

UNIVERSITATEA DE STAT DIN MOLDOVA

Cu titlu de manuscris

CZU: 539.21

ISACOVA CALINA

**PROPRIETĂȚILE EXCITONICE ȘI FONONICE ALE NANOSTRUCTURILOR
FORMATE DIN PUNCTE CUANTICE**

131.04 FIZICA COMPUTAȚIONALĂ ȘI MODELAREA PROCESELOR

Rezumatul tezei de doctor în științe fizice

CHIȘINĂU, 2023

Teza a fost elaborată în laboratorul „Fizica și Ingineria nanomaterialelor „E. Pokatilov” al Universității de Stat din Moldova

Conducător științific:

NICA Denis, doctor habilitat în științe fizice, conferențiar cercetător.

Referenți oficiali:

TRONCIU Vasile – doctor habilitat în științe fizico-matematice, profesor universitar, Universitatea Tehnică a Moldovei;

KONOPKO Leonid – doctor în științe fizico-matematice, conferențiar cercetător, Institutul de Inginerie Electronică și Nanotehnologii „D. Ghițu”, Universitatea Tehnică a Moldovei.

Componența consiliului științific specializat:

MACOVEI Mihai – *președinte*, doctor habilitat în științe fizico-matematice, conferențiar cercetător, Institutul de Fizică Aplicată, Universitatea de Stat din Moldova;

COCEMASOV Alexandr – *secretar științific*, doctor în științe fizice, conferențiar cercetător, Universitatea de Stat din Moldova;

OSTROVSCHI Serghei – doctor habilitat în științe fizico-matematice, conferențiar cercetător, Institutul de Fizică Aplicată, Universitatea de Stat din Moldova;

CLIUCANOV Alexandr – doctor habilitat în științe fizico-matematice, profesor universitar, Universitatea de Stat din Moldova;

SIDORENKO Anatolie – doctor habilitat în științe fizico-matematice, profesor universitar, academician al Academiei de Științe a Moldovei, Institutul de Inginerie Electronică și Nanotehnologii „D. Ghițu”, Universitatea Tehnică a Moldovei.

Susținerea va avea loc la 09 februarie 2024, ora 15⁰⁰,

în ședința Consiliului științific specializat D 131.04-23-87 – din cadrul Universității de Stat din Moldova, bir. 222, bl.4, str. A. Mateevici, 60, MD-2009, Chișinău, Republica Moldova.

Teza de doctor și rezumatul pot fi consultate la biblioteca Universității de Stat din Moldova (str. A. Mateevici, 60, MD-2009, Chișinău, Republica Moldova) și pe pagina web a ANACEC (www.anacec.md).

Rezumatul a fost expediat la 27 decembrie 2023.

Secretar științific al Consiliului științific specializat,
COCEMASOV Alexandr, dr., conf. cerc.



Conducător științific:
NICA Denis, dr. hab., conf. cerc.



Autor
ISACOVA Calina



CUPRINS

REPERELE CONCEPTUALE ALE CERCETĂRII.....	4
CONȚINUTUL TEZEI.....	8
CONCLUZII GENERALE ȘI RECOMANDĂRI.....	21
BIBLIOGRAFIE	23
LISTA PUBLICAȚIILOR LA TEMA TEZEI.....	27
ADNOTARE	31
SUMMARY	32
АННОТАЦИЯ.....	33

REPERELE CONCEPTUALE ALE CERCETĂRII

În ultimele decenii, nanostructurile semiconductoare rămân subiectul atenției deosebite a cercetătorilor. Caracteristica lor distinctivă este confinamentul, care duce la cuantificarea spectrului energetic al purtătorilor de sarcină și al fononilor [1–12]. Siliciul, fiind cel de-al doilea element ca răspândire pe Pământ și având proprietăți mecanice și electronice excelente, odată cu apariția microelectronicii și a industriei semiconductoarelor, a devenit materialul principal al microelectronicii și industriei semiconductoarelor și, probabil, va rămâne așa în viitorul previzibil. Punctele cuantice (PC) de siliciu (nanocristalele) au demonstrat diverse proprietăți fizice unice [2], [3], [13], [14], ceea ce le permite să fie folosite în optoelectronică (diode emițătoare de lumină (LED), tranzistori cu un singur electron sau dispozitive de memorie), în fonică (diferite surse de energie), cât și în biomedicină pentru fotosensibilizarea oxigenului singlet [15]. Informații calitative și cantitative despre proprietățile optice, excitonice, fononice și termice ale nanostructurilor pe bază de siliciu sunt necesare pentru a îmbunătăți performanța dispozitivelor pe bază de siliciu.

Optimizarea transportului de căldură în structurile nanodimensionale este una din problemele prioritare ale nanoelectronicii moderne. Dirijarea eficientă a fluxului de căldură la nivelul nano poate preveni supraîncălzirea cipurilor electronice și poate contribui la majorarea vitezei de funcționare a acestora. Conductibilitatea termică joasă a structurilor la scară nanometrică le face potențial promițătoare pentru aplicațiile termoelectrice, deoarece factorul de calitate ZT al conversiei termoelectrice conține la numitor conductibilitatea termică:

$$ZT = \frac{S^2 \sigma T}{(\kappa_{ph} + \kappa_{el})}, \text{ unde } S \text{ reprezintă coeficientul Seebeck; } \sigma - \text{conductibilitatea electrică; } T -$$

temperatura absolută și κ_{ph} și κ_{el} – conductibilitățile termice fononică și electronica, respectiv.

În același timp, pentru evacuarea eficientă a căldurii de la cipurile electronice, sunt necesare nanomateriale cu conductibilitate termică înaltă. Astfel, continuă căutarea teoretică și experimentală a diferitelor modalități atât de reducere, cât și de creștere a conductibilității termice [16], [17]. Ingineria fononică, adică tehnologia de îmbunătățire a proprietăților electronice și termice ale nanostructurilor prin modificarea proprietăților fononice ale lor, s-a dovedit a fi un instrument puternic de optimizare a proprietăților termice, electrice și termoelectrice la scară nanometrică [6], [18], [19].

S-a demonstrat, că ingineria fononică este deosebit de eficientă în materialele nanostructurate, formate din straturi sau segmente de forme, dimensiuni și/sau materiale diferite. O scădere semnificativă a conductibilității termice a rețelei cristaline (până la un ordin

de mărime) a fost demonstrată atât experimental, cât și teoretic în straturile subțiri de siliciu conținând PC de germaniu [20], în nanofirele de siliciu cu suprafață rugoasă [21], în nanofirele Si/Ge cu secțiuni constante și variabile [7], [8], [22], [23], precum și în nanofirele segmentate [23–28]. În același timp, proprietățile fizice ale suprarețelelor cvazi-unidimensionale formate din PC (1D-SRPC), adică așa-numitele ansambluri de puncte cuantice aranjate într-o singură direcție spațială, sunt studiate insuficient. Aceste structuri combină posibilitatea de mișcare liberă a purtătorilor de sarcină sau a fononilor într-o singură direcție, cu o restricție spațială puternică în celelalte două direcții. În această teză, am investigat teoretic proprietățile excitonice, fononice și termice ale suprarețelelor unidimensionale din PC pe bază de siliciu și a nanotuburilor cu înveliș multiplu (NTM) Si/SiO₂, cât și optimizarea parametrilor acestora pentru aplicații optice, problemele legate de transferul de energie și reglarea proprietăților termice.

Scopul și obiectivele cercetării:

- Dezvoltarea modelelor teoretice pentru stările electronice, de gol și excitonice în cristalele de siliciu a suprarețelelor unidimensionale din PC;
- Investigarea proprietăților electronice, de gol, excitonice și fotoluminescente ale materialelor pe baza Si 1D-SRPC și optimizarea lor pentru aplicațiile optice și transmiterea de energie;
- Dezvoltarea modelelor teoretice pentru stările fononice și conductibilitatea termică în 1D-SRPC pe bază de Si și în NTM Si/SiO₂;
- Investigarea proprietăților fononice și termice ale 1D-SRPC pe bază de Si, SRPC pe baza Si și ale NTM Si/SiO₂, cât și optimizarea lor pentru controlul fluxurilor termice.

Ipoteze de cercetare:

- Trebuie utilizat Hamiltonianul cu trei zone al lui Bart, pentru descrierea cantitativă a stărilor excitonice în PC de siliciu;
- Lărgirea liniilor de fotoluminescență (FL) în PC de siliciu poate fi explicată teoretic prin dispersia formei și dimensiunii PC din eşantion;
- Transportul termic în Si/Ge 1D-SRPC este semnificativ suprimat din cauza capturării multor moduri fononice în segmentele nanostructurii și a dispersiei fononilor pe interfețele dintre Si/Ge;
- Pentru NTM Si/SiO₂ cu L învelișuri, într-un interval larg de temperaturi, de la 50 K până la 400 K, se prognozează o scădere de L ori a conductibilității termice în comparație cu nanotuburile Si/SiO₂ cu un singur înveliș.

