

# प्रकाशीय अनुप्रयोगों के लिए क्वांटम डॉट्स के गुणों का विश्लेषण

## Analyzing the Properties of Quantum Dots for Optical Applications

अमित कुमार

Amit Kumar

Department of Electronics, Bhaskaracharya College of Applied Sciences,  
University of Delhi, South West Delhi, 110075, India

[amit.kumar@bcas.du.ac.in](mailto:amit.kumar@bcas.du.ac.in)

### सारांश

क्वांटम डॉट्स पर आधारित युक्तियों के कई तुलनात्मक फायदे हैं, जिनमें उनके सघन आकार और प्रकाश-गति के लगभग संचालन शामिल हैं। इलेक्ट्रॉनिक क्वांटम परिरोध, क्वांटम डॉट्स के लिए सामंजस्य करने योग्य मापदंडों को तय करता है, जो सभी उभरते क्षेत्रों में नए अनुप्रयोगों के लिए इंजीनियरों को आकर्षित कर रहा है। इस क्षेत्र में सतत अनुकरण एक महत्वपूर्ण स्थान रखते हैं क्योंकि प्रयोग करने से पहले वैज्ञानिकों के लिए अध्ययन करना सरल होता है। इस कार्य में, हमने ZnS क्वांटम डॉट्स के विभिन्न प्रकाशीय गुणों का अनुकरण और जांच की है, जिसमें अवशोषण वर्णक्रम, प्रकाश के ध्रुवीकरण के कारण होने वाले परिवर्तन और उनके संबंधित इंट्राबैंड स्थानान्तरण प्रचंडता शामिल हैं। यह अनुकरण, क्वांटम डॉट लैब, नैनो हब का उपयोग करके किए गए हैं। यह विवरण अर्धचालक क्वांटम डॉट्स के लिए उपयुक्त प्रकाशीय अनुप्रयोगों को खोजने में सहायक होंगे।

### Abstract

Quantum dot devices have many comparative advantages, including their compact size and close-to-light-speed operation. The electronic quantum confinement draws the tunable parameters for quantum dots that attract engineers for new applications across all emerging fields. The simulation studies in this field find an important place as it is easy for scientists to study, prior to experimentation. In this work, we have simulated and examined various optical properties of ZnS quantum dots, including absorption spectra, changes caused by polarization of light, and their respective intraband transition strengths. These simulations have been carried out using the Quantum Dot Lab, Nano hub. The results drawn here will be helpful in finding the appropriate optical applications for semiconductor quantum dots.

विषय बोधक शब्द – अर्धचालक क्वांटम डॉट, अवशोषण वर्णक्रम, क्वांटम डॉट लैब, सतत अनुकरण

Keywords – Semiconductor quantum dots, absorption spectrum, Quantum dot lab, simulations

### संक्षिप्त परिचय

क्वांटम डॉट्स की खोज ने अर्धचालक उद्योग (semiconductor industry) को एक नया आयाम दिया है। पारंपरिक अर्धचालक युक्तियों की तुलना में क्वांटम डॉट युक्तियों के लाभ बहुत अधिक हैं। इनके द्वारा प्रदर्शित दिलचस्प विशेषताओं के कारण, क्वांटम डॉट्स को उद्योगों में कई अनुप्रयोग मिलते हैं। वे बेहतर अपवाहन (transport) और प्रकाशीय (optical) गुणों का प्रदर्शन करते हैं, जिनका उपयोग कई दिलचस्प उपकरणों की रचना करने के लिए किया जा सकता है। क्वांटम डॉट्स के कई अनुप्रयोगों में एलईडी (LED),

लेजर (LASER), फोटोडिटेक्टर (photodetector), जैविक संवेदक (biological sensors), क्वांटम कंप्यूटिंग (biological sensors), क्वांटम सूचना प्रसंस्करण (information processing), और फ्लोरोसेंस वर्णक्रम के साथ चिकित्सा निदान (medical diagnosis) शामिल हैं (1-4)। क्वांटम डॉट्स के सबसे महत्वपूर्ण अनुप्रयोगों को उनके ऑप्टिकल गुणों जैसे अवशोषण (absorption) और विलुप्त (extinction) होने वाले वर्णक्रम का अनुकरण और अध्ययन करके तैयार किया जा सकता है। तरंग दैर्घ्य पांति (wavelength range) पर विचार करके जिसमें एक निश्चित अवशोषण या विलुप्त होने की चोटी (peak) होती है, नैनो प्रौद्योगिकी उपकरणों की रूपरेखा को विभिन्न प्रकार के अनुप्रयोगों के साथ ढांचागत (design) किया जा सकता है। यह लेख्य-पत्र, प्रकाश के ध्रुवीकरण, फर्मी-स्तर, ज्यामिति, अक्ष के साथ क्वांटम डॉट के उन्मुखीकरण, और अर्धचालक क्वांटम डॉट्स के अवशोषण स्पेक्ट्रा पर आकार जैसे मापदंडों की एक विस्तृत सरणी की भिन्नता के प्रभाव को प्रस्तुत करता है।

हाल के दिनों में ZnS नैनोकणों के पर्यावरण के अनुकूल संश्लेषण के कारण, कई शोधकर्ताओं को उपयुक्त अनुप्रयोगों की खोज के लिए आकर्षित किया है। संक्रमण धातु (Ni, Ag, Cd, Co, Cu, और Mn) का उपयोग वायु वातावरण में रासायनिक वर्षण विधि का उपयोग करके ZnS की डोपिंग के लिए किया जा सकता है (5)। कम लागत, आसान, हरित संश्लेषण विधि ZnS नैनोकणों/क्वांटम डॉट्स को अन्य दावेदारों के बीच अधिक उपयोगी बनाती है (6)। जैव संगत ZnS नैनो-बायोमेडिसिन और भौतिक विज्ञान के क्षेत्र में एक बढ़ता हुआ शोध विषय है। हाल के दिनों में किए गए अधिकांश समान अध्ययन ZnS के गोलाकार क्वांटम डॉट्स की प्रयोगात्मक खोज पर केंद्रित हैं (7, 8)। वर्तमान अध्ययन में ZnS नैनोकणों के आकार और आकृति भिन्नता पर चर्चा की गई है। परिणामों से पता चलता है कि विशेष अनुप्रयोग के लिए क्वांटम डॉट्स की प्रयोज्यता तय करने में आकार भिन्नता एक महत्वपूर्ण भूमिका निभाती है। वर्तमान अध्ययन विभिन्न आकार के क्वांटम डॉट्स बनाने के लिए तंत्र विकसित करने के लिए प्रयोगकर्ता को प्रेरणा देता है।

