# Размерное моделирование синтеза и проводимости коллоидных квантовых точек

© Н.Д. Жуков<sup>1</sup>, М.В. Гавриков<sup>1,2</sup>, С.Н. Штыков<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Группа малых инновационных предприятий "НПП Волга",

410033 Саратов, Россия

<sup>2</sup> Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского,

410012 Саратов, Россия

E-mail: ndzhukov@rambler.ru

Поступила в Редакцию 24 января 2022 г. В окончательной редакции 14 февраля 2022 г. Принята к публикации 14 февраля 2022 г.

> На примере синтезированных ранее коллоидных квантовых точек (QD) ряда полупроводников CdSe, PbS, HgSe, InSb определены предельные размеры нанокристаллов совершенной структуры при их синтезе в зависимости от соотношений их объемной и поверхностной энергии, которые могут варьироваться от 6 нм для QD-InSb до 17 нм для QD-CdSe. Проводимость одиночных квантовых точек в межэлектродном нанозазоре является одноэлектронной, а их вольт-амперная характеристика имеет области электронного туннелирования через потенциальные барьеры, кулоновского ограничения тока и резонансные пики квантовой проводимости. Определены размерные соотношения и построены номограммы связи размерных параметров для обеспечения условий квантовой проводимости. Обосновано предположение о терагерцовых осцилляциях тока.

> Ключевые слова: квантовая точка, нанокристалл, коллоидный синтез, монокристаллическая структура, размерные соотношения, квантовая размерность, одноэлектронная проводимость, квантовая проводимость, квантовый осциллятор.

DOI: 10.21883/FTP.2022.06.52588.9809

#### 1. Введение

Перспективы практического использования необычных свойств квантовых точек (QD) очень широки [1], однако реальное применение к настоящему времени они получили только в лазерах [2], светодиодах и некоторых других приборах оптоэлектроники [3]. По их основному предназначению в наноэлектронике ведутся исследования по нескольким направлениям, в частности, по двумерным коллоидным наноматериалам на основе квантовых точек с изменяемой плотностью состояний и шириной запрещенной зоны, которые входят в список лучших материалов для электрокаталитических, фотогальванических и светоизлучающих приложений [4], способам размещения и контактирования в наноячейке [5,6]. В люминесцирующей наноструктуре основную роль играет образование и размерное ограничение движения экситона. Для наноэлектроники в квантовой точке важны процессы транспорта (дрейфа, рассеяния и отражения, рекомбинации, эмиссии, туннелирования) в условиях квантово-размерного ограничения движения электрона. Эти процессы качественно и количественно отличаются от экситонного объяснения необычных свойств QD, так как для чисто электронного процесса принципиально важно наличие совершенной кристаллической структуры, определяющей свойства зон энергии и импульса электрона. В этой связи в литературе обычно используется термин "нанокристалл". Практически во всех теоретических исследованиях электронных свойств нанокристаллов исходят из предположения существования у них совершенной кристаллической структуры [7–9], однако экспериментальным исследованиям этого вопроса посвящено крайне мало работ [10–12]. Также достаточно редко обсуждается связь между размерами наночастиц и их кристаллической структурой [10].

В нашей работе сделана попытка теоретических оценок и экспериментального исследования условий синтеза коллоидных квантовых точек на основе наиболее применяемых вариантов полупроводников (CdSe, PbS, InSb, HgSe) совершенной кристаллической структуры и оценки влияния размерного электронного квантования на проводимость QD.

Основные полученные количественные результаты приведены в таблице. Используемые в работе параметры полупроводников, такие как ширина запрещенной зоны  $E_g$ , отношение эффективной массы электрона m к массе свободного электрона  $m_0$ , постоянная решетки  $a_0$ , энергия образования кристалла  $H_{\rm form}$ , взяты из Интернет-справочника [http://xumuk.ru/encyklopedia]. В таблице введены следующие обозначения: a — размер полигональной фигуры нанокристалла,  $a_{\rm max}$  — наибольший размер ребра кубического нанокристалла совершенной кристаллической структуры.