Metodologie și metode de cercetare:

Proprietățile excitonice ale PC:

1. *Abordarea masei efective cu un Hamiltonian cu trei zone* pentru investigația teoretică a stărilor electronice, de gol și excitonice. În această abordare se ia în considerare, de asemenea, anizotropia maselor efective și autoacțiunea electronilor și golurilor;
2. *Metoda diferențelor finite* pentru rezolvarea numerică a ecuațiilor lui Schrödinger;
3. *Metoda de diagonalizare a matricei uriașe Davidson-Liu* [29] (cu până la 10^7 elemente);
4. *Metoda iterativă Jacobi-Zeidel* pentru calculul numeric al potențialelor coulombiene în nanostructurile investigate.

Spectrele fononice și conductibilitatea termică:

5. Modelul vibrațiilor rețelei cu celulă cubică centrată pe suprafață, pentru investigarea teoretică a modurilor fononice în 1D-SRPC pe bază de siliciu și a NTM Si/SiO₂.
6. Ecuația de transport Boltzmann în aproximația perioadei de relaxare [30–33], pentru investigarea teoretică a fluxurilor termice în 1D-SRPC pe bază de siliciu și a NTM Si/SiO₂. Au fost luate în considerație toate mecanismele principale de dispersie a fononilor în 1D-SRPC și în NTM: dispersia tripletă de transfer a fononilor, dispersia pe frontiere și dispersia pe impurități [16], [31–38].

Noutatea și originalitatea științifică a lucrării sunt legate de investigația teoretică complexă a proprietăților excitonice, fononice și termice ale nanostructurilor din clasa 1D-SRPC pe bază de siliciu, precum și a NTM Si/SiO₂. Au fost obținute următoarele rezultate teoretice noi:

- Creșterea înălțimii barierei potențiale duce la intensificarea captării spațiale a electronilor și golurilor și, implicit, la creșterea energiilor lor și a distanțelor dintre nivelele energetice;
- Atât energia de legătură, cât și energia totală a excitonilor scad odată cu mărirea volumului PC datorită slăbirii restricției spațiale asupra electronilor și golurilor;
- Forma PC de siliciu are un impact semnificativ asupra stărilor electronice, de gol și excitonice. Se arată, că PC conice posedă valori mai mici ale energiei fundamentale a excitonilor în comparație cu cele cubice și piramidale pentru volumele PC: $V < 32 \text{ nm}^3$, iar pentru volumele $V > 32 \text{ nm}^3$ PC cubice demonstrează valori mai mici ale energiei fundamentale a excitonilor;
- Parametrii mediului extern influențează energia de bază a electronilor și golurilor doar pentru PC de siliciu cu un înveliș subțire de SiC cu grosimea $< 1 \text{ nm}$, deoarece penetrarea

maximă a funcțiilor de undă ale golurilor și electronilor în mediile de barieră în PC considerate Si/SiC/aer sau Si/SiC/apă, este de aproximativ 1 nm;

- Lărgirea semnificativă a benzilor de FL în PC de siliciu, precum și dependența energiei excitonilor de temperatura de coacere, recent raportată în lucrările experimentale [13], [39], [40], poate fi explicată teoretic prin dispersia formei și dimensiunii PC;
- Modurile fononice în 1D-SRPC de Si/Ge sunt capturate în segmentele lor datorită neconcordanței acustice a materialelor. Inclinația dispersiei fononilor în 1D-SRPC este mai mică decât în nanofirele de siliciu. Multe moduri cu energie înaltă în 1D-SRPC de Si/Ge nu prezintă dispersie și au viteze de grup foarte mici, apropiate de zero;
- Vitezele de grup medii ale fononilor în 1D-SRPC de Si/Ge sunt semnificativ mai mici decât în nanofire pentru toate energiile fononilor în 1D-SRPC cu secțiunea transversală modulată (1D-M-SRPC) și pentru energiile fononilor $\hbar\omega > 5 \text{ meV}$ în 1D-SRPC cu secțiunea transversală constantă (1D-C-SRPC). Efectul micșorării vitezei de grup medii a fononilor este mai pronunțat în cazul 1D-M-SRPC datorită suprapunerii efectelor de segmentare și modulare transversală;
- Transportul termic în 1D-SRPC de Si/Ge este semnificativ suprimat datorită încetinirii fononilor și intensificării dispersiei fononilor pe frontierele dintre Si/Ge. Pentru C-SRPC (M-SRPC) s-a demonstrat o scădere a conductibilității termice de până la 7 ori (13,5 ori) în funcție de temperatură. La temperatura camerei, conductibilitatea termică în 1D-C-SRPC de Si/Ge este de 2,6 – 2,9 ori mai mică decât în nanofirele de siliciu cu aceeași secțiune;
- Vitezele de grup medii ale fononilor în NTM din siliciu sunt apropiate de zero în cazul energiilor fononice $\hbar\omega > 10 \text{ meV}$;
- Un număr mare de moduri fononice în NTM Si/SiO₂ sunt disipate la granițele dintre Si/SiO₂. Ca rezultat, pentru NTM Si/SiO₂ cu L învelișuri se prognozează o scădere de L ori a conductibilității termice într-un interval larg de temperaturi, de la 50 K la 400 K, în comparație cu nanotuburile Si/SiO₂ cu un singur înveliș.

Structura tezei

Lucrarea este compusă din Introducere, trei capitole, Concluzii generale și Recomandări, Bibliografie din 157 titluri, 145 pagini, 79 figuri, 53 formule și 1 tabel.

Publicații și aprobarea tezei

Rezultatele obținute în teză au fost publicate în 8 articole științifice, inclusiv 4 în reviste din baza de date ISI Web of science/SCOPUS și au fost prezentate la 32 conferințe științifice

internaționale și naționale. Două articole și două rezumate ale conferinței au fost publicate fără co-autori.

CONȚINUTUL TEZEI

În **Introducere**, este prezentată analiza generală a tezei, se argumentează relevanța subiectului de cercetare și se descrie starea cercetărilor din lume pe tema abordată. Este dezvăluită noutatea științifică a rezultatelor obținute și subliniată importanța teoretică și practică a cercetării. De asemenea, sunt stabilite scopurile și obiectivele principale ale lucrării.

Capitolul 1 cuprinde o sinteză a lucrărilor științifice publicate pe tema cercetării și a metodelor utilizate pentru soluționarea problemei date. Sunt analizate lucrările, în care sunt investigate teoretic și experimental proprietățile excitonice, fotoluminescente și termice ale diferitelor nanostructuri, precum și se face compararea acestor proprietăți cu cele ale materialelor volumetrice similare. Lucrările prezentate sunt dedicate punctelor cuantice Si/SiO₂ și proprietăților lor fotoluminescente, precum și influenței condițiilor de obținere a eșantionului asupra energiei FL, formei liniei de FL și a intensității acesteia. Sunt demonstrate diverse aplicații ale PC de Si, în special în calitate de surse netoxice de energie, compatibile cu CMOS, utile pentru transmiterea energiei atât prin emisie de radiații, cât și fără emisii de radiații. Pentru studiul proprietăților excitonice și optice ale nanostructurilor, în lucrările analizate sunt utilizate pe scară largă atât abordarea masei efective [41], cât și modelele de cuplare puternică. De asemenea, sunt descrise metodele utilizate la cercetarea teoretică a proprietăților electronice, de gol și excitonice ale PC.

Partea a doua a Capitolului I se referă la cercetările din domeniul ingineriei fononice și a transportului termic. Sunt explicate detaliat diferite abordări teoretice pentru investigarea fluxului de căldură în nanostructurile heterogene, cum ar fi structurile plane cu mai multe straturi și heterofirele. S-a demonstrat, că nanostructurile cu mai multe straturi posedă o gamă largă de posibilități pentru ingineria purtătorilor de sarcină sau a fononilor prin ajustarea formei și dimensiunii lor, precum și a materialelor straturilor.

În același timp, se observă o anumită insuficiență în cercetarea proceselor excitonice și fononice în suprafețele cuantice cvazi-unidimensionale, formate din puncte cuantice (1D-SRPC).

Este formulat scopul principal al tezei: realizarea unei cercetări teoretice cuprinzătoare a proprietăților excitonice, fononice și termice ale nanostructurilor cuantice cvazi-unidimensionale în bază de siliciu (1D-SRPC și nanotuburilor cu învelișuri multiple (NTM)) și

optimizarea lor pentru aplicații optice, energetice, termice și de dirijare. Pentru realizarea scopului propus, au fost formulate următoarele sarcini:

- Dezvoltarea modelelor teoretice ale stărilor electronice, de gol și excitonice în 1D-SRPC pe bază de Si;
- Investigarea proprietăților electronice, de gol, excitonice și fotoluminescente ale 1D-SRPC pe bază de Si și optimizarea lor pentru aplicații optice și de transmitere a energiei;
- Elaborarea modelelor teoretice ale stărilor fononice și a conductibilității termice în 1D-SRPC pe bază de Si și NTM Si/SiO₂;
- Investigarea proprietăților fononice și termice ale 1D-SRPC pe bază de Si și ale NTM Si/SiO₂ și optimizarea lor pentru dirijarea transportului termic.