### सतत अनुकरण साधन (Simulation tool)

इस पत्र में, हम क्वांटम डॉट लैब, नैनोहब (Quantum dot lab, Nanohub) (9) का उपयोग करके अर्धचालक नैनोकणों का अनुकरण (simulations) प्रस्तुत कर रहे हैं। क्वांटम डॉट लैब विभिन्न प्रकार की ज्यामिति जैसे पेटी (box), सिलेंडर, गुंबद, पिरामिड, और शंकु के लिए एक पेटी समस्या में कण का अनुकरण करती है। सरल क्वांटम डॉट सिमुलेशन के लिए, यह सिंगल-बैंड प्रभावी द्रव्यमान प्रतिरूपण (single-band effective mass modelling) का उपयोग करता है। प्रभावी द्रव्यमान (effective mass), एक उचित प्राचल (parameter) है, क्योंकि यह श्रोडिंगर समीकरण (Schrödinger equation) में एकमात्र प्राचल है जो विभिन्न सामग्रियों (materials) के लिए भिन्न हो सकता है। वास्तविक दुनिया के नमूनों में हमेशा आदर्श (गोलाकार) आकृतियों से कुछ विचलन होता है और यहीं से नैनोहब सॉफ्टवेयर महत्वपूर्ण हो जाता है। श्रोडिंगर समीकरण पर आधारित 3-डी तरंग फलन (wavefunction) को विभिन्न आकार के क्वांटम डॉट्स के लिए देखा जा सकता है। हम अंधेरे (dark) और विविक्तता रेखाओं (sharp lines) के रूप में कई ऑप्टिकल इंटरबैंड अवस्थांतर की गणना और कल्पना कर सकते हैं। यह अवस्थांतर ऊर्जा के विशिष्ट मूल्यों पर अवस्थांतर शक्ति को दर्शाता है। हम समदैशिक प्रकाशीय गुणों (isotropic optical properties) पर 3-डी ज्यामिति के प्रभाव का विश्लेषण करने के लिए आपतित प्रकाश (incident ray) के ध्रुवीकरण (polarization) जैसे मापदंडों को निर्धारित कर सकते हैं, फर्मी स्तर और तापमान को विविध किया जा सकता है। नैनोहब सॉफ्टवेयर का फर्मी

स्तर दो बैंड मॉडल में फर्मी स्तर से अलग है। नैनोहब एकल बैंड मॉडल का उपयोग करता है, इसलिए फर्मी स्तर निम्नतम अवस्था के अधिभोग के अनुसार तय किया जाता है।

### संगणकीय विवरण (Computational details)

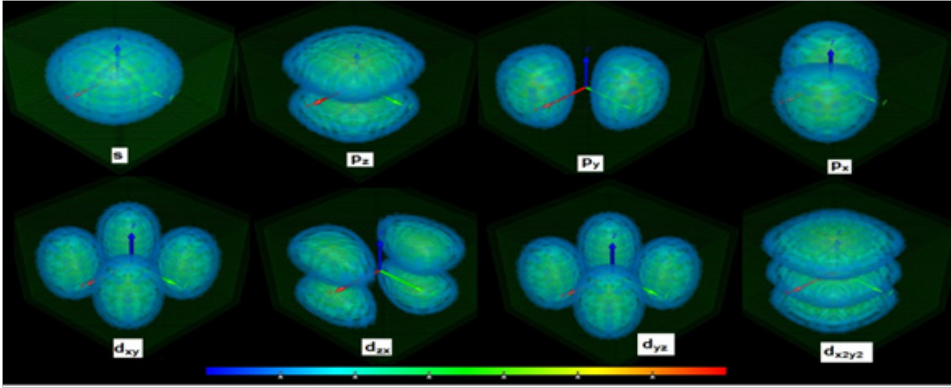
क्वांटम डॉट्स उत्कृष्ट एकल-प्रकाशाणु (single-photon) स्रोत और एकल-चक्रण (single-spin) के लिए उपयुक्त मेज़बान हैं। यह प्रकाशाणु समूह के निर्माण को सक्षम बनाता है और क्वांटम संचार और क्वांटम कंप्यूटिंग में संसाधन के रूप में कार्य करता है (10)। हाल ही में, ZnS आधारित नीलवर्ण प्रकाश उत्सर्जक क्वांटम डॉट एलईडी (QLED) को अच्छी क्वांटम यील्ड के साथ संश्लेषित किया गया है (11)। विषैले तत्वों की अनुपस्थिति और ऑप्टोइलेक्ट्रॉनिक्स में उनके व्यावहारिक अनुप्रयोग के कारण, ZnS क्वांटम डॉट्स बहुत ध्यान आकर्षित कर रहे हैं (12)। पिछले कुछ वर्षों के दौरान, ZnS क्वांटम डॉट्स का अध्ययन फोटोनिक्स, फील्ड-इफेक्ट ट्रांजिस्टर (FET), और औद्योगिक प्रदूषकों को हटाने के लिए कुशल नैनो-प्रकाशीय-उत्प्रेरक (nano-photonic-catalyst) के रूप में उनके प्रयोग के लिए भी किया गया है (13-14)। वर्तमान कार्य में ऊर्जा अवस्थाओं और ZnS क्वांटम डॉट के आकार-निर्भर ऑप्टिकल गुणों के संबंध में कुछ 3D संरचनाओं का अनुकरण अध्ययन किया गया है। ZnS क्वांटम डॉट के इन गुणों को उच्च प्रदर्शन ऑप्टोइलेक्ट्रॉनिक अनुप्रयोगों और कंप्यूटिंग वास्तुकला में प्रभावी ढंग से उपयोग किया जा सकता है। श्रोडिंगर समीकरण को विश्लेषणात्मक विधि द्वारा, गोलाकार नैनोकणों के लिए आसानी से हल किया जा सकता है, लेकिन मनमाने आकार के लिए, यह बेहद मुश्किल है। इस कार्य में, गोलाकार नैनोकणों के ऑप्टिकल गुणों को 5% विचलन के साथ अनुकरण किया गया है। इसलिए, 10nm के व्यास वाले एक आदर्श नैनोकण के लिए, X, Y, और Z अक्षों के साथ लंबाई को क्रमशः 9.5nm, 10nm और 10.5nm के रूप में लिया गया है। ZnS क्वांटम डॉट के विभिन्न विश्लेषणों को करने के लिए, सॉफ्टवेयर 'क्वांटम डॉट लैब' को हमारे काम में सफलतापूर्वक नियोजित किया गया है जिसमें श्रोडिंगर समीकरण का समाधान प्राप्त किया गया है। इस साधन का उपयोग करके, विभिन्न पैरामीटर जैसे आकार, ज्यामिति, ऊर्जा-अवस्था की संख्या, जाली स्थिरांक (lattice constant), प्रभावी द्रव्यमान (effective mass) और बैंड अंतराल (energy bandgap) अनुरूप किया गया है जिस पर क्वांटम डॉट्स की परिरोधक ऊर्जा (confinement energy) निर्भर करती है। यह साधन (क्वांटम डॉट लैब, नैनोहब) 3D तरंग कार्यों, ऊर्जा अवस्थाओं, ध्रुवीकृत प्रकाश के आधार पर इलेक्ट्रॉनिक-स्थानान्तर, और अवशोषण के साथ-साथ क्वांटम डॉट्स के एकीकृत अवशोषण को खोजने के लिए उपयोगी है। ZnS क्वांटम डॉट्स के लिए वर्तमान अनुकरण के दौरान उपयोग किए जाने वाले विभिन्न मापदंडों को नीचे तालिका (1) में संक्षेपित किया गया है।