# 2. Коллоидный синтез

Коллоидные квантовые точки получали по общей технологии, описанной в наших работах [11,13]. При

Сводка основных данных

	<i>Eg</i> , эВ	$m/m_0$	<i>а</i> <sub>0</sub> , нм	$H_{\rm form}$ , кДж/м	$a_{\max}$ , HM	$a_{\text{meas}}$ , HM	γ	β	<i>а</i> <sub><i>n</i>1</sub> , нм	<i>а</i> <sub><i>n</i>2</sub> , нм
QD-CdSe QD-PbS QD-HgSe QD-InSb	1.74 0.41 0.07 0.17	0.13 0.080 0.045 0.013	0.430 0.593 0.585 0.649	130 90 60 32	17 16 10	2.0-3.5 2.5-4.0 3.5-5.5 4.0-7.5	1.18 1.38 1.94 1.72	2.20 2.03 2.21 2.35	2.0-3.0 2.0-4.0 2.0-5.5 2.5-8.0	2.5-6.0 2.5-8.0 3.0-8.0 5.5-8.0

этом для разных вариантов составов QD дополнительно подбирали необходимые условия синтеза. Каждую партию образцов контролировали на случайной выборке QD методами просвечивающей (TEM, по форме и размерам) и сканирующей (по стехиометрическому составу) электронной микроскопии, сканирующей зондовой микроскопии (C3M, по свойствам электронной проводимости).

Спецификой коллоидного синтеза является его самоорганизующий характер, состоящий из стадий нуклеации (образования зародышей) и последующего роста кристаллов. С фундаментальных позиций, основными лимитирующими процессами при этом являются термодинамический и кинетический. Первый действует в условиях локального концентрационного пересыщения, основанного на принципах минимума энергии и максимума энтропии. Эта теория дает общее представление о том, как контролировать образование частиц в растворе, выделяя ключевые контролируемые параметры: температуру реакции, пересыщение, время ее протекания и поверхностную энергию, которыми можно управлять косвенно, например, путем выбора поверхностно-активных веществ [14]. Кинетический процесс определяется броуновским движением зародышей, ионов и молекул в растворе. Причем он происходит в реальных условиях очень малых концентраций прекурсоров в растворе. Таким образом, регулированием температуры, концентраций и активности прекурсоров в растворе можно управлять синтезом, делая его максимально приближенным к квазиравновесному состоянию, получая тем самым нанокристаллы совершенной структуры и стехиометрии.

Следует, однако, отметить, что единого мнения по поводу факторов, определяющих размер нанокристаллов, нет. Например, в термодинамике образования нанокристаллов предлагают учитывать роль поверхностного натяжения [15], а при расчете работы образования нанокристалла вместо пересыщения каждого из компонентов использовать экспериментально определяемый единственный термодинамический параметр — избыточное давление метастабильной фазы [16]. Другие авторы обращают внимание на то, что размер получаемых нанокристаллов определяется "магическими числами" атомов на поверхности, которые служат условием минимума поверхностной энергии наночастицы [17].

В процессе образования и роста зародышей растет внутренняя энергия нанокристалла и уменьшается его поверхностная энергия. Как только поверхностная энергия достигает уровня энергии Ван-дер-Ваальса, появляется вероятность неконтролируемого присоединения к нанокристаллу "чужих" атомов и молекул. Это могут быть отдельные атомы и их комплексы с любыми имеющимися в коллоидном растворе лигандами, а также поверхностно-активные вещества. Следует отметить, что многие теоретические предположения об образовании нанокристаллов будут подтверждаться или опровергаться. Уже в настоящее время достигнут большой прогресс в возможностях экспериментальной техники, которая позволяет, используя жидкофазную ТЕМ, при низкой мощности дозы контролировать и визуализировать взаимодействие наночастиц, не влияя на их движение. Комбинирование отслеживания индивидуальных наночастиц с моделированием Монте-Карло позволило сделать вывод о том, что позиционное упорядочение сверхрешетки возникает из ориентационного беспорядка [18,19].