În **Capitolul 2** este descrisă cercetarea teoretică a proprietăților electronice, de gol, excitonice și fotoluminescente ale PC de Si, amplasate într-o matrice dielectrică. Spectrele electronilor și golurilor sunt calculate în cadrul aproximației masei efective, luând în considerație energia autoacțiunii, înălțimea finită a barierei de potențial și anisotropia masei efective în Si. În calculele realizate au fost utilizate două abordări diferite pentru goluri: Hamiltonianul unizonal și Hamiltonianul asimetric cu trei zone al lui Bart.

În Fig. 1 este prezentată comparația energiilor golurilor, calculate utilizând Hamiltonianul unizonal pentru golurile grele și ușoare, cu energiile corespunzătoare, calculate utilizând Hamiltonianul cu trei zone. Pentru toate tipurile de goluri analizate: grele, ușoare și 3-zonale, sunt prezentate energiile a trei stări cele mai inferioare. Liniile negre corespund golurilor 3-zonale; liniile albastre corespund golurilor, pentru care a fost utilizată aproximația unizonală. Liniile punctate reprezintă nivelele energetice ale golurilor grele, iar liniile continue - spectrul golurilor ușoare. Toate nivelele energetice, calculate în cadrul aproximației unizonale, sunt situate mai sus decât nivelele corespunzătoare ale golurilor 3-zonale, cu excepția nivelului fundamental al golurilor grele. Diferența de energie poate ajunge valoarea de ~ 20 meV în funcție de raza PC. Nivelele energetice ale golurilor, calculate cu ajutorul Hamiltonianului lui Bart, posedă o energie mai mică și sunt amplasate la o distanță energetică mai mică față de nivelele vecine, decât nivelele golurilor grele, calculate cu ajutorul Hamiltonianului unizonal.

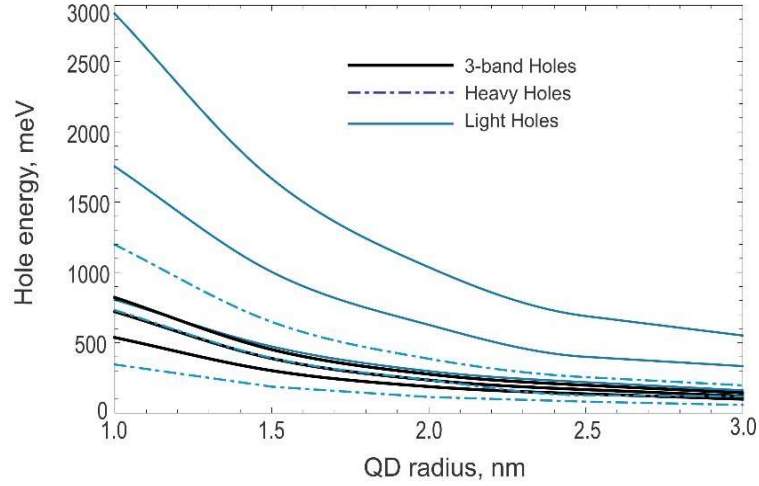


Fig. 1. Comparația energiilor a trei stări cele mai inferioare ale golurilor, calculate în cadrul aproximațiilor 3-zonale și unizonale.

Energia excitonilor a fost calculată luând în considerație amestecarea stărilor excitonice superioare. Hamiltonianul excitonic are forma:

$$H_{exc}(\vec{r}_e, \vec{r}_h) \Phi_{exc}^n(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = E_{exc}^n \Phi_{exc}^n(\vec{r}_e, \vec{r}_h), \quad (1)$$

unde Hamiltonianul excitonului:

$$H_{exc}(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = H_e^{SA}(\vec{r}_e) + H_h^{SA}(\vec{r}_h) + V_{Coulomb}(|\vec{r}_e - \vec{r}_h|). \quad (2)$$

În Ec. (1-2) $\Phi_{exc}^n(\vec{r}_e, \vec{r}_h)$ reprezintă funcțiile de undă ale excitonului, $H_e(\vec{r}_e)$ și $H_h(\vec{r}_h)$ reprezintă Hamiltonianul electronilor și, respectiv, Hamiltonianul golurilor, iar $V_{Coulomb}$ este potențialul interacțiunii coulombiene.

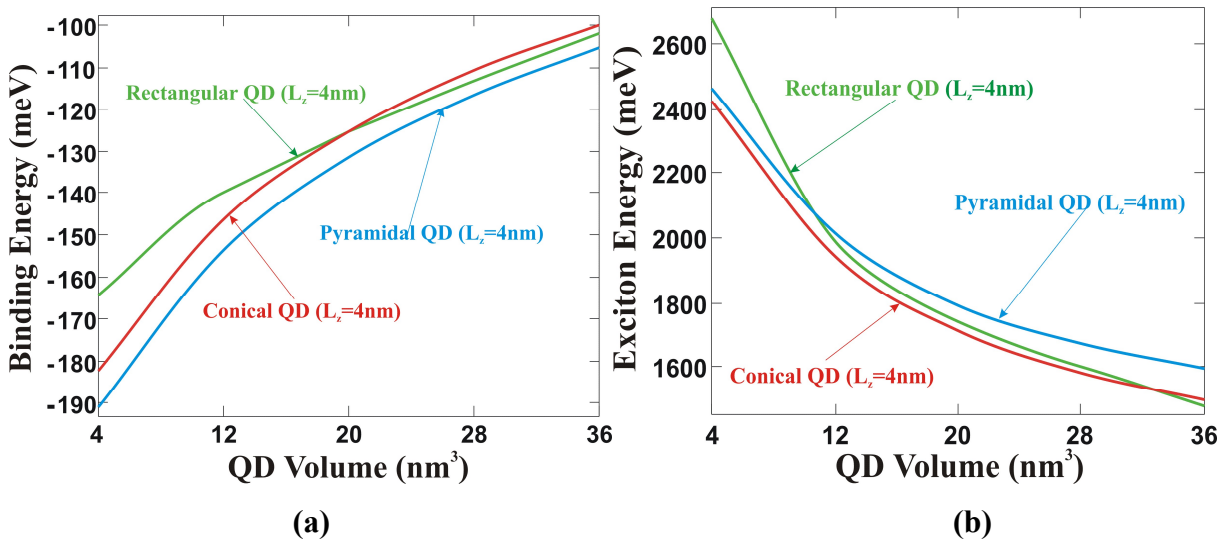


Fig. 2. Influența formei PC asupra energiei stărilor excitonice.

Impactul formei PC asupra energiei de legătură a excitonului (panoul a) și asupra energiei totale a excitonului (panoul b) este ilustrat în Fig. 2 pentru PC Si/SiO₂. Curbele de

energie sunt prezentate în funcție de volumul PC. Pe ambele panouri, energiile PC piramidale sunt reprezentate cu ajutorul curbelor albastre, cele ale PC conice – cu curbe roșii, iar cele ale PC de formă cubică - cu curbe verzi. Energia de legătură crește odată cu majorarea volumului PC. În cazul PC piramidale, valoarea acesteia este mai mică decât în cazul PC conice și cubice pentru toate volumele PC, prezentate în figură. Pentru PC cubice și conice, curbele energiei de legătură se intersectează: $E_{bind,conical\ QD}^{ground} < E_{bind,cuboid\ QD}^{ground}$ pentru volume $V < 20\text{ nm}^3$ și $E_{bind,conical\ QD}^{ground} > E_{bind,cuboid\ QD}^{ground}$ pentru $V > 20\text{ nm}^3$.

Energia totală a excitonilor (vezi Fig. 2 (b)) scade odată cu majorarea dimensiunii PC din cauza micșorării energiei electronilor și golurilor odată cu reducerea constrângerii spațiale. Toate curbele energetice ale excitonilor se intersectează: pentru volume din intervalul $4\text{ nm}^3 - 36\text{ nm}^3$, PC conice demonstrează cele mai scăzute valori ale energiei, iar pentru volume $V > 36\text{ nm}^3$ energia excitonului în PC de formă cubică devine mai mică decât în PC conice sau piramidale. Comportamentul curbelor de energie este explicat de comportamentul curbelor energetice atât ale electronilor, cât și ale golurilor, precum și de dependența energiei de legătură de volumul V (vezi Fig. 2 (a)).

Amestecarea nivelelor electronice și de gol, precum și utilizarea Hamiltonianului lui Bart pentru goluri, furnizează valori mai scăzute ale energiei nivelelor excitonice, ceea ce duce la o concordanță mai bună cu rezultatele experimentale și face ca modelul dat să fie aplicabil pentru prognozarea energiei excitonilor chiar și în cazul PC mici, având diametrul $\leq 2\text{ nm}$.

Au fost comparate rezultatele teoretice, care au fost calculate în teză pentru diferite forme ale PC cu utilizarea diferitor abordări, cu datele experimentale și calculele teoretice ale altor grupuri de cercetare. În Fig. 3 este prezentată o comparație a rezultatelor experimentale și teoretice referitoare la energia excitonilor.