### परिणाम और व्यख्या

इस कार्य में, पहले आठ ऊर्जा-अवस्था के लिए,  $9.5 \times 10 \times 10.5$  (nm)<sup>3</sup> ZnS क्वांटम डॉट के लिए सतत अनुकरण किए गए हैं, और ध्रुवीकरण, फर्मी स्तर और ज्यामिति पर अवशोषण स्पेक्ट्रम की निर्भरता का अध्ययन किया गया है। विभिन्न तरंग फलन की कक्षीय आकृतियों को चित्र 1 में दिखाया गया है।

तालिका (1): ZnS क्वांटम डॉट सिमुलेशन के दौरान उपयोग किए जाने वाले विभिन्न पैरामीटर

| संरचनात्मक प्राचल<br>(Structural Parameters) |                 | प्रकाशित प्राचल<br>(Optical Parameters) |                                       | परिवर्तनीय प्राचल<br>(Sweeping parameter) |        |
|--|-----------------|---|---------------------------------------|---|--------|
| आकार (X, Y, Z) (nm)                          | (9.5, 10, 10.5) | प्रकाश ध्रुवीकरण                        | $\theta=45^\circ$ ,<br>$\phi=0^\circ$ | भौतिक मात्रा                              | तापमान |
| ऊर्जा-अवस्था की संख्या                       | 8               | पूर्ण (Absolute) फर्मी स्तर             | no                                    | न्यूनतम                                   | 1K     |
| जाली स्थिरांक (nm)                           | 0.541           | इलेक्ट्रान फर्मी स्तर                   | 0eV                                   | अधिकतम                                    | 400K   |
| प्रभावी द्रव्यमान                            | 0.34me          | तापमान                                  | 300K                                  | बिंदुओं की संख्या                         | 2      |
| ऊर्जा बैंडगैप                                | 3.68eV          | ऊर्जा-अवस्था विस्तार                    | 0.01eV                                |   |        |



चित्र 1. ZnS क्वांटम डॉट्स में पहले आठ तरंग फलन के लिए 3D प्लॉट।

जैसे-जैसे हम नीले से लाल रंग में जाते हैं, इलेक्ट्रॉन के मिलने की प्रायिकता बढ़ती जाती है।

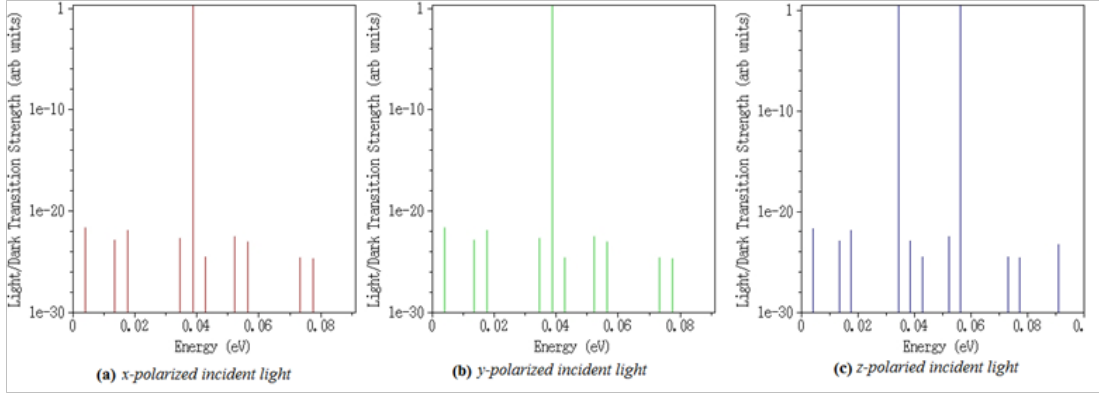
s- ऊर्जा स्तर E1 के लिए आकार में लगभग गोलाकार है। अगले तीन स्तर एक ही ज्यामिति गुंगा घंटी (dumb-bell), आकार के हैं लेकिन Z, Y और X अक्षों के साथ उनके अभिविन्यास भिन्न हैं। pz, py, और px आकार ऊर्जा स्तर E2, E3 और E4 के अनुरूप हैं।  $d_{xy}$ ,  $d_{zx}$ ,  $d_{yz}$ , और  $d_{x^2-y^2}$  आकार ऊर्जा स्तर E5, E6, E7 और E8 के अनुरूप हैं। कक्षाओं का स्थानिक अभिविन्यास एक प्रमुख भूमिका निभाता है, जिससे वे तय करते हैं कि कौन से प्रकाशीय स्थानांतरण होंगे। इन आठ ऊर्जा स्तरों के लिए विभिन्न प्रकाशीय-स्थानांतरण ऊर्जाओं की गणना तालिका (2) में की गई है। यह देखा जा सकता है कि मध्यवर्ती प्रकाशीय-स्थानांतरण ऊर्जा, अंतर-कक्षीय प्रकाशीय-स्थानांतरण ऊर्जा से कम क्रम है।

