптимальное расположение связанных электронами атомов решётки, которому соответствует минимальное значение её потенциальной энергии. Полученные при этом результаты, названные здесь «до оптимизации», не были оптимальными. Для оптимизации использовалась теоретическая модель Хартри-Фока с базисами 6-311g и ub3lyp.

Результаты расчётов приведены в виде структурной модели трёхмерного расположения шариков на рисунках, изображающих: Ga – оранжевым, As – фиолетовым, Zn – синим цветом.

Визуализация структур выполнена с помощью программы GaussView.

На рис. 1 изображена структура NC-GaAs, состоящая из 9 атомов, до (a) и после (b) оптимизации. По этим двум изображениям можно заметить, что расстояние между атомами, образующими верхнюю часть КТ, увеличилось.

На рис. 2 изображена структура NC-GaAs:Zn. Процентное содержание цинка в данном соединении составляет 11% (один атом). На рисунке 2a представлены данные для NC до оптимизации, а на рисунке 2b – после. Глядя на рисунок 2b, может показаться, что атом цинка уже не является частью соединения, но на

самом деле между ним и основной частью NC связь есть, однако она настолько слабая, что программа даже не рисует её.

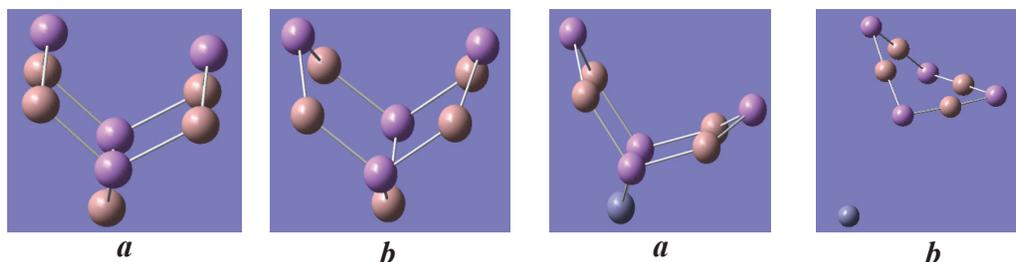


Рис. 1 / Fig. 1. Структура NC-GaAs, состоящая из 9 атомов, до (a) и после (b) оптимизации / NC-GaAs structure comprising 9 atoms. (a) Before and (b) after optimization

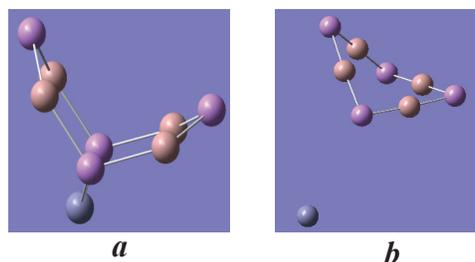


Рис. 2 / Fig. 2. Структура NC-GaAs:Zn, состоящая из 8 атомов Ga-As и одного атома Zn, до (a) и после (b) оптимизации / NC-GaAs:Zn structure comprising 8 Ga-As atoms and one Zn atom. (a) Before and (b) after optimization

Источник: данные авторов

Расчёты проводились для случаев содержания трёх атомов Zn (33%), 15 атомов Ga и As и т. д. Пропуская результаты промежуточных вариантов, на рис. 3 приводятся результаты расчётов в случае 25 атомов Ga и As; на рис. 4–5 – 24% атомов Zn.