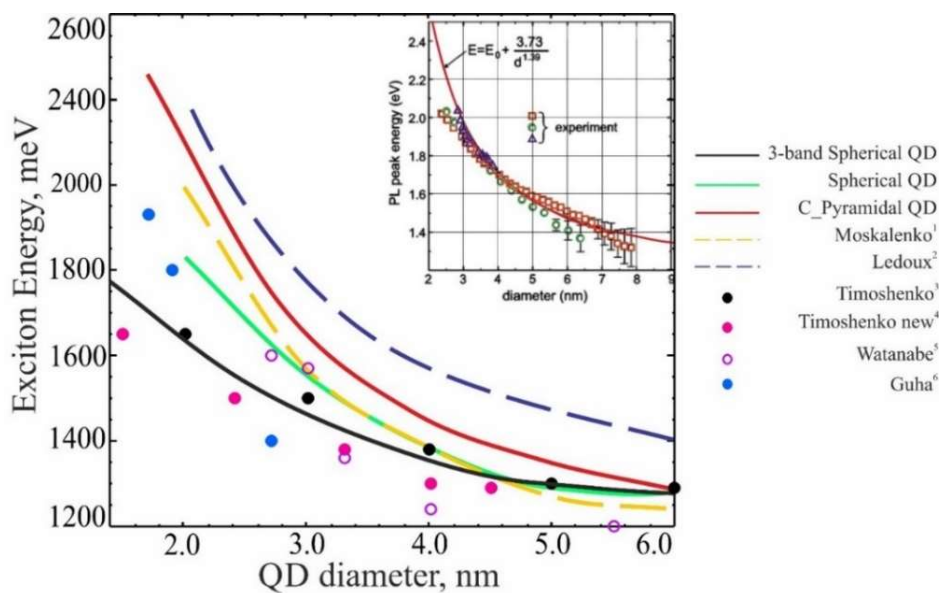


Fig. 3. Compararea rezultatelor calculului teoretic al energiei excitonice cu datele experimentale pentru PC de Si.

Liniile continui reprezintă rezultatele calculului teoretic, efectuate în această lucrare de Teză. Linia verde corespunde PC sferice în aproximația Hamiltonianului unizonal pentru goluri, fără luarea în considerație a amestecării nivelelor excitonice. Linia neagră se referă, de asemenea, la PC sferice, dar spectrele golurilor sunt calculate utilizând Hamiltonianul asimetric cu trei zone al golurilor, luând în calcul amestecarea nivelelor energetice ale excitonilor. Energia excitonilor pentru PC sub formă de piramidă trunchiată dublă, este reprezentată cu ajutorul liniei roșii. Dependența dată a fost calculată utilizând Hamiltonianul cu trei zone și ținând cont de amestecarea nivelelor energetice de energie înaltă a purtătorilor de sarcină. Liniile punctate reprezintă rezultatul calculului teoretic luat din alte surse: linia galbenă reprezintă calculele teoretice ale energiei excitonilor pentru PC sferice din lucrarea [42], iar linia albastră reprezintă calculele teoretice, efectuate de Ledoux și coautori în lucrarea [43] (la fel ca în insert). Punctele negre, punctele mov și cercurile, precum și punctele albastre reprezintă rezultatele experimentale, obținute pentru energia excitonilor în lucrările [40], [39], [44], [14], respectiv. În experimentele prezentate, nanocristalele de Si au fost încorporate într-o matrice dielectrică de SiO₂, iar în lucrarea Watanabe et al. [44], ionii Er⁺ au fost prezenți de asemenea în matricea dielectrică. Insertia a fost preluată din lucrarea Ledoux [43]. Sunt prezentate date teoretice și experimentale, privind energia excitonilor în funcție de dimensiunea PC.

Se poate observa clar, că toate curbele teoretice pentru PC sferice posedă o energie mai mare decât datele experimentale, obținut pentru diametrul $D < 3$ nm al PC, dar se potrivesc bine cu linia de FL, măsurată pentru PC de dimensiuni mai mari. Cel mai bun acord cu datele

experimentale sunt demonstrate de calculele teoretice, efectuate pentru PC sferice în cadrul abordării Hamiltonianului asimetric cu trei zone, ținând cont de amestecarea nivelelor energetice ale cuantificării dimensionale a electronilor și golurilor. Diferența semnificativă între rezultatele teoretice și cele experimentale în cazul PC mici, având diametrul $D < 3 \text{ nm}$, poate fi explicată cu ajutorul următoarelor cauze: (i) dificultățile experimentale în obținerea PC de aceeași formă și dimensiune, precum și (ii) precizia insuficientă în determinarea dimensiunii/formei și a dispersiei dimensiunii/formei în experiment, ceea ce afectează semnificativ spectrele PC cu $D < 3 \text{ nm}$ [13] și (iii) aplicabilitatea limitată a abordării continue pentru PC cu $D < 3 \text{ nm}$ (valabilitatea abordării continue în acest caz este discutabilă).

Curbele de FL ale ansamblului de PC de aceeași dimensiune și formă ar trebui să aibă forma unor vârfuri ascuțite. Cu toate acestea, conform experimentelor prezentate în Ref. [39], spectrele de FL pentru PC sferice de Si/SiO₂ prezintă curbe ce au forma distribuției normale Gauss în locul maximumurilor ascuțite așteptate. În studiile teoretice dezvoltate în teză, am presupus două cauze principale posibile de lărgire a benzii de FL: dispersia dimensiunilor PC și fuziunea/coalescența PC.

Modelarea teoretică a liniilor de FL a fost efectuată în conformitate cu următoarea ecuație:

$$I_{PL}(\varepsilon(K)) = I_{PL}(\varepsilon_{\max}) e^{-a \left(\frac{K(\varepsilon_{\pm}) - K_0(\varepsilon_{\max})}{K_0(\varepsilon_{\max})} \right)^2}, \quad (3)$$

unde, K_0 – raza inițială a PC ori distanța maximală dintre centrele PC, $\varepsilon_{\max}$ – energia excitonilor în PC cu raza K_0 , a – parametrul, care descrie dispersia dimensiunii PC, se calculează conform următoarei expresii:

$$\langle (x^2) \rangle = \frac{\int_{-1}^{\infty} x^2 e^{-ax^2} dx}{\int_{-1}^{\infty} e^{-ax^2} dx}, \quad (4)$$

unde $x = \frac{K - K_0}{K_0}$.

În Fig. 4 este prezentată comparația între curbele teoretice și cele experimentale ale distribuției intensității FL în funcție de energiile de FL pentru diferite dimensiuni ale PC. Liniile continue roșii reprezintă curbele experimentale ale FL, liniile punctate continue negre – dependențele, obținute în rezultatul modelării teoretice a dispersiei dimensiunilor PC, iar liniile punctate galbene reprezintă rezultatele modelării teoretice a fuziunii PC. În Fig. 4 (a) este

prezentată FL pentru PC cu diametrul $D=3\text{nm}$ la valoarea dispersiei $\langle\langle x^2 \rangle\rangle = 0.0324$. Se observă, că curba teoretică a distribuției după dimensiuni aproape că coincide cu datele experimentale (dispersia dimensională fiind egală cu 18 % din raza PC). Pentru PC cu diametrul de 4 nm (vezi Fig. 4 (b)), dispersia a fost aleasă aceeași ca și pentru PC cu $D=3\text{nm}$, $\langle\langle x^2 \rangle\rangle = 0.0324$. Dar în acest caz există o diferență între curba dispersiei dimensionale și datele experimentale în diapazonul energiilor joase. Pentru PC cu un diametru de 5 nm, dispersia a fost majorată până la $\langle\langle x^2 \rangle\rangle = 0.0484$. Chiar și la o dispersie mai mare, curba teoretică se potrivește cu cea experimentală doar în zona energiilor înalte. Acest lucru se întâmplă, deoarece energia excitonilor crește mai lent odată cu majorarea dimensiunii PC, curba de distribuție a dimensiunilor este asimetrică și îngustă în zona energiilor joase, chiar și la o dispersie a dimensiunilor de până la $a=80\%$ din diametrul PC. Cu toate acestea, datorită energiei mai mici a excitonilor pentru PC fuzionate, am obținut o potrivire bună între rezultatele teoretice ale noastre și experiment, după cum se poate vedea în Fig. 4 (c).