क्वांटम डॉट्स पर, विभिन्न ध्रुवीकरण और प्रचंडता के साथ, प्रकाश प्रसंगित किया जा सकता है। चित्र 2 (a), x-ध्रुवीकृत प्रकाश के लिए विभिन्न प्रकाशीय-स्थानांतरण ऊर्जाओं के अनुरूप शक्ति को लघुगणकीय पैमाने पर दर्शाता है। यह देखा जा सकता है कि s और px ऑर्बिटल्स के बीच प्रकाशीय-

स्थानांतरण (0.0388eV) शक्ति अन्य स्तरों के बीच संक्रमण की तुलना में काफी अधिक है। हालांकि अवशोषण अन्य कक्षकों के भीतर भी होता है, लेकिन यह  $s \rightarrow px$  स्थानांतरण की तुलना में काफी कमजोर है। x-ध्रुवीकृत प्रकाश में  $s \rightarrow px$  स्थानांतरण की अनुमति है, जबकि अन्य को x-ध्रुवीकृत प्रकाश में निषिद्ध कहा जाता है।  $s \rightarrow px$  के लिए स्थानांतरण एक दीप्त-स्थानांतरण (light transition) है, जबकि अन्य के लिए, स्थानांतरण अदीप्त (dark transition) है। इसी तरह, Y-दिशा में ध्रुवीकृत प्रकाश के लिए, शिखर अवशोषण s से py में स्थानांतरण के लिए होता है जैसा कि चित्र 2(b) में दिखाया गया है, (ध्यान दें, कि दोनों दीप्त-स्थानांतरण 0.0388eV पर होते हैं)। Z-ध्रुवीकृत प्रकाश के लिए, अवशोषण शिखर दो मानों पर होता है, एक 0.0345eV पर  $px \rightarrow d_{xy}$ ,  $px \rightarrow d_{zx}$  स्थानांतरण के लिए और दूसरा  $py \rightarrow d_{x^2y^2}$  स्थानांतरण के लिए, 0.0523eV पर, जैसा कि चित्र 2(c) में दिखाया गया है।

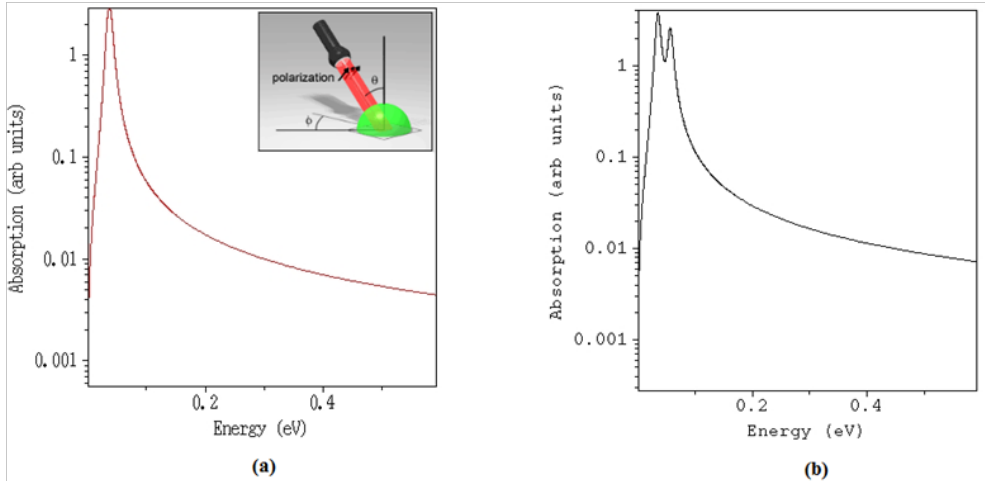
तालिका 2. विभिन्न कक्षकों के बीच प्रकाशीय-स्थानांतरण ऊर्जाओं की गणना (eV)

|   | s<br>E1<br>3.7177 | P <sub>z</sub><br>E2<br>3.7523 | P <sub>y</sub><br>E3<br>3.7565              | P <sub>x</sub><br>E4<br>3.7565              | d <sub>xy</sub><br>E5<br>3.791               | d <sub>zx</sub><br>E6<br>3.791               | d <sub>yz</sub><br>E7<br>3.7952               | d <sub>x<sup>2</sup>y<sup>2</sup></sub><br>E8<br>3.8088               |
|---|-------------------|--------------------------------|---|---|--|--|---|---|
| s<br>E1<br>3.7177                                       |                   | 0.0346<br>(s→p <sub>z</sub> )  | 0.0388<br>(s→p <sub>y</sub> )               | 0.0388<br>(sp <sub>x</sub> )                | 0.0733<br>(sd <sub>xy</sub> )                | 0.0733<br>(s→d <sub>zx</sub> )               | 0.0775<br>(s→d <sub>yz</sub> )                | 0.0911<br>(s→d <sub>x<sup>2</sup>y<sup>2</sup></sub> )                |
| P <sub>z</sub><br>E2<br>3.7523                          |                   |                                | 0.0042<br>(p <sub>z</sub> →p <sub>y</sub> ) | 0.0042<br>(p <sub>z</sub> →p <sub>x</sub> ) | 0.0387<br>(p <sub>z</sub> →d <sub>xy</sub> ) | 0.0387<br>(p <sub>z</sub> d <sub>zx</sub> )  | 0.0429<br>(p <sub>z</sub> →d <sub>yz</sub> )  | 0.0565<br>(p <sub>z</sub> →d <sub>x<sup>2</sup>y<sup>2</sup></sub> )  |
| P <sub>y</sub><br>E3<br>3.7565                          |                   |                                |   | 0<br>(p <sub>y</sub> →p <sub>x</sub> )      | 0.0345<br>(p <sub>y</sub> d <sub>xy</sub> )  | 0.0345<br>(p <sub>y</sub> →d <sub>zx</sub> ) | 0.0387<br>(p <sub>y</sub> →d <sub>yz</sub> )  | 0.0523<br>(p <sub>y</sub> →d <sub>x<sup>2</sup>y<sup>2</sup></sub> )  |
| P <sub>x</sub><br>E4<br>3.7565                          |                   |                                |   |   | 0.0345<br>(p <sub>x</sub> →d <sub>xy</sub> ) | 0.0345<br>(p <sub>x</sub> →d <sub>zx</sub> ) | 0.0387<br>(p <sub>x</sub> →d <sub>yz</sub> )  | 0.0523<br>(p <sub>x</sub> →d <sub>x<sup>2</sup>y<sup>2</sup></sub> )  |
| d <sub>xy</sub><br>E5<br>3.791                          |                   |                                |   |   |  | 0<br>(d <sub>xy</sub> →d <sub>zx</sub> )     | 0.0042<br>(d <sub>xy</sub> →d <sub>yz</sub> ) | 0.0178<br>(d <sub>xy</sub> →d <sub>x<sup>2</sup>y<sup>2</sup></sub> ) |
| d <sub>zx</sub><br>E6<br>3.791                          |                   |                                |   |   |  |  | 0.0042<br>(d <sub>zx</sub> →d <sub>yz</sub> ) | 0.0178<br>(d <sub>zx</sub> →d <sub>x<sup>2</sup>y<sup>2</sup></sub> ) |
| d <sub>yz</sub><br>E7<br>3.7952                         |                   |                                |   |   |  |  |   | 0.0136<br>(d <sub>yz</sub> →d <sub>x<sup>2</sup>y<sup>2</sup></sub> ) |
| d <sub>x<sup>2</sup>y<sup>2</sup></sub><br>E8<br>3.8088 |                   |                                |   |   |  |  |   |   |