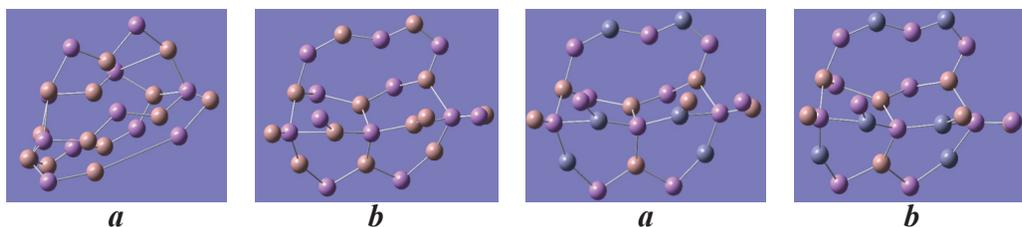


Рис. 3 / Fig. 3. Структура NC-GaAs, состоящая из 25 атомов, до (a) и после (b) оптимизации / NC-GaAs structure comprising 25 atoms. (a) Before and (b) after optimization

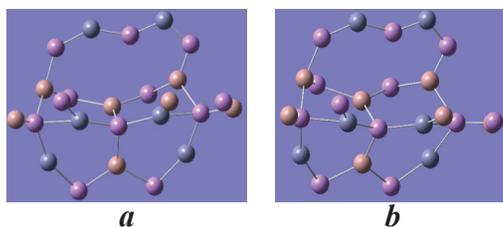


Рис. 4 / Fig. 4. Структура NC-GaAs:Zn, состоящая из 19 атомов Ga – As и 5 атомов Zn, до (a) и после (b) оптимизации / NC-GaAs:Zn structure comprising 19 Ga-As atoms and one Zn atom. (a) Before and (b) after optimization

Источник: данные авторов

На **втором этапе** расчётов – ширины запрещённой зоны нанокристалла – использовалась теория электронного пропагатора. В квантово-химической программе Gaussian такой расчёт производится с помощью метода OVGf – outer valence Green function.

Программа решает уравнение Дайсона-Швингера для функции Грина двойного времени электрона в молекуле. По завершении расчёта с помощью

OVGF получают значения энергии каждой молекулярной орбитали. Также программа обозначает, какая из орбиталей является HOMO, а какая LUMO. HOMO – highest occupied molecular orbital – высшая заполненная молекулярная орбиталь, значение энергии которой соответствует потолку валентной зоны. LUMO – lowest unoccupied molecular orbital – низшая незаполненная молекулярная орбиталь, значение энергии которой соответствует дну зоны проводимости. Посчитав разницу между значениями энергий этих двух орбиталей, получают значение энергии E_g , которую называют шириной запрещённой зоны NC.

Далее представлены результаты расчётов: значения E_g для различных NC, а также графики, показывающие характер изменения E_g от количества атомов в NC.

В табл. 1 приведена сводка полученных данных. Данные для объёмного монокристалла GaAs взяты из книги О. Маделунга [10].

На рис. 5 и 6 изображены зависимости энергии E_g для разных случаев.

На рис. 7 изображена кривая, характеризующая изменение постоянной решётки при различном количестве атомов в NC.

Таблица 1 / Table 1

Сводка данных по материалам и структурам / Materials and structures data

Материал, структура	Легирование, %	Энергия E_g , эВ	Постоянная решётки, нм	Размер атома или кристалла, нм	Электронное сродство, эВ
Галлий				0.125	
Мышьяк				0.148	
GaAs, собственный	-	1.42	0.565		4.07
GaAs, вырожденный	0.1 – 1	1.26			4.07
GaAs-9atoms	-	4.243	0.400	0.83	
GaAs-15at	-	3.835	0.400	0.96	
GaAs-25at	-	3.273	0.470	1.38	
GaAsZn-9at	11	4.190			
GaAsZn-9at	33	5.559			
GaAsZn-15at	13	3.615			
GaAsZn-15at	26	4.127			
GaAsZn-25at	8	3.067			
GaAsZn-25at	24	3.633			