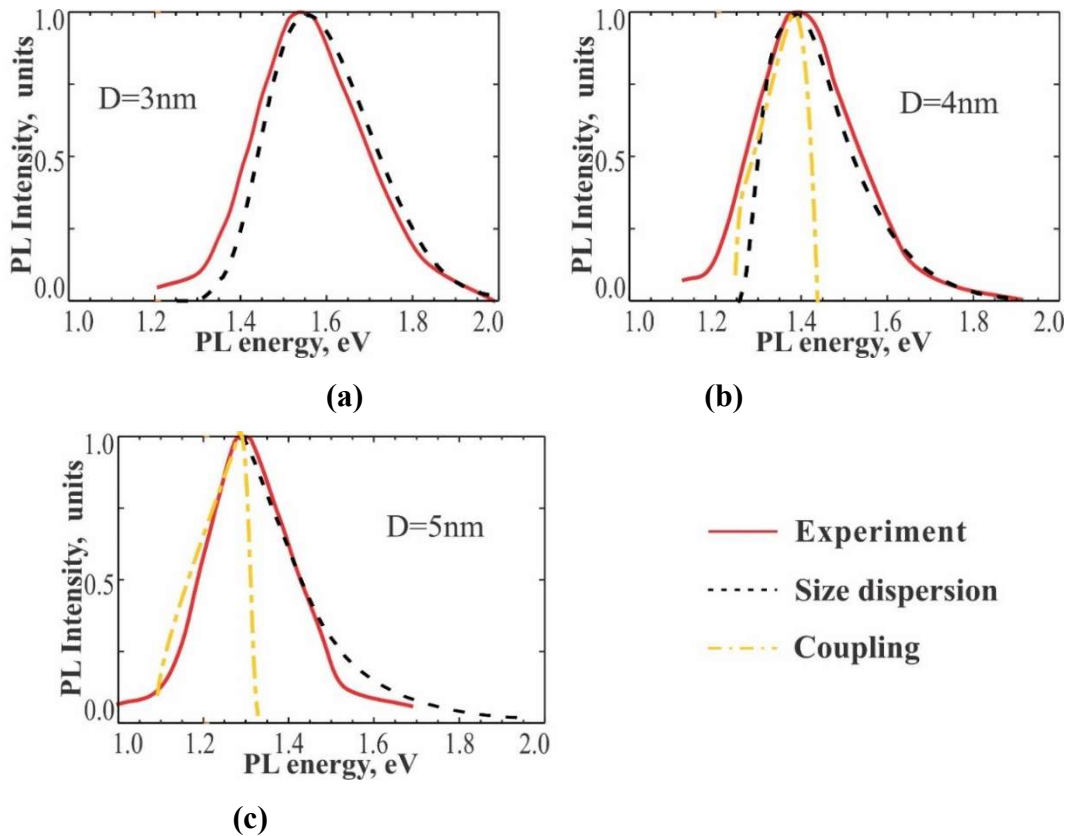


Fig. 4. Distribuția intensității fotoluminiscentei în PC Si/SiO₂ în funcție de energie FL.

Prin urmare, distribuția dimensiunilor PC permite de a explica lărgirea benzii de FL în diapazonul energiilor înalte, în timp ce fuziunea PC poate fi cauza lărgirii benzii de FL în cazul energiilor joase.

Drept subiect al **Capitolului 3** sunt proprietățile termice ale suprarețelelor unidimensionale pe bază de Si.

Au fost investigate posibilitățile de reducere a conductibilității termice în cazul 1D-SRPC cu secțiune transversală constantă (1D-C-SRPC) și cu secțiune transversală periodic modulată (1D-M-SRPC), atât cu înveliș, cât și fără, pornind de la principiile ingineriei fononice. A fost studiată influența atât a parametrilor geometrici, cât și a celor materiali ai 1D-SRPC, asupra spectrelor fononice, vitezelor de grup ale fononilor și a conductibilității termice. De asemenea, a fost efectuată analiza comparativă a proprietăților fononice și termice ale NTM de siliciu. Rezultatele prezentate se bazează pe lucrări originale ale autorului [24], [45–47].

Spectrele fononilor au fost calculate utilizând modelul dinamic al oscilațiilor rețelei cristaline „face-centred cubic cell”. Această abordare exclude oscilațiile optice din calcul, dar nu necesită parametri de ajustare și oferă o descriere calitativă bună a efectelor cercetate. Am studiat spectrele și vitezele fononice în 1D-SRPC.

S-a demonstrat, că secțiunea transversală periodic modulată amplifică efectul neconcordanței acustice a materialelor și reduce mai eficient transportul termic. A fost evidențiat faptul, că contactul dintre materiale cu caracter acustic diferit, duce la redistribuirea densității de stări fononice în direcția energiilor mai joase. Împreună cu încetinirea fononilor, acest lucru conduce la o scădere a transferului de căldură. Fluxul de căldură a fost calculat utilizând ecuația de transport a lui Boltzmann în aproximația perioadei de relaxare. Pentru obținerea rezultatelor mai precise, a fost utilizată funcția unidimensională a stărilor. Au fost luate în considerare trei mecanisme principale de dispersie: procesul Umklapp, împrăștierea pe frontiere și împrăștierea pe impurități [31–38]. S-a arătat, că modificarea parametrilor geometrici precum secțiunea transversală, diferența dintre secțiunile transversale ale PC în 1D-M-SRPC și perioada de translație, poate intensifica scăderea fluxului de căldură în 1D-SRPC.

Pentru calculul fluxului de căldură fononic în nanostructurile 1D, am utilizat următoarea expresie, obținută din ecuația de transport a lui Boltzmann în aproximația perioadei de relaxare [30–33], luând în considerație densitatea unidimensională a stărilor fononice:

$$\Theta = \frac{1}{2\pi k_B T^2} \sum_{s=1, \dots, 3N} \int_0^{q_{\max}} \left(\hbar \omega_s(q_z) v_{z,s}(q_z) \right)^2 \tau_{tot,s}(q_z) \frac{\exp\left(\frac{\hbar \omega_s(q_z)}{k_B T}\right)}{\left(\exp\left(\frac{\hbar \omega_s(q_z)}{k_B T}\right) - 1 \right)^2} dq_z. \quad (5)$$

Aici $\tau_{tot,s}$ semnifică perioada totală de relaxare a fononilor, s reprezintă numărul ramurii fononice, k_B - constanta Boltzmann, $\hbar$ - constanta Plank redusă, T - temperatura absolută, ω - pulsația fononică și v_z - componenta vitezei de grup a fononilor pe axa Z.

Conform regulii lui Matthiessen, perioada de relaxare totală a fononilor se determină din expresia:

$$\frac{1}{\tau_{tot,s}(q_z)} = \sum \frac{1}{\tau_{mechanism}(q_z)}, \quad (6)$$

unde $\tau_{mechanism}$ reprezintă perioada de relaxare, specifică mecanismului de dispersie corespunzător [31–38].

În Fig. 5 este prezentat raportul conductibilităților termice a 1D-C-SRPC de Si/Ge și a nanofirului (NF) omogen de Si cu secțiune transversală corespunzătoare. În dependențele prezentate în Fig. 5(a) am variat valorile parametrului de reflexie: $p = 0.9, 0.7, 0.5$, acest parametru poate lua valori între $p = 0$ (dispersie difuză pură) și $p = 1$ (dispersie pură prin reflexie) la temperatura fixă de $T = 300$ K. Invers, în Fig. 5(b) am fixat parametrul de reflexie și am variat valorile temperaturii: $T = 100$ K, 200 K, 300 K, 400 K. Perioada de translație a fost aceeași în ambele cazuri: $N_z = 4$ ML. Creșterea secțiunii transversale atât în 1D-C-SRPC, cât și în NF, duce la creșterea numărului de atomi și, în consecință, a numărului de fononi implicați în transferul de căldură. În același timp, această creștere face ca influența modelelor fononice, captate în segmentele 1D-SRPC și influența dispersiei suplimentare a fononilor pe frontierele materialelor, să nu mai fie atât de semnificative, iar dependența de valoarea secțiunii transversale a micșorării conductibilității termice la temperatura $T = 300$ K atinge un maxim pentru structurile cu secțiunea transversală situată în intervalul $17 \text{ ML} \times 17 \text{ ML} - 23 \text{ ML} \times 23 \text{ ML}$ (vezi Fig. 5(a)). Scăderea maximă a fluxului de căldură în 1D-C-SRPC este de 2,6 – 2,9 ori. O scădere mai semnificativă corespunde unei valori mai mici a parametrului de reflexie. Deplasarea maximelor spre secțiuni mai mari la o valoare mai mică a parametrului de reflexie este rezultatul acțiunii unui număr majorat de moduri fononice și a dispersiei pe frontiere. Curbele din Fig. 5(b) arată, că scăderea cea mai semnificativă a

transportului de căldură se obține la temperaturi mai înalte. Scăderea transferului de căldură la temperatura de 200 K este mai mare cu $\sim 25\%$ decât la temperatura de 100 K. Diferența între valori la temperaturile de 200 K, 300 K, 400 K se încadrează în diapazonul de 1% – 4%. La temperaturi mai ridicate, fononii încep să populeze nivelele energetice mai superioare cu viteze fononice aproape nule, ceea ce duce la o scădere mai semnificativă a fluxului de căldură, iar creșterea ulterioară a populării nu mai are un impact semnificativ asupra fluxului de căldură. Intensificarea disperiei Umklapp determină deplasarea maximelor dependențelor în direcția secțiunilor mai mici odată cu creșterea temperaturii. Prin urmare, fluxul de căldură în 1D-C-SRPC din Si/Ge este mai mic decât în NF de Si, datorită captării modelor fononice de energie înaltă în segmentele de Ge cu viteză a sunetului mai joasă, precum și datorită intensificării disperiei Umklapp și a împrăștierei pe interfețele segmentelor.