चित्र 2. x, y, और z-ध्रुवीकृत प्रकाश के लिए अवशोषण शक्ति

क्वांटम डॉट्स के ऑप्टिकल गुणों पर प्रकाश के ध्रुवीकरण के प्रभाव का अध्ययन करने के लिए, दो कोणीय मापदंड हैं, जो चर्चा के विषय हैं। प्रकाश स्रोत क्वांटम डॉट के ऊर्ध्वाधर अक्ष (जेड-अक्ष) के संबंध में एक निश्चित कोण बनाता है, यह प्रकाश स्रोत का आपतन कोण ( $\theta$ ) है। मान  $\theta = 0^\circ$ , क्वांटम डॉट पर सीधे नीचे की ओर चमकने तथा मान  $\theta = 90^\circ$ , X-Y तल के समांतर प्रकाश की चमक को दर्शाता है। क्वांटम डॉट के चारों ओर प्रकाश स्रोत का कोण  $\phi$  है।

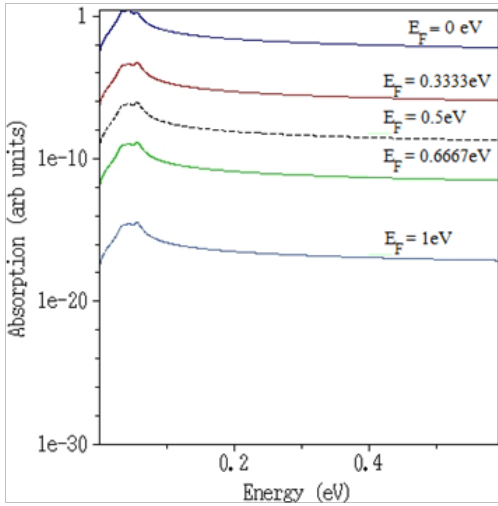


चित्र 3. ZnS क्वांटम डॉट पर Z-ध्रुवीकृत प्रकाश के साथ अवशोषण स्पेक्ट्रम. (a)  $\theta = 90^\circ$  (b)  $\theta = 0^\circ$

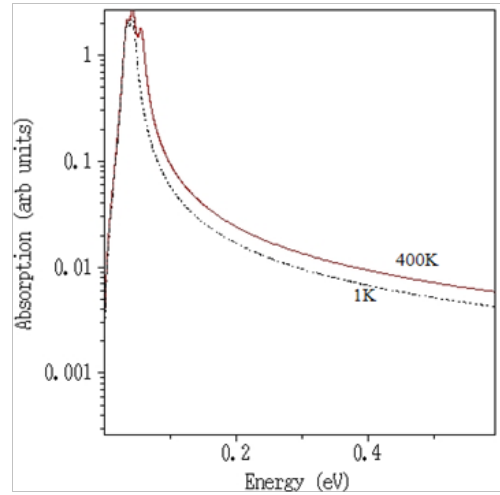
चित्र 3 (a) एक ZnS क्वांटम डॉट के लिए अवशोषण स्पेक्ट्रा दिखाता है, जब उस पर Z-ध्रुवीकृत प्रकाश आपतित होता है। चूँकि क्वांटम डॉट पर चमकने वाला प्रकाश Z ध्रुवीकृत है,  $\theta = 90^\circ$ , और  $\phi = 0^\circ$ । इस मामले के लिए अवशोषण शिखर s से pz कक्षीय में इलेक्ट्रॉनिक स्थानांतरण ( $s \rightarrow pz$ ) के कारण आता है। यदि  $\theta$  को  $90^\circ$  से  $0^\circ$  से भिन्न किया जाता है, और क्वांटम डॉट के चारों ओर के कोण को  $\phi = 45^\circ$  से स्थानांतरित कर दिया जाता है, तो एक से अधिक अवशोषण शिखर देखे जाते हैं। ऐसा इसलिए होता है क्योंकि अब आपतित प्रकाश में, Z-अक्ष के साथ-साथ, X- और Y अक्षों ध्रुवीकरण घटक भी होगा। तो अब,

( $s \rightarrow pz$ ) पर अवशोषण शिखर के अलावा, ( $s \rightarrow py$ ) और ( $s \rightarrow px$ ) पर भी अवशोषण शिखर होगा, जैसा कि चित्र 3(b) में दिखाया गया है।