Источник: данные авторов

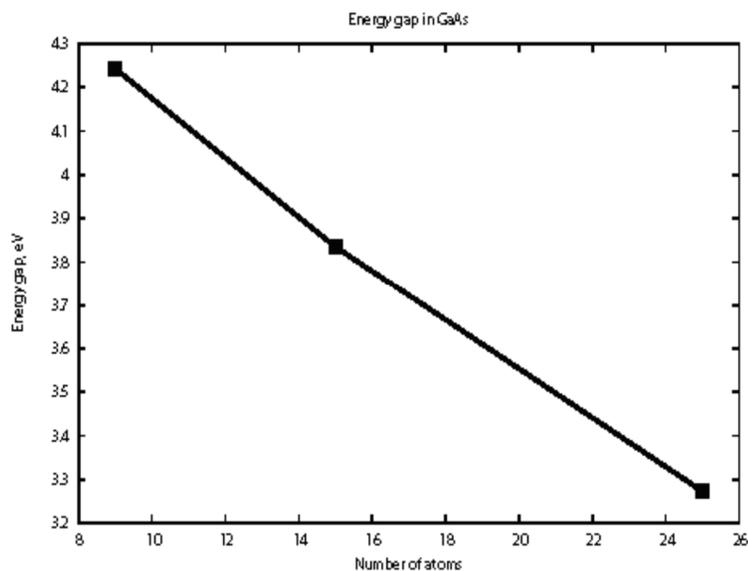


Рис. 5 / Fig. 5. Характер изменения E_g для NC-GaAs при разном количестве атомов / E_g change in NC-GaAs at different atoms quantity

Источник: данные авторов

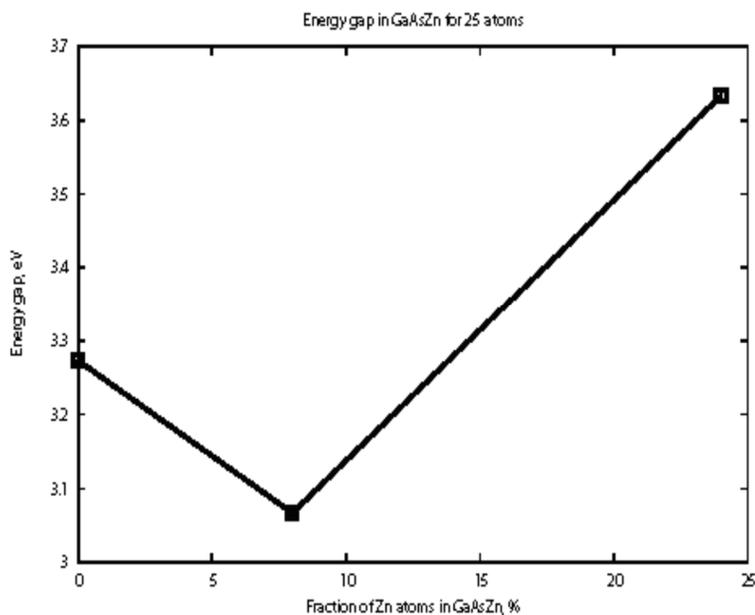


Рис. 6 / Fig. 6. Характер изменения E_g для NC из 25 атомов при разных значениях концентрации легирующей примеси Zn / E_g change in NC comprising 25 atoms at different concentration of Zn dopant