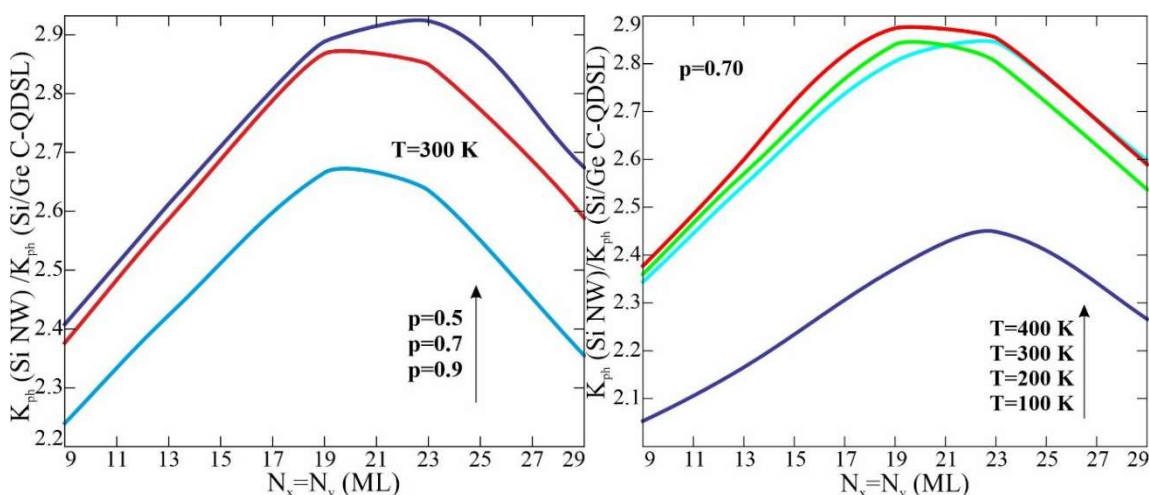


Fig. 5. Raportul conductibilităților termice în NF de Si și în 1D-C-SRPC de Si/Ge în funcție de secțiunea transversală

(a) la temperatura constantă $T = 300\text{ K}$; (b) la o valoare constantă a parametrului de reflexie $p = 0.7$

În Fig. 6 sunt prezentate dependențele fluxului de căldură în 1D-M-SRPC de diferiți parametri geometrici ai nanostructurii. Am fixat secțiunea transversală a PC de Ge: $N_{x,2} = N_{y,2} = 11\text{ ML}$ și valoarea parametrului de reflexie: $p = 0.7$. Curbele roșii corespund PC de Si cu dimensiunea transversală $N_{x,1} = N_{y,1} = 9\text{ ML}$, iar cele albastre – PC de Si, având dimensiunea transversală $N_{x,1} = N_{y,1} = 7\text{ ML}$. Liniile continue reprezintă 1D-M-SRPC cu o perioadă de translație de $N_z = 4\text{ ML}$, liniile punctate — cu $N_z = 8\text{ ML}$, iar liniile punctate și întrerupte — cu $N_z = 12\text{ ML}$. Dependențele corespunzătoare pentru 1D-M-SRPC cu o secțiune

transversală mai mare, furnizează valori mai mari la aceeași lungime a perioadei de translație. Cu toate acestea, 1D-M-SRPC cu PC de Si având o secțiune transversală mai mare: $N_{x,1} = N_{y,1} = 9 \text{ ML}$ și perioada de translație $N_z = 12 \text{ ML}$, posedă valori mai mici ale fluxului termic decât 1D-M-SRPC cu secțiunea transversală mai mică a PC de Si și cu o perioadă de translație mai mică: $N_z = 4 \text{ ML}$.

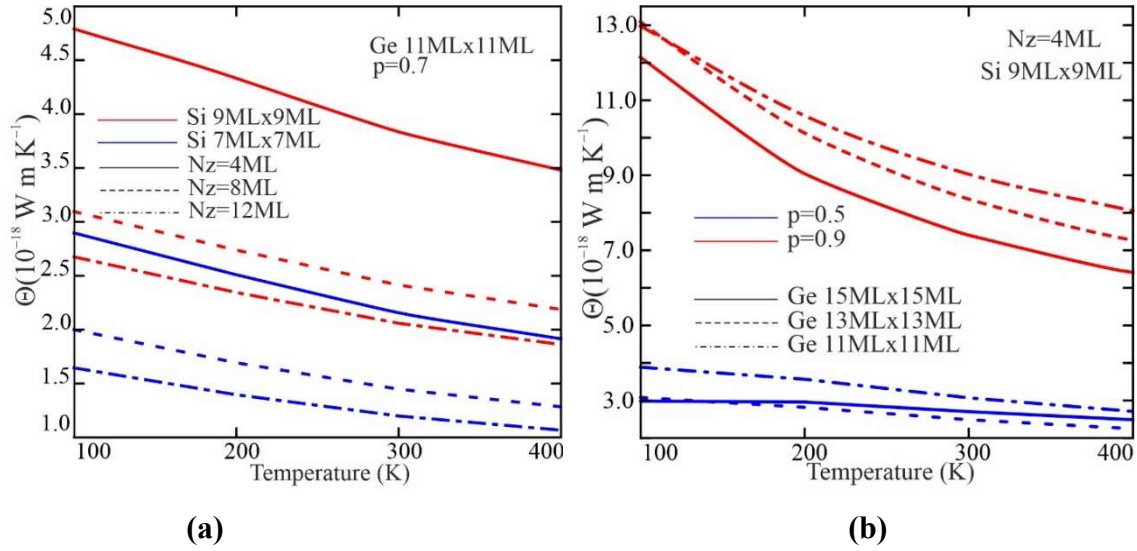


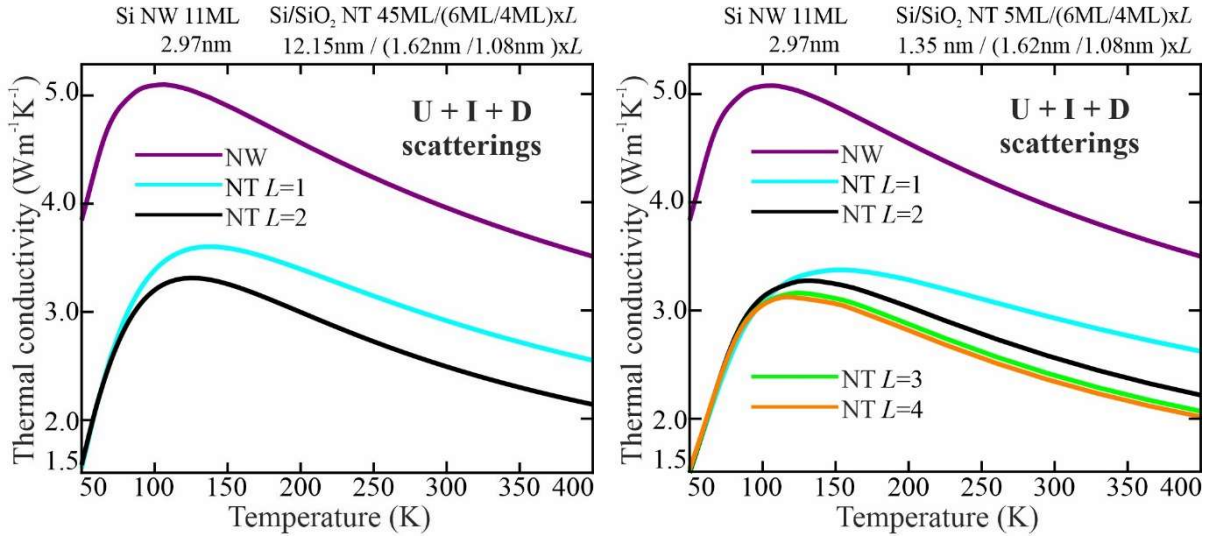
Fig. 6. Fluxul termic în 1D-M-SRPC de Si/Ge.