सिम्युलेटर-क्वांटम डॉट लैब, शून्य स्तर (ground state) के सापेक्ष फर्मी स्तर (Fermi level) मूल्यों का वर्णन करके, सिंगल बैंड फर्मी स्तर की अनूठी अवधारणा को निर्देशित करता है। तो, 0eV का एक फर्मी-स्तर शून्य स्तर अवस्था के साथ 3.7177eV पर एक ZnS क्वांटम डॉट के लिए मेल खाता है, जिसमें 9.5nm, 10nm, और 10.5nm के आयाम X, Y और Z के साथ होते हैं। 0eV से 2eV तक भिन्न फर्मी-स्तरों के साथ अवशोषण स्पेक्ट्रा में परिवर्तन चित्र 4 में आलेखित (plot) किए गए हैं। यह देखा जा सकता है कि बढ़ते फर्मी-स्तर के साथ, अवशोषण शक्ति कम हो जाती है। अवशोषण शून्य-अवस्था के अधिभोग (occupancy) और उत्तेजित अवस्था में उपलब्ध रिक्ति (vacancy) दोनों पर निर्भर करता है। यदि शून्य स्तर का अधिभोग और उत्तेजित स्तर में रिक्ति अधिक है, और पूरी तरह से व्याप्त शून्य स्तर और पूरी तरह से खाली उत्तेजित अवस्था के लिए सबसे मजबूत है, तो अवशोषण मजबूत होता है। 1eV पर स्थित EF के लिए, उत्तेजित स्तर आंशिक रूप से व्याप्त है, इसलिए इलेक्ट्रॉनों के कब्जे के लिए उत्तेजित अवस्था में कई रिक्तियां उपलब्ध नहीं हैं। जैसे-जैसे फर्मी का स्तर और बढ़ता है, उत्तेजित अवस्था में रिक्ति कम होती जाती है, इसलिए फर्मी-स्तर बढ़ने के साथ अवशोषण गुणांक कम होता जाता है। जब  $EF=2eV$  प्रकाश का लगभग कोई अवशोषण नहीं होता है, और क्वांटम बिंदु लगभग पारदर्शी हो जाता है।



चित्र 4. फर्मी-स्तर पर अवशोषण स्पेक्ट्रा की निर्भरता



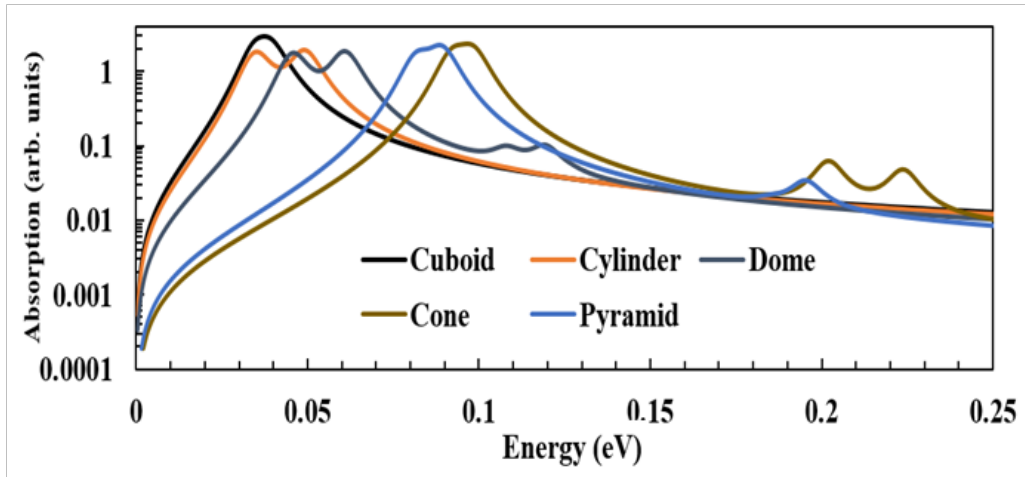
चित्र 5. तापमान पर अवशोषण स्पेक्ट्रा की निर्भरता

चित्र 5 क्वांटम डॉट्स के अवशोषण स्पेक्ट्रम के लिए विशिष्ट तापमान निर्भरता को दर्शाता है। कम तापमान ( $T = 1K$ ) पर जब इलेक्ट्रॉन शून्य स्तर पर होते हैं, तो केवल पहला शिखर बैंडगैप ऊर्जा (जैसे  $= 0.04eV$ , ( $s \rightarrow pz$ )) के बराबर दिखाई देता है। जैसे-जैसे तापमान बढ़ता गया ( $T=400K$ ),  $0.06eV$  पर एक और चोटी दिखाई दी, लेकिन इसकी शक्ति कम है। आम तौर पर, कम तापमान ( $<30 K$ ) पर बैंडगैप की तुलना में उच्च ऊर्जा के फोटॉन को अवशोषित करते समय अर्धचालक पदार्थों में ऐसी चोटियों को देखा जाता है (13)। क्वांटम डॉट्स में, हालांकि, कमरे के तापमान पर भी ऐसी चोटियों का पता लगाया जा सकता

है। यह विपरीतता, कमरे के तापमान पर भी आवेश वाहकों के क्वांटम परिरोध (quantum confinement) के कारण से है। यह इलेक्ट्रॉन-होल जोड़ी (एक्सिटॉन के रूप में जाना जाता है) को कूलम्बिक बल द्वारा एक साथ बाध्य करने, और मुक्त स्थान में परमाणुओं समरूप कार्य करने का कारण बनता है। किसी नमूने के अवशोषण स्पेक्ट्रम में इन उत्तेजक चोटियों की उपस्थिति को क्वांटम परिरोध की पुष्टि के रूप में माना जा सकता है। ऊर्जा के स्तर क्वांटम डॉट्स के ज्यामिति आकृतियों पर भी निर्भर करते हैं। ZnS क्वांटम डॉट्स की ऊंचाई की अवशोषण चोटियों की ज्यामिति निर्भरता की तुलना, तालिका (3) में सूचीबद्ध की गई है। इन मामलों के लिए सिमुलेटेड अवशोषण स्पेक्ट्रम चित्र 6 में दिखाया गया है। इन परिणामों से पता चलता है कि गुंबद के आकार के क्वांटम डॉट में मध्यम अवशोषण होता है जबकि घनाभ और शंकु आकार क्रमशः अधिकतम और न्यूनतम अवशोषण प्रदर्शित करते हैं।

तालिका 3. ZnS क्वांटम डॉट्स के विभिन्न ज्यामिति के अवशोषण शिखरों की ऊंचाई (eV)

| Shape    | (ज्यामिति) | पहला शिखर | दूसरा शिखर | तीसरा शिखर | चौथा शिखर |
|----------|------------|-----------|------------|------------|-----------|
| Cuboid   | (घनाभ)     | 0.0373340 |            |            |           |
| Cylinder | (सिलेंडर)  | 0.0350822 | 0.0489216  |            |           |
| Dome     | (गुंबद)    | 0.0460800 | 0.0608918  | 0.1079780  | 0.1191090 |
| Cone     | (शंकु)     | 0.0965763 | 0.2020010  | 0.2241830  |           |
| Pyramid  | (पिरामिड)  | 0.0884947 | 0.1950200  |            |           |