Совершенство кристаллической структуры контролируется обычно методом рентгено-дифракционного анализа. Для нанокристаллов, однако, такие исследования практически затруднительны, что обусловлено технологическими проблемами подготовки подходящих для метода образцов [20]. Вместо них обычно проводится рентгеноспектральный микроанализ по пикам рентгенограммы, сопоставляемым со справочными данными. Кроме того, совершенство нанокристаллов косвенно оценивается по их полигональной форме на ТЕМ-снимках высокого разрешения и по свойствам электронной проводимости, зависящей от эффективной массы электрона — важного параметра совершенной структуры монокристалла.

Определение поверхностной энергии нанокристалла является сложной теоретической и практической задачей [21]. Показано, что при числе атомов N > 1000можно с хорошей точностью считать, что функция зависимости поверхностного натяжения тождественна пропорциональной зависимости поверхностного натяжения нанокристалла от числа атомов. Тогда для оценок можно принять, что энергия образования нанокристалла *H*<sub>form</sub> равна энергии одной электронной связи, умноженной на их число N в нем. Для самого простого варианта кубической решетки  $N \sim (a/a_0)^3$ , и пересчет на поверхностную энергию  $E_c$  приведет к пропорции  $E_c/H_{\text{form}} \sim 6a_0/a$ . Откуда  $a \sim 6a_0(H_{\text{form}}/E_c)$ . Принимая  $E_c$  как энергию Вандер-Ваальса, по максимуму равную 20 кДж/моль [22], можно оценить наибольший размер совершенного нанокристалла *a*<sub>max</sub> для всех вариантов QD (см. таблицу).



Рис. 1. Фрагментарные TEM-снимки: a - QD-HgSe, b - QD-InSb, c - QD-CdSe.

Свой вариант расчета поверхностной энергии полупроводников представлен в работе [23].

Некоторые подтверждающие этот теоретический анализ данные для QD-PbS представлены в нашей статье [11]. На рис. 1 дополнительно приведены типичные TEM-снимки для других образцов. Для QD-HgSe (рис. 1, a), синтезированных с временной передержкой роста, при большом увеличении можно видеть, что кристаллиты самых малых размеров (~ 2 нм) имеют форму квадрата, несколько больших размеров (3-5 нм) — квадрата или пятиугольника, совсем больших (6-15 нм) круга или эллипса. В работе [10], в частности, показано, что QD-HgSe относительно больших размеров (> 10 нм) имеют сферическую форму и поликристаллическую структуру. Для QD-InSb (рис. 1, b) приведен фрагмент монослоя квантовых точек, высаженных на подложку методом пленок Ленгмюра-Блоджетт [6], имеющих выраженную форму и размеры не более 5-7 нм. Для QD-CdSe (puc. 1, c) приведен снимок QD относительно больших размеров (до 12 нм), имеющих при этом, однако, полигональную форму.

#### 3. Электронная проводимость

Важнейшие свойства квантовой точки, как наночастицы малых (< 10 нм) размеров, определяются процессами электронной проводимости через нее в межэлектродном нанозазоре. В силу ее супермалого объема в ней нет равновесных электронов собственной проводимости, т. е. ее сопротивление для электрического тока бесконечно. Поэтому ток через нее определяется только процессами туннельного пролета, дрейфа, рассеяния, эмиссии инжектированного из электрода электрона в условиях размерного квантования. При этом процесс является одноэлектронным (поэлектронным) [24]. Одноэлектронный характер процесса транспорта в QD обусловлен проявлением кулоновской блокады благодаря взаимодействию электронов из-за перекрытия их волновых функций при условии конфайнмента, когда размер дистанции квантования не больше длины волны де Бройля для электрона. Одноэлектронная модель QD значительно упрощает схему рассмотрения, позволяя использовать в рамках метода Венцеля—Крамерса—Бриллюэна частные решения одномерного линейного уравнения Шредингера [7–9]. Кроме того, для одноэлектронной модели можно принять, что энергия поля (межэлектродное напряжение V) в квантовой точке является потенциальной энергией для движущегося в ней электрона.