Источник: данные авторов

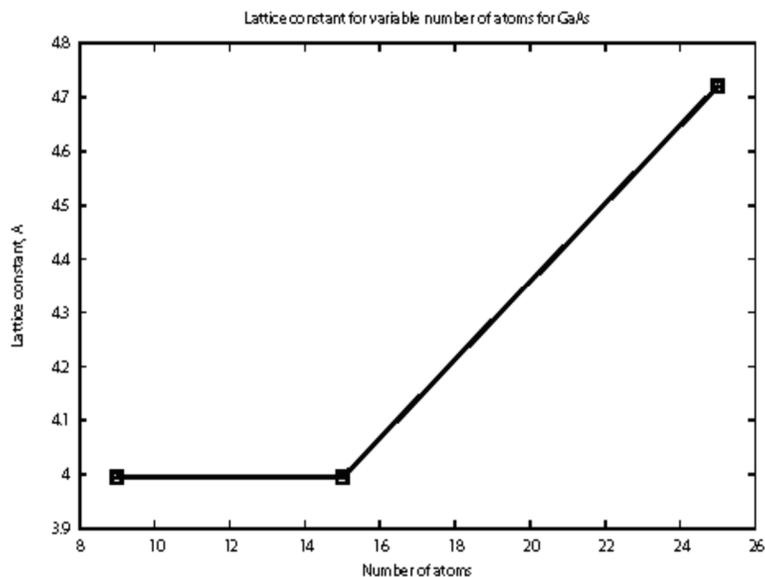


Рис. 7 / Fig. 7. Изменение постоянной решётки при различном количестве атомов в NC / Lattice period change at different atoms quantity in the NC

Источник: данные авторов

Выводы

Данная работа была проделана для ответа на вопрос, можно ли предсказать свойства кристаллической структуры нанокристалла (NC). Этот важный вопрос решает ряд учёных, например, итальянский физик Гавезоти [11]. В отличие от работ других авторов, нами проведены расчёты с учётом влияния атомов примеси – в данном случае к атомам основного материала GaAs добавлен атом Zn. Для объёмного полупроводника GaAs эта примесь является акцепторной, то есть создающей дырочную проводимость за счёт образования в структуре незаполненной электронной связи. Можно предполагать, что добавление этого атома в NC приведёт к образованию такой связи, что отразится на значении электронного сродства. Этот вопрос имеет принципиальное значение при решении проблем взаимодействий NC с внешним электроном, что важно для исследований.

На основе полученных данных расчётов можно сделать следующие важные выводы.

1. Теоретические расчёты показали, что соединение атомов 3 группы галлия (Ga) и пятой группы мышьяка (As) оптимально формирует структуру, подобную кристаллической решётке, то есть с закономерным расположением атомов. При этом размер элементарной ячейки, подобный постоянной решётки, равен 0,4–0,5 нм. Это больше длины связи атомов галлия и мышьяка при их возможном соединении в молекуле (сумма атомных радиусов 0,273 нм) и меньше постоянной решётки арсенида галлия (0,565 нм).

2. Размер нанокристалла, вычисленный как кубический корень из произведения числа атомов на объём элементарной ячейки, 0,6–1,4 нм. Эти значения достаточно точно соответствуют оценке длины волны де Бройля для электрона объёмного кристалла.

3. Энергия E_g уменьшается с увеличением числа атомов (ЧА). Сопоставление с параметрами объёмного монокристалла приводит к выводу, что значение E_g изменяется от величины электронного сродства материала (4,1 эВ) при ЧА-min до ширины запрещённой зоны – 1,42 эВ при ЧА, стремящемся к бесконечности.

4. Энергия E_g зависит от содержания примеси. При малой концентрации от её величины E_g зависит слабо, а при её увеличении – сильно. Это может свидетельствовать о том, что при малых уровнях добавки она работает как примесь в составе из двух элементов Ga/As, мало изменяя E_g , а при больших – как элемент состава из трёх Ga/As/Zn.

5. Проведённый анализ позволяет сделать важный для практики вывод о том, что спектральным составом люминесценции, напрямую связанным с энергией E_g в НС можно управлять, изменяя их размеры и «легирование».

6. Проведённый анализ позволяет сделать важный для исследований вывод о том, что при размерах нанокристалла более минимального (элементарной ячейки), который мы назвали как зародышевый, к нанокристаллу применимы все физические модели и подходы, используемые для объёмного кристалла.