चित्र 6. विभिन्न आकृतियों के ZnS क्वांटम डॉट्स पर प्रकाश का अवशोषण  
( $9.5 \times 10 \times 10.5$  (nm)<sup>3</sup>,  $\phi = 45^\circ$ ,  $\theta = 0^\circ$ ,  $T = 300\text{K}$ )

चूँकि सभी आकृतियों के लिए, अवशोषण शिखरों के मान भिन्न होते हैं, हम यह निष्कर्ष निकाल सकते हैं कि विभिन्न आकृतियाँ अलग-अलग तरीकों से प्रकाश को अवशोषित करती हैं। इस प्रकार, ZnS क्वांटम डॉट्स के ऑप्टिकल गुण उनकी ज्यामिति से काफी प्रभावित होते हैं। क्वांटम डॉट्स का सतह क्षेत्र अवशोषण चोटियों की तीव्रता को प्रभावित करता है, सतह क्षेत्र जितना अधिक होगा अवशोषण भी उतना अधिक होगा।



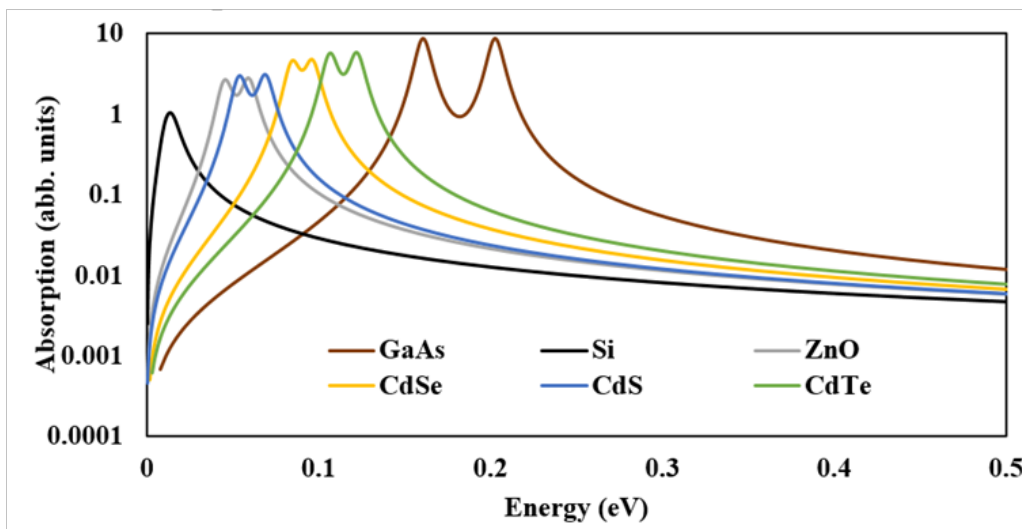
सिमुलेशन यह भी दिखाते हैं कि चोटियों की ऊंचाई में थोड़ा बदलाव होता है, जब तापमान 300K से घटाकर 1K कर दिया जाता है।

तालिका 4, अलग-अलग आकार के ZnS घनाभ क्वांटम डॉट्स के लिए विभिन्न ऊर्जा स्तरों को दर्शाती है। यह देखा जा सकता है कि जैसे-जैसे क्वांटम डॉट का आकार घटता जाता है, संबंधित ऊर्जा स्तर परिमाण में उल्लेखनीय वृद्धि दिखाते हैं, इस प्रभाव को ब्लू-शिफ्ट प्रभाव के रूप में जाना जाता है।

चित्र 7 GaAs, Si, ZnO, CdSe, CdS, और CdTe से बने विभिन्न क्वांटम डॉट्स के अवशोषण स्पेक्ट्रा को दर्शाता है, जिनमें से प्रत्येक का व्यास 10 nm है और 5% विचलन है। यह कथानक से देखा जा सकता है कि विभिन्न सामग्रियों के क्वांटम डॉट्स के लिए अवशोषण शिखर बहुत व्यापक अनुकूलता दिखाते हैं।

तालिका 4. घनाभ क्वांटम डॉट के विभिन्न आकारों के लिए ऊर्जा स्तर (eV)

| Sides (nm) | E1     | E2     | E3     | E4     | E5     | E6     | E7     | E8     |
|------------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| 5          | 3.8550 | 4.0211 | 4.0211 | 4.0211 | 4.1872 | 4.1872 | 4.1872 | 4.2698 |
| 10         | 3.7192 | 3.7579 | 3.7559 | 3.7579 | 3.7579 | 3.7966 | 3.7966 | 3.8209 |
| 15         | 3.6955 | 3.7110 | 3.7110 | 3.7110 | 3.7265 | 3.7265 | 3.7265 | 3.7366 |
| 20         | 3.6888 | 3.6975 | 3.6975 | 3.6975 | 3.7062 | 3.7062 | 3.7062 | 3.7120 |



चित्र 7. GaAs, Si, ZnO, CdSe, CdS, और CdTe के अवशोषण स्पेक्ट्रा की तुलना

### निष्कर्ष

प्रस्तुत शोध कार्य में प्रकाश के ध्रुवीकरण, फर्मी स्तर, ज्यामिति, अक्ष के साथ क्वांटम डॉट्स के उन्मुखीकरण (orientations), और अवशोषण स्पेक्ट्रा पर आकार, आकृति, पदार्थ, इत्यादि, जैसे मापदंडों की

एक विस्तृत श्रृंखला के प्रभावों की अनुकरण किया गया है। जब एक दिशा में ध्रुवीकृत प्रकाश क्वांटम डॉट पर होता है, तो केवल एक अवशोषण शिखर देखा जाता है, लेकिन जब क्वांटम डॉट पर यादृच्छिक ध्रुवीकरण का प्रकाश होता है, तो दो से तीन अवशोषण शिखर देखे जाते हैं। यह पाया गया है कि फर्मी-स्तर बढ़ने के साथ क्वांटम डॉट्स की अवशोषण शक्ति कम हो जाती है। क्वांटम डॉट की ज्यामिति इसके ऑप्टिकल गुणों को बहुत प्रभावित करती है, उदाहरण के लिए घनाभ और शंकु आकार क्रमशः अधिकतम और न्यूनतम अवशोषण प्रदर्शित करते हैं। यह क्वांटम डॉट्स के आकार से भी प्रभावित होता है, जैसे-जैसे क्वांटम डॉट आकार बढ़ता है, संबंधित ऊर्जा स्तर निरपेक्ष मूल्य में उल्लेखनीय कमी दिखाते हैं। प्राप्त परिणाम इन्फ्रारेड पांति (infrared range) पर आकार और सामग्री के लिए एक बहुत विस्तृत उपयुक्त क्षमता दिखाते हैं। इन्फ्रारेड लेजर, लंबी दूरी की संचार, और रात दृष्टि कैमरे जैसे विभिन्न क्वांटम डॉट उपकरण, इतनी बड़ी रेंज में योजनाबद्ध किए जा सकते हैं।