Формулы для полной энергии  $E_n$ , длины волны де Бройля  $\Lambda$  для электрона и вероятности K проникновения электрона в QD, как глубокую прямоугольную протяженную потенциальную яму, в одномерной размерной модели могут быть получены в следующем виде [7]:

$$\begin{split} \tilde{E}_n &\sim h^2 n^2 (8ma^2)^{-1} \sim 0.37 n^2 (m/m_0)^{-1} a^{-2}, \\ \Lambda &\sim h (2m \tilde{E}_k)^{-1/2} \sim 1.2 (\tilde{E}_k m/m_0)^{-1/2} \sim 2a/C, \\ K &\sim \exp[-2a (2m \tilde{E}_k)^{1/2}/h] \sim \exp[-1.7a (\tilde{E}_k m/m_0)^{1/2}] \\ &\sim \exp[-0.63 (n^2 - 2.7V a^2 m/m_0)^{1/2}] \sim \exp[-0.63C], \end{split}$$

где h — постоянная Планка, n — квантовые числа, a — линейный размер квантования (размер QD),  $\tilde{E}_k \sim (\tilde{E}_n - V)$  — кинетическая энергия электрона;  $C \sim (n^2 - 2.7 V a^2 m/m_0)^{1/2}$  — безразмерный параметр, зависящий от напряжения;  $\tilde{E}_k$ ,  $\tilde{E}_n$ , V — в электронвольтах,  $\Lambda$  и a — в нанометрах.

Формулу для вольт-амперной характеристики (ВАХ) для случая, когда ток лимитируется вероятностью проникновения электрона в QD, можно записать в следующем виде:  $I \propto K \sim \exp[-0.63C]$  или —  $I \sim I_0 \exp[-\gamma C]$ . Здесь  $\gamma$  может иметь значение 0.63 или быть несколько более него, определяя уменьшение вероятности прохождения электрона за счет отклонения его волнового вектора от линии электрического поля. Параметр  $\gamma$  зависит 140



**Puc. 2.** a - BAX: 1 - QD-InSb, 2 - QD-HgSe, 3 - QD-PbS,4 — тест-микро-InSb, 5 — тест-ITO; b — фрагменты ВАХ для QD-PbS, как пример. На вставке — типичная зависимость дифференциальной проводимости QD.

от степени подвижности электрона — чем "тяжелее" электрон, тем меньше  $\gamma$  (см. таблицу).

На рис. 2, а приведены типичные ВАХ, измеренные на случайной выборке вариантов образцов по отработанной нами методике [24,25]. ВАХ для образцов всех исследованных вариантов демонстрируют особенный характер поведения — наличие отдельных пиков и квазипериодическую осцилляцию тока, которые мы интерпретируем далее в модели размерного электронного квантования. В зависимости от величины эффективной массы *m*/*m*<sub>0</sub>, как важнейшего параметра размерного квантования, и размера QD доля числа образцов с проявлением особенности в виде токовых пиков была от 10% для QD-CdSe до 80% для QD-InSb.

Построение-обработка ВАХ в разных координатах показала, что на участках до характерного токового пика они хорошо интерпретируются формулой  $I \sim I_0 \exp[-\gamma C]$  (рис. 3, *a*), а далее — формулой  $I \propto V^{\beta}$  (рис. 3, *b*). Полученные значения характерных параметров у и  $\beta$  указаны в таблице. Как показано в ряде наших работ [13,24,25], такое поведение ВАХ обусловлено лимитирующими механизмами туннелирования, в первом, и кулоновского ограничения, во втором случаях. Таким образом, при малых значениях напряжения энергии электронный транспорт лимитирует туннельно-эмиссионное преодоление потенциальных барьеров в QD, а при больших — зарядовое ограничение. Причем ограничивающее действие может быть

связано с влиянием решетки нанокристалла в модели блоховских осцилляций [26] или эффектом, подобным кулоновской лестнице за счет осцилляций квантовой проводимости [27], — разрешение данного вопроса требует специального исследования. Квазипериод осцилляций  $\Delta V \sim \Delta E_n$ , предположительно, можно вычислить дифференцированием выражения для  $\tilde{E}_n$  по a, приняв за  $\Delta a$  величину постоянной решетки. Полученные при этом значения  $\Delta V \sim (0.05 - 0.1)B$  соответствуют экспериментальным результатам.