În Fig. 6 (b) sunt prezentate dependențele fluxului de căldură în 1D-M-SRPC de Si/Ge la valori fixe ale secțiunii transversale a PC de Si: $N_{x,1} = N_{y,1} = 9 \text{ ML}$, iar perioada de translație fiind $N_z = 4 \text{ ML}$. Valoarea secțiunii transversale a PC de Ge a variat: $N_{x,2} = N_{y,2} = 11 \text{ ML}, 13 \text{ ML}, 15 \text{ ML}$. Liniile roșii corespund valorii $p=0.9$, iar cele albastre — valorii $p=0.5$. Liniile continui se referă la 1D-M-SRPC cu secțiunea transversală a PC de Ge $N_{x,2} = N_{y,2} = 15 \text{ ML}$, liniile punctate — cu $N_{x,2} = N_{y,2} = 13 \text{ ML}$, iar liniile întrerupte și punctate — cu $N_{x,2} = N_{y,2} = 11 \text{ ML}$. Fluxul de căldură este mai intens în 1D-M-SRPC pentru $p=0.9$, decât pentru $p=0.5$ în cazul tuturor secțiunilor transversale ale PC de Ge, prezentate în desen. La valoarea parametrului de reflexie $p=0.9$, valorile mai mari ale fluxului de căldură corespund PC de Ge cu secțiune transversală mai mare din cauza creșterii numărului de mode fononice și a reducerii împrăstierii pe frontierele segmentelor. Curbele dependențelor la valoarea $p=0.5$ cu secțiunile transversale $N_{x,2} = N_{y,2} = 13 \text{ ML}$ și $N_{x,2} = N_{y,2} = 11 \text{ ML}$, se intersectează la temperatura de $\sim 120 \text{ K}$, deoarece în 1D-SRPC cu secțiune transversală mai

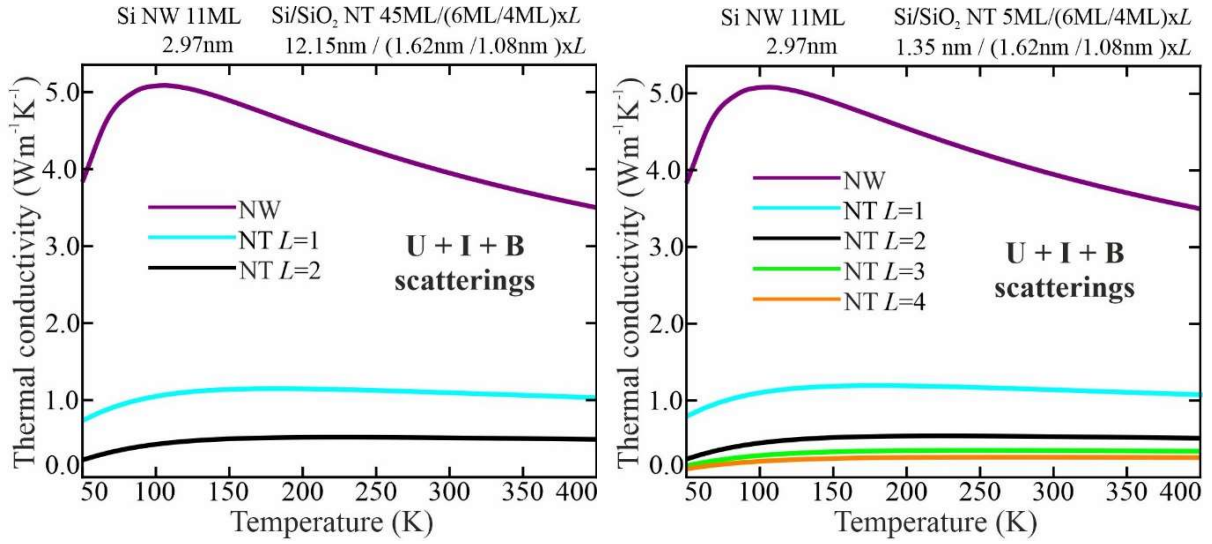
mare, contribuția împrăstierii pe frontiere și a transferului devine mai semnificativă în comparație cu creșterea numărului de moduri fononice.

Compararea conductibilității termice în NF de Si și în NTM Si/SiO₂ este prezentată în Fig. 7. Vitezele de grup medii ale fononilor în funcție de energia fononilor în NTM Si/SiO₂ cu secțiunea transversală a cavității nanotuburilor de siliciu/siliciu dioxid cu secțiune transversală a cavității 45ML×45ML și 5ML×5ML și un număr diferit de învelișuri bistrat de Si/SiO₂, formate din strat de Si cu grosimea de 6 ML și strat de SiO₂ cu grosimea de 4 ML. Pentru comparație sunt prezentate și rezultatele pentru NF de Si cu secțiunea transversală 11ML × 11ML. Rezultatele calculului conductibilității termice, prezentate în Fig. 7 (a-b), țin cont de transportul difuzional în SiO₂, în timp ce rezultatele prezentate în Fig. 7 (c-d) includ dispersia pe frontiere la un parametru de reflexie $p=0.6$. Valorile conductibilității termice în nanotuburi (inclusiv nanotuburile cu un număr mare de moduri fononice, vezi Fig. 7 (c)) sunt mai mici decât în NTM pe tot intervalul de temperaturi. Această micșorare a conductibilității termice în nanotuburi se datorează necorespunderii acustice dintre Si și SiO₂, redistribuirii densității de stări, ceea ce duce la scăderea vitezelor de grup a fononilor și datorită intensificării împrăstierii fononilor pe frontierele interfețelor.

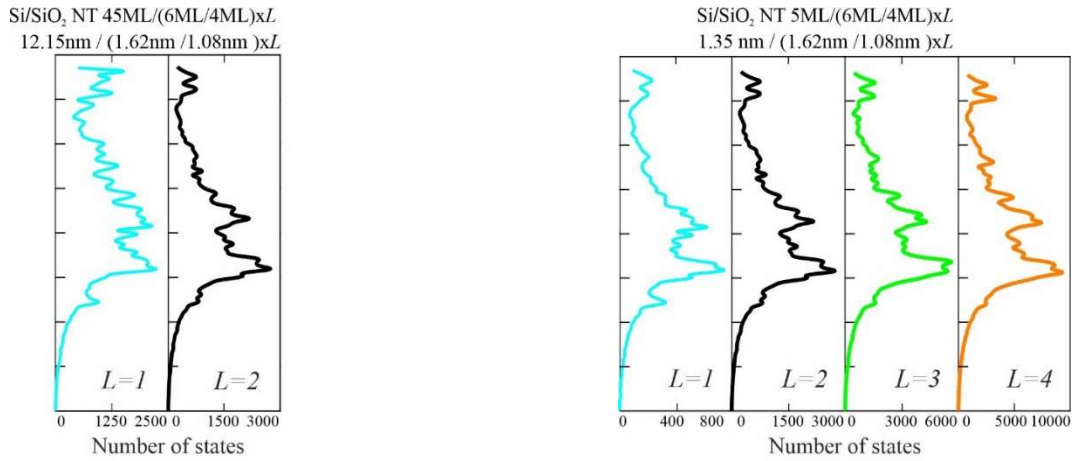
Abordarea mecanismului de împrăștiere pe frontiere în loc de mecanismul de dispersie amorfă duce la o reducere mai semnificativă a conductibilității termice datorită unui număr mare de interfețe în NTM, făcând ca mecanismul de împrăștiere pe frontiere să devină dominant. Conductibilitatea termică a nanotuburilor cu dimensiunea cavității 45ML×45ML este mai înaltă, decât a nanotuburilor cu cavitata de 5ML×5ML datorită unui număr mai mare de moduri fononice în prima structură. Interfețele suplimentare dintre învelișuri dispersează eficient fononii, ceea ce duce la o scădere a conductibilității termice la majorarea numărului de învelișuri (vezi panourile (b) și (c)), atingând aceleași valori scăzute de $0.2 \frac{W}{m \cdot K}$ la temperatura camerei, ca și în cazul nanotuburilor Si/SiO₂ cu cavitata mai mică, având un număr de învelișuri $L=4$. O dependență similară a conductibilității termice de numărul L de învelișuri a fost demonstrată experimental pentru nanotuburile Si/SiO₂ rulate, cu raze cuprinse între 1.9 μm și 3.2 μm și grosimea învelișului de 24 nm [48], vezi Fig. 7(g).



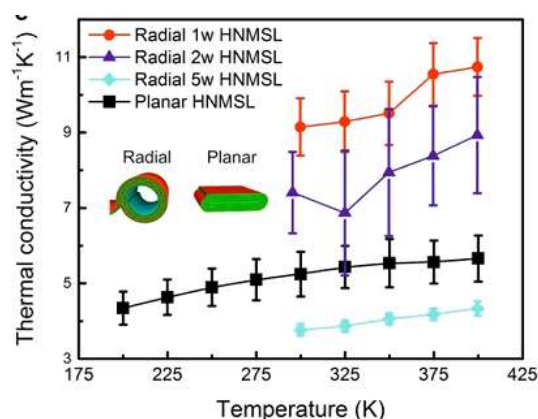
(a)-(b) Dispersia Umklapp și amorfă;



(c)-(d) Dispersia Umklapp și pe interfețe;



(e)-(f) Densitatea stărilor;



(g) Conductibilitatea termică în structurile rulate. Figura (g) este adoptată din Ref. [48]

Fig. 7. Conductibilitatea termică în NTM

CONCLUZII GENERALE ȘI RECOMANDĂRI

În cadrul lucrării de teză a fost efectuată o investigație detaliată a proprietăților excitonice, fononice și termice ale 1D-SRPC de Si/Ge, Si/SiC și Si/SiO₂, precum și a proprietăților fononice și termice ale NTM Si/SiO₂. Mai jos sunt prezentate rezumatele rezultatelor obținute:

1. Metoda masei efective a fost utilizată pentru investigarea teoretică a stărilor electronice, de gol și excitonice în 1D-SRPC de Si/Ge și Si/SiO₂ :
 - Se arată, că pentru o descriere calitativă a stărilor excitonice este important să se ia în considerație anisotropia maselor efective ale electronilor și golurilor, amestecarea golurilor grele, ușoare și de tip „split-off”, precum și amestecarea diferitelor stări electronice și de gol. Energiile excitonice ale PC din siliciu, calculate folosind Hamiltonianul cu trei zone al golurilor, se află în concordanță bună cu energiile excitonilor, obținute experimental;
 - S-a demonstrat, că ingineria eficientă a stărilor electronice, de gol și excitonice se realizează prin modificarea formei și dimensiunii PC în 1D-SRPC investigate, ceea ce este deosebit de important pentru aplicațiile optoelectronice și biomedicale ale acestor 1D-SRPC;
 - S-a constatat, că PC conice posedă valori mai mici ale energiei stării fundamentale a excitonului în comparație cu PC cubice și piramidale la volumul $V < 32 \text{ nm}^3$, iar pentru volumul $V > 32 \text{ nm}^3$, PC cubice demonstrează valori mai mici ale energiei stării fundamentale a excitonului;
 - Parametrii mediului extern influențează energia de bază a electronilor și golurilor doar pentru PC din siliciu cu învelișuri subțiri de SiC cu grosimea $< 1 \text{ nm}$, deoarece penetrarea

maximă a funcțiilor de undă ale golurilor și electronilor prin bariera de potențial a mediului în PC considerate Si/SiC/aer sau Si/SiC/apă, este de aproximativ 1 nm;

- S-a arătat de asemenea, că lărgirea semnificativă a liniilor de FL în PC Si/SiO₂ poate fi explicată prin dispersia dimensiunilor și formei PC.

2. Modelul oscilațiilor rețelei cu celulă cubică centrată pe suprafețe a fost aplicat pentru investigarea teoretică a modurilor fononice în 1D-SRPC Si/Ge și Si/SiO₂, precum și în NTM Si/SiO₂:

- S-a demonstrat teoretic, că modurile fononice în 1D-SRPC Si/Ge sunt capturate în segmentele lor din cauza neconcordanței acustice a materialelor. Înclinarea dispersiei fononilor în 1D-SRPC este mai mică decât în nanofirele din siliciu;
- S-a constatat, că multe moduri cu energie înaltă în 1D-SRPC Si/Ge sunt lipsite de dispersie și au viteze de grup foarte mici, apropiate de zero, ceea ce duce la excluderea acestor moduri din fluxul de căldură;

3. Ecuația de transport Boltzmann în aproximația perioadei de relaxare a fost utilizată pentru investigarea teoretică a proceselor termice în 1D-SRPC de siliciu și în NTM Si/SiO₂. Au fost luate în considerație toate mecanismele principale de împrăștiere a fononilor: dispersia triplă Umklapp a fononilor, dispersia pe impurități și pe frontiere:

- Se arată, că transportul de căldură în 1D-SRPC Si/Ge este semnificativ redus comparativ cu nanofirele de siliciu ori siliciul volumetric. Pentru 1D-SRPC Si/Ge cu secțiune transversală constantă (modulată) a fost demonstrată o micșorare a conductibilității termice de rețea de 7 ori (13,5 ori) în dependență de temperatură;
- La temperatura camerei, conductibilitatea termică în 1D-C-SRPC Si/Ge este de 2,6 - 2,9 ori mai mică decât cea în nanofirele de siliciu cu aceeași secțiune transversală;
- În 1D-M-SRPC Si/SiO₂ cu acoperire parțială, căldura se propagă numai prin canalul intern de siliciu, în timp ce în 1D-M-SRPC cu acoperire integrală ea se propagă atât de-a lungul canalului intern de siliciu, cât și de-a lungul canalului exterior de SiO₂. Ca rezultat, scăderea fluxului termic în 1D-M-SRPC Si/SiO₂ cu acoperire parțială este mai semnificativă decât în cazul 1D-M-SRPC cu acoperire completă: până la ~ 6,5 ori la temperatura camerei pentru M-SRPC cu acoperire parțială și de ~ 3,5 ori pentru M-SRPC cu acoperire totală;
- Conductibilitatea termică în NTM Si/SiO₂ este mai mică decât în nanofirele de siliciu cu aceeași secțiune transversală din cauza neconcordanței acustice a materialelor și a vitezelor de grup mai mici;

- Un număr mare de moduri fononice în NTM Si/SiO₂ se dispersează pe interfețele de separare Si/SiO₂. Ca rezultat, pentru NTM Si/SiO₂ cu L straturi, se prognozează o scădere a conductibilității termice de L ori într-un diapazon larg de temperaturi, cuprins între 50 K și 400 K, în comparație cu NT Si/SiO₂ cu un singur strat.

Pe baza concluziilor prezentate mai sus, se pot formula următoarele *recomandări*:

1. Pentru o descriere teoretică exactă a stărilor excitonice în 1D-SRPC Si/SiO₂, Si/SiC/aer și Si/SiC/apă, este deosebit de important să se ia în considerare amestecarea diferitelor stări electronice și de gol, precum și amestecarea diferitelor tipuri de goluri: grele, ușoare și de tip „split-off” (Hamiltonianul cu trei zone);
2. 1D-SRPC Si/Ge și Si/SiO₂, precum și NTM Si/SiO₂ pot fi recomandate ca potențiali candidați promițători pentru aplicațiile termoelectrice și de izolare termică, datorită conductibilității termice extrem de scăzute;
3. Ingineria stărilor excitonice și fononice ale 1D-SRPC, descrisă în teză, poate fi utilă pentru îmbunătățirea practică a parametrilor optici, termici și termoelectrics ai acestor supraprețele;
4. Dispersia dimensiunilor și formei PC poate fi un factor-cheie în interpretarea rezultatelor experimentale ale proceselor excitonice în PC de siliciu, cu dimensiuni de câțiva nanometri.

BIBLIOGRAFIE

- [1] STROSCIO, M.A., DUTTA, M. Phonons in nanostructures. Cambridge: Cambridge University Press, 2001. doi: 10.1017/CBO9780511534898.
- [2] RUNGE, E. Excitons in semiconductor nanostructures. In: *Solid State Physics*. 2003, vol. 57, pp. 149–305. DOI: 10.1016/S0081-1947(08)60180-0
- [3] WU, S., CHENG, L., WANG, Q. Excitonic effects and related properties in semiconductor nanostructures: roles of size and dimensionality. In: *Materials Research Express*. 2017 vol. 4, p. 085017. DOI: 10.1088/2053-1591/aa81da
- [4] SCHOLLES, G. D., RUMBLES, G. Excitons in nanoscale systems. In: *Nature Materials*. 2017, vol. 5, no. 9, pp. 683–696. DOI: 10.1038/nmat1710
- [5] BALANDIN, A., POKATILOV, E., NIKA, D. Phonon engineering in hetero- and nanostructures. In: *Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics*. 2007, vol. 2, pp. 140–170. DOI: 10.1166/jno.2007.201
- [6] BALANDIN, A.A., NIKA, D.L. Phononics in low-dimensional materials. In: *Materials Today*. 2012, vol. 15, 266 – 275. DOI: 10.1016/S1369-7021(12)70117-7.
- [7] HU, M., GIAPIS, K. P., GOICOCHEA, et al. Significant reduction of thermal conductivity in Si/Ge core-shell nanowires. In: *Nano Letters*. 2011, vol. 11, pp. 618–623. DOI: 10.1021/nl103718a.
- [8] WINGERT, M. C., CHEN, Z.C.Y., DECHAUMPAI, E., et al. Thermal conductivity of Ge and Ge–Si Core–shell nanowires in the phonon confinement regime. In: *Nano Letters*. 2011, vol. 11, pp. 5507–5513. DOI: 10.1021/nl203356h

- [9] LIANG, J., HUANG, C., GONG, X., Silicon nanocrystals and their composites: syntheses, fluorescence mechanisms, and biological applications. In: *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*. 2019, vol. 7, pp. 18213–18227. DOI: 10.1021/acssuschemeng.9b04359
- [10] SUN, W., QIAN, C., CHEN, K.K., et al. Silicon nanocrystals: it's simply a matter of size. In: *ChemNanoMat*. 2016, vol. 2, pp. 847–855. DOI: 10.1002/cnma.201600151.
- [11] GONZÁLEZ-FERNÁNDEZ, A.A., ACEVES-MIJARES, M., PÉREZ-DÍAZ, O., et al. Embedded silicon nanoparticles as enabler of a novel CMOS-compatible fully integrated silicon photonics platform. In: *Crystals*. 2021, vol. 11, p. 630. DOI: 10.3390/cryst11060630
- [12] NIKZAMIR, M., AKBARZADEH, A., PANAHI, Y. An overview on nanoparticles used in biomedicine and their cytotoxicity. In: *Journal of Drug Delivery Science and Technology*. 2021, vol. 61, p. 102316. DOI: 10.1016/j.jddst.2020.102316
- [13] ZHIGUNOV, D.M., SEMINOGOV, V.N., TIMOSHENKO, V.Yu., et al. Effect of thermal annealing on structure and photoluminescence properties of silicon-rich silicon oxides. In: *Physica E*. 2009, vol. 41, pp. 1006-1009. DOI: 10.1016/j.physe.2008.08.026
- [14] GUHA, S., QADRI, S.B., MUSKET, R.G