Table: English and Hindi technical terms

| Sl. No. | English Term                         | Hindi Term                  |
|---------|--------------------------------------|-----------------------------|
| 1.      | Semiconductor industry               | अर्धचालक उद्योग             |
| 2.      | Transport                            | अपवाहन                      |
| 3.      | Optical                              | प्रकाशीय                    |
| 4.      | Information processing               | क्वांटम सूचना प्रसंस्करण    |
| 5.      | Medical diagnosis                    | चिकित्सा निदान              |
| 6.      | Absorption                           | अवशोषण                      |
| 7.      | Extinction                           | विलुप्त                     |
| 8.      | Single-band effective mass modelling | प्रभावी द्रव्यमान प्रतिरूपण |
| 9.      | Parameter                            | प्राचल                      |

|     |                              |                         |
|-----|------------------------------|-------------------------|
| 10. | Wavelength range             | दैर्घ्य पांति           |
| 11. | Sharp line                   | विविकता रेखा            |
| 12. | Isotropic optical properties | समदैशिक प्रकाशीय गुण    |
| 13. | Incident ray                 | आपतित प्रकाश            |
| 14. | Polarization                 | ध्रुवीकरण               |
| 15. | Single-photon                | एकल-प्रकाशाणु           |
| 16. | Single-spin                  | एकल-चक्रण               |
| 17. | Nano-photonic-catalyst       | नैनो-प्रकाशीय-उत्प्रेरक |
| 18. | Lattice constant             | जाली स्थिरांक           |
| 19. | Energy bandgap               | बैंड अंतराल             |
| 20. | Confinement energy           | परिरोधक ऊर्जा           |
| 21. | Light transition             | दीप्त-स्थानांतरण        |
| 22. | Dark transition              | अदीप्त स्थानांतरण       |
| 23. | Ground state                 | शून्य स्तर              |
| 24. | Occupancy                    | अधिभोग                  |
| 25. | Quantum confinement          | क्वांटम परिरोध          |
| 26. | Orientations                 | उन्मुखीकरण              |

#### संदर्भ (References):

1. A. Manjeevan, "Quantum-Dot-Based Photoelectrochemical Biosensors: Principles, Fabrication, and Applications," in Bio-manufactured Nanomaterials, Cham. SWITZERLAND, Springer, pp. 23-40, (2021).
2. Q. Yuan, T. Wang, P. Yu, H. Zhang, H. Zhang and W. Ji, "A review on the electroluminescence properties of quantum-dot light-emitting diodes," Organic Electronics, vol. 90, p. 106086 (23 pages), (2021).

3. P. Michler, "Quantum Dots for Quantum Information Technologies," *Nano-Optics and Nanophotonics*, (2017).
4. T. Finke, V. Sichkovskiy, J. P. Reithmaier, "Quantum-Dot Based Vertical External-Cavity Surface-Emitting Lasers with High Efficiency," *IEEE Photonics Technology Letters*, vol. 33, no. 14, pp. 719-722 (2021).
5. Hajar Q. Alijani, Shahram Pourseyedi, Masoud Torkezadeh Mahani, Mehrdad Khatami, "Green synthesis of zinc sulfide (ZnS) nanoparticles using Stevia rebaudiana Bertoni and evaluation of its cytotoxic properties," *Journal of Molecular Structure*, vol. 1175, No. 5, pp. 214-218 (2019).
6. Ramasamy V., Praba K., Murugadoss G., "Synthesis and study of optical properties of transition metals doped ZnS nanoparticles", *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, vol. 96, pp. 963-971, (2012).
7. Al-Sagheer, F., Bumajdad, A., Madkour, M., Ghazal, B., "Optoelectronic Characteristics of ZnS Quantum Dots: Simulation and Experimental Investigations", *Science of Advanced Materials*, Volume 7, No. 11, pp. 2352-2360 (2015).
8. Kumar, S., Taneja, S., Banyal, S. et al. "Bio-synthesised Silver Nanoparticle-Conjugated L-Cysteine Ceiled Mn:ZnS Quantum Dots for Eco-friendly Biosensor and Antimicrobial Applications". *J. Electron. Mater.* 50, 3986–3995 (2021).
9. Prasad et al., "Quantum Dot Lab," Nano hub, (2018). [Online]. Available: <https://nanohub.org/resources/qdot>. [Accessed on August, 2021].
10. Zhai et al., "Low-noise GaAs quantum dots for quantum photonics," *Nature Communications*, vol. 11, no. Article No. 4745, (2020).
11. Yonghui Lee, Y. Lee, D. S. Kim, S. W. Jin, H. Lee, Y. R. Jeong, I. You, G. Zi and J. S. Ha, "Stretchable array of CdSe/ZnS quantum-dot light emitting diodes for visual display of bio-signals," *Chemical Engineering Journal*, vol. 427, p. 130858 (10 pages), (2022).
12. P. Rani, R. Singh, S. Sreevastav, "Ab initio study of optical properties of ZnS quantum dots," *Materials Today: Proceedings*, vol. 46(12), pp. 5817-5822 (2021).
13. S. Rodrigues, C. Zandalzini, J. Navarro, K. T. Vadiraj and E. A. Albanesi, "First principles calculations and experimental study of the optical properties of Ni-doped ZnS," *Materials Research Express*, vol. 7, p. 016303 (10 pages), (2020).
14. J. P. Wolfe, "Thermodynamics of excitons in semiconductors," *Physics Today*, vol. 35, no. 3, p. 46, (1982).

**“There’s plenty of room at the bottom:  
An invitation to enter a New Field of Physics”  
NANOTECHNOLOGY**

*Richard Feynman (1959)*