Для большого числа образцов всех вариантов были построены характеристики последовательности токовых пиков, которые взяты от ВАХ разных QD, отличающихся размерами, и имели вид рис. 2, b, где изображены ВАХ



Рис. 3. ВАХ в характерных координатах. *а* — характеристики  $\ln I \sim C = (n^2 - 3Va^2m/m_0)^{1/2}$ : *I* — QD-HgSe, *a* = 4 HM, *n* = 2; 2 — QD-CdSe, a = 4 HM, n = 2: 3 — QD-InSb, a = 3 HM, n = 1; 4 - QD-PbS, a = 5.5 нм, n = 2; b - соответствиезависимости  $I \sim V^{\beta}$ : 1 — QD-CdSe, 2 — QD-PbS, 3 — QD-HgSe, 4 — QD-InSb.

Физика и техника полупроводников, 2022, том 56, вып. 6



**Рис. 4.** Номограмма связи размера QD и напряжения (энергии электрона) для проявления квантовой проводимости (C = 0) в резонансах n = 1: 1 - QD-InSb, 2 - QD-HgSe, 3 - QD-PbS, 4 - QD-CdSe; n = 2: 1' - QD-InSb, 2' - QD-HgSe, 3' - QD-PbS, 4' - QD-CdSe.

для QD-PbS. Для других вариантов BAX аналогичного вида приведены в наших статьях — QD-HgSe [28] и QD-InSb [29]. Как видно из рис. 2, *b*, характерным является примерно линейная зависимость тока максимумов пиков от напряжения—энергии. Это может означать, что механизм прохождения электрона в энергетической зоне токового пика отличается от тех, которые действуют в прилежащих к пику зонах. Характерный вид токовых пиков, подобных резонансной кривой, может свидетельствовать о баллистической квантовой проводимости в условиях резонанса, когда энергия электрона соответствует правилу квантового отбора, а параметр  $C \sim 0$  условие резонанса.

На вставке рис. 2, *b* приведена типичная зависимость проводимости образцов dI/dV = G, полученная дифференцированием ВАХ. Величины квантовой проводимости составляли ~  $(1-2) \cdot 10^{-6} \text{ Om}^{-1}$ . Для их оценки и подтверждения размерной модели квантовой проводимости мы воспользовались выражением для проводимости квантовой проволоки в расчете на одну квантовую ступеньку и с учетом одноэлектронного характера проводимости [27]:  $G_0 \sim Kq^2/h$ , где q — заряд электрона. Полагая K = 1 ( $C \sim 0$ ), получим  $G_0 \sim 4 \cdot 10^{-5} \text{ Om}^{-1}$ . В качестве общего числа квантовых ступенек в нанокристалле, предположительно, можно принять отношение  $a/a_0 \sim 10$ . Тогда  $G \sim 4 \cdot 10^{-6} \text{ Om}^{-1}$ , что вполне сопоставимо с экспериментальными результатами (см. вставку на рис. 2, *b*).

Размерное влияние на электронную проводимость зависит от соотношения a и  $\Lambda \sim 2a/C$ . Для условия конфайнмента,  $(\Lambda/a) > 1$ , необходимо, чтобы выполнялось соотношение:  $0 \le C^2 < 4$ . Условие резонанса и квантовой проводимости —  $C \sim 0$ , т.е.  $n^2 \sim 2.7 Va^2 m/m_0$ . Тогда можно построить номограммы связи размера a и напряжения для проявлений первого n = 1 и второго

Физика и техника полупроводников, 2022, том 56, вып. 6

n = 2 резонансов (см. рис. 4). При этом для значений *а* слева от кривых условие конфайнмента выполняется, справа — нет. Наименьшие значения  $\Lambda/a \sim 2/n$ . В таблице представлены интервалы размера *a* — измеренные  $a_{\text{meas}}$  и найденные из рис. 4 для первого  $A_{n1}$  и второго  $A_{n2}$  резонансов.

полученных Для ИЗ BAX значений тока  $(10^{-8} - 10^{-7})$  A, с учетом его одноэлектронного характера, время пролета электрона  $q/I \sim (10^{-12} - 10^{-11})$  с. Рассчитанные же по формулам кинетической энергии и скорости значения времени пролета на ~2 порядка меньше. Это может означать, что электрон в QD "застревает", что, скорее всего, связано с его многократными отражениями от границ QD. В этом случае QD действует как квантовый осциллятор, и должны проявиться высокочастотные (терагерцовые) осцилляции тока. Теоретически этот вопрос рассмотрен в работе [7].

## 4. Заключение

Анализ процессов, управляющих образованием коллоидных квантовых точек полупроводников и их электронной проводимостью, позволил сделать несколько выводов и предположений.

В процессе коллоидного синтеза наночастиц рост нанокристалла определяется термодинамическими свойствами системы, когда его внутренняя объемная энергия растет, а поверхностная уменьшается вплоть до энергии сил Ван-дер-Ваальса, и рост самой квантовой точки прекращается, при этом на ее поверхности происходит неконтролируемая сорбция любых атомов, молекул поверхностно-активных и различных комплексов. Предельный размер нанокристалла совершенной структуры ограничен соотношением объемной и поверхностной энергий его образования и, оценочно, имеет значения от 6 нм для QD-InSb до 17 нм для QD-CdSe.

Одноэлектронный характер проводимости квантовой точки, как глубокой протяженной потенциальной ямы, позволяет применить простые решения квантовой задачи и вычислить основные электронные параметры нанокристалла. Его электронная проводимость при этом определяется размерными соотношениями и носит резонансный квантовый характер в условиях конфайнмента и равенства нулю характеристического параметра C. Рассчитанное время пролета электрона на  $\sim 2$  порядка меньше экспериментальных значений q/I, что может означать возможность терагерцовых осцилляций тока, т.е. действия QD как квантового осциллятора.

#### Финансирование работы

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 20-07-00307).

#### Благодарности

Авторы благодарны О.Ю. Цветковой за изготовление образцов квантовых точек.

# Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

# Список литературы

- С.Б. Бричкин, В.Ф. Разумов. Успехи химии, 85 (12), 1297 (2016).
- [2] А.Е. Жуков. Лазеры и микролазеры на основе квантовых точек (СПб., Политех-Пресс, 2019).
- [3] M. Alizadeh-Ghodsi, M. Pourhassan-Moghaddam, A. Zavari-Nematabad, B. Walker, N. Annabi, A. Akbarzadeh. Part. Syst. Charact, 36 (2), 1800302 (2019).
- [4] D. Porotnikov, M. Zamkov. J. Phys. Chem. C, 124 (40), 21895 (2020).
- [5] Н.Д. Жуков, И.Т. Ягудин, Н.П. Абаньшин, Д.С. Мосияш. Письма ЖТФ, 46 (21), 40 (2020).
- [6] М.В. Гавриков, Е.Г. Глуховской, Н.Д. Жуков. Матер. XII Междунар. науч.-техн. конф. "Микро- и нанотехнологии в электронике" (Нальчик, Россия, 2021) с. 327. http://mnte.kbsu.ru/files/book2021.pdf
- [7] В.П. Драгунов, И.Г. Неизвестный, В.А. Гридчин. Основы наноэлектроники (М., Логос, 2006).
- [8] Г.Ф. Глинский. Письма ЖТФ, 44 (6), 17 (2018).
- [9] F.A. Serrano, S.H. Dong. J. Quant. Chem., 113, 2282 (2013).
- [10] C. Gréboval, A. Chu, N. Goubet, C. Livache, S. Ithurria. Chem. Rev., 121, 3627 (2021).
- [11] Н.Д. Жуков, Т.Д. Смирнова, А.А. Хазанов, О.Ю. Цветкова, С.Н. Штыков. ФТП, 55 (12) 1203 (2021).
- [12] Н.Д. Жуков, С.А. Сергеев, А.А. Хазанов, И.Т. Ягудин. Письма ЖТФ, 47 (22), 37 (2021).
- [13] Д.В. Крыльский, Н.Д. Жуков. Письма ЖТФ, 46 (18), 15 (2020).
- [14] N.T.K. Thanh, N. Maclean, S. Mahiddine. Chem. Rev., 114, 7610 (2014).
- [15] A.I. Rusanov. Surf. Sci. Rep., 58, 111 (2005).
- [16] D. Kashchiev. J. Chem. Phys., 120 (8), 3749 (2004).
- [17] J. Wang, Ch.F. Mbah, T. Przybilla, B.A. Zubin, E. Spiecker, M. Engel, N. Vogel. Nature Commun., 9, 5259 (2018).
- [18] Z. Ou, Z. Wang, B. Luo, E. Luijten, Q. Chen. Nature Materials, 19, 450 (2020)
- [19] Y. Han. Nature Materials, 19, 377 (2020).
- [20] M. Kristl, M. Drofenik. Ultrason. Sonochem., 15, 695 (2008).
- [21] М.Н. Магомедов. ФТТ, 46 (5), 924 (2004).
- [22] Ю.С. Бараш. Силы Ван-дер-Ваальса (М., Наука, 1988).
- [23] Н.В. Сибирёв, М.А. Тимофеева, А.Д. Большаков, М.В. Назаренко, В.Г. Дубровский. ФТТ, **52**, 7, 1428 (2010).
- [24] Н.Д. Жуков, М.В. Гавриков, В.Ф. Кабанов, И.Т. Ягудин. ФТП, **55** (4), 319 (2021).
- [25] Н.Д. Жуков, М.В. Гавриков. Междунар. науч.-исслед. журн., 8 (110), 19 (2021).
- [26] Р.А. Сурис, И.А. Дмитриев. УФН, 173 (7), 769 (2003).
- [27] Н.Т. Баграев, А.Д. Буравлев, Л.Е. Клячкин, А.М. Маляренко, В. Гельхофф, В.К. Иванов, И.А. Шелых. ФТП, 36 (4), 462 (2002).

- [28] Н.Д. Жуков, О.Ю. Цветкова, М.В. Гавриков, А.Г. Роках, Т.Д. Смирнова, С.Н. Штыков. ФТП, 56 (4), 401 (2022).
- [29] С.А. Сергеев, М.В. Гавриков, Н.Д. Жуков. Письма ЖТФ 48 (9), 32 (2022).

Редактор А.Н. Смирнов

# Dimensional modeling of synthesis and conductivity of colloidal quantum dots

N.D. Zhukov<sup>1</sup>, M.V. Gavrikov<sup>1,2</sup>, S.N. Shtykov<sup>2</sup>

 <sup>1</sup> Group of small innovative enterprises NPP Volga, 410033 Saratov, Russia
<sup>2</sup> Saratov State University, 410012 Saratov, Russia

**Abstract** On the example of previously synthesized colloidal quantum dots (QD) of some semiconductors (CdSe, PbS, HgSe, InSb), the limiting sizes of nanocrystals with perfect structure during their synthesis were determined depending on the ratio of their volume and surface energies, which can vary from 6 nm for QD-InSb to 17 nm for QD-CdSe. The conductivity of single quantum dots in the interelectrode nanogap is one-electron, and their current-voltage characteristic has regions of electron tunneling through potential barriers, Coulomb current limitation, and resonant peaks of quantum conductivity. Dimensional relations are determined and nomograms of the relationship of dimensional parameters are constructed to ensure the conditions for quantum conductivity. The assumption about terahertz current oscillations is substantiated.