Статья поступила в редакцию 22.02.2024

ЛИТЕРАТУРА

1. Бричкин С. Б., Разумов В. Ф. Коллоидные квантовые точки: синтез, свойства и применение // Успехи химии. 2016. Т. 85. № 12. С. 1297–1312. DOI: <https://doi.org/10.1070/RRCR4656>.
2. State-of-the-Art and Trends in Synthesis, Properties, and Application of Quantum Dots-Based Nanomaterials / M. Alizadeh-Ghodsi, M. Pourhassan-Moghaddam, A. Zavari-Nematabad, B. Walker, N. Annabi, A. Akbarzadeh // Particle & Particle Systems Characterization. 2019. Vol. 36. Iss. 2. P. 1800302. DOI: <https://doi.org/10.1002/ppsc.201800302>.
3. Han M., Karatum O., Nizamoglu S. Optoelectronic Neural Interfaces Based on Quantum Dots // ACS Applied Materials & Interfaces. 2022. Vol. 14. Iss. 18. P. 20468–20490. DOI: <https://doi.org/10.1021/acsmami.1c25009>.
4. Montanarella F., Kovalenko M. V. Three Millennia of Nanocrystals // ACS Nano. 2022. Vol. 16. Iss. 4. P. 5085–5102. DOI: <https://doi.org/10.1021/acsnano.1c11159>.
5. Hens Z., De Roo J. Atomically Precise Nanocrystals // Journal of the American Chemical Society. 2020. Vol. 142. Iss. 37. P. 15627–15637. DOI: <https://doi.org/10.1021/jacs.0c05082>.
6. Нанoeлектроника. Теория и практика: учебник для высшей школы / В. Е. Борисенко, А. И. Воробьёва, А. Л. Данилюк, Е. А. Уткина. М.: БИНОМ, 2013. 366 с.
7. Клецов А. А. Квантово-механические основы нанoeлектроники: учебное пособие для студентов. Саратов: Саратовский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, 2013. 102 с.

8. Zn incorporation and band gap shrinkage in p-type GaAs / M. K. Hudait, P. Modak, S. Hardikar, S. B. Krupanidhi // *Journal of Applied Physics*. 1997. Vol. 82. Iss. 10. P. 4931–4937. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.366359>.
9. Dekker C., Ratner M. A. Electronic properties of DNA // *Physics World*. 2001. Vol. 14. No. 8. P. 29–33. DOI: [10.1088/2058-7058/14/8/33](https://doi.org/10.1088/2058-7058/14/8/33).
10. Маделунг О. Физика полупроводниковых соединений элементов III и V групп. М.: Мир, 1967. 468 с.
11. Gavezzotti A. *Molecular aggregation, Structure analysis and Molecular Simulation of Crystals and Liquids*. Oxford: Oxford University Press, 2007. 425 p.

REFERENCES

1. Brichkin S. B., Razumov V. F. [Colloidal quantum dots: synthesis, properties and applications]. In: *Uspekhi khimii* [Russian Chemical Reviews], 2016, vol. 85, no. 12, pp. 1297–1312. DOI: <https://doi.org/10.1070/RCR4656>.
2. Alizadeh-Ghodsi M., Pourhassan-Moghaddam M., Zavari-Nematabad A., Walker B., Annabi N., Akbarzadeh A. State-of-the-Art and Trends in Synthesis, Properties, and Application of Quantum Dots-Based Nanomaterials. In: *Particle & Particle Systems Characterization*, 2019, vol. 36, iss. 2, p. 1800302. DOI: <https://doi.org/10.1002/ppsc.201800302>.
3. Han M., Karatum O., Nizamoglu S. Optoelectronic Neural Interfaces Based on Quantum Dots. In: *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2022, vol. 14, iss. 18, pp. 20468–20490. DOI: <https://doi.org/10.1021/acsmi.1c25009>.
4. Montanarella F., Kovalenko M. V. Three Millennia of Nanocrystals. In: *ACS Nano*, 2022, vol. 16, iss. 4, pp. 5085–5102. DOI: <https://doi.org/10.1021/acsnano.1c11159>.
5. Hens Z., De Roo J. Atomically Precise Nanocrystals. In: *Journal of the American Chemical Society*, 2020, vol. 142, iss. 37, pp. 15627–15637. DOI: <https://doi.org/10.1021/jacs.0c05082>.
6. Borisenko V. E., Vorobyova A. I., Danilyuk A. L., Utkina E. A. *Nanoelektronika. Teoriya i praktika* [Nanoelectronics. Theory and practice]. Moscow, BINOM Publ., 366 p.
7. Kletsov A. A. *Kvantovo-mekhanicheskiye osnovy nanoelektroniki* [Quantum mechanical foundations of nanoelectronics]. Saratov, Saratov State University Publ., 2013. 102 p.
8. Hudait M. K., Modak P., Hardikar S., Krupanidhi S. B. Zn incorporation and band gap shrinkage in p-type GaAs. In: *Journal of Applied Physics*, 1997, vol. 82, iss. 10, pp. 4931–4937. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.366359>.
9. Dekker C., Ratner M. A. Electronic properties of DNA. In: *Physics World*, 2001, vol. 14, no. 8, pp. 29–33. DOI: [10.1088/2058-7058/14/8/33](https://doi.org/10.1088/2058-7058/14/8/33).
10. Madelung O. *Fizika poluprovodnikovyykh soyedineniy elementov III i V grupp* [Physics of semiconductor compounds of elements of groups III and V]. Moscow, Mir Publ., 1967. 468 p.
11. Gavezzotti A. *Molecular aggregation, Structure analysis and Molecular Simulation of Crystals and Liquids*. Oxford, Oxford University Press, 2007. 425 p.

ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

Жуков Николай Дмитриевич – кандидат физико-математических наук, генеральный директор Общества с ограниченной ответственностью «НПП Волга»;
e-mail: ndzhukov@rambler.ru

Клецов Алексей Александрович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры материаловедения Саратовского национального исследовательского государственного университета им. Н. Г. Чернышевского;
e-mail: ndzhukov@rambler.ru

Мосияш Денис Сергеевич – ведущий специалист Общества с ограниченной ответственностью «НПП Волга»;
e-mail: ndzhukov@rambler.ru

Беляев Виктор Васильевич – доктор технических наук, профессор, главный научный сотрудник управления развития науки, профессор кафедры фундаментальной физики и нанотехнологии Государственного университета просвещения; профессор кафедры нанотехнологии и микросистемной техники Российского университета дружбы народов имени Патриса Лумумбы;
e-mail: vic_belyaev@mail.ru, vv.belyaev@guppros.ru

INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

Nikolay D. Zhukov – Cand. Sci. (Phys.-Math.), General Director, Limited Liability Company NPP Volga;
e-mail: ndzhukov@rambler.ru

Aleksey A. Kletsov – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Assoc. Prof., Department of Materials Science, Saratov State University;
e-mail: ndzhukov@rambler.ru

Denis S. Mosiyash – Leading Specialist, Limited Liability Company NPP Volga;
e-mail: ndzhukov@rambler.ru

Victor V. Belyaev – Dr. Sci. (Engineering), Leading Researcher, Science Development Department; Prof., Department of Fundamental Physics and Nanotechnology, Federal State University of Education; Prof., Department of Nanotechnologies and Microsystem Technology, Peoples' Friendship University of Russia named after Patrice Lumumba;
e-mail: vic_belyaev@mail.ru, vv.belyaev@guppros.ru

ПРАВИЛЬНАЯ ССЫЛКА НА СТАТЬЮ

Моделирование атомных конфигураций нанокристаллов на стадии зародышеобразования / Жуков Н. Д., Клецов А. А., Мосияш Д. С., Беляев В. В. // Вестник Государственного университета просвещения. Серия: Физика-Математика. 2024. № 2. С. 6–18.

DOI: 10.18384/2310-7251-2024-2-6-18.

FOR CITATION

Zhukov N. D., Kletsov A. A., Mosiyash D. S., Belyaev V. V. Modelling of nanocrystals atomic configurations at nuclei formation. In: *Bulletin of Federal State University of Education. Series: Physics and Mathematics*, 2024, no. 2, pp. 6–18.

DOI: 10.18384/2310-7251-2024-2-6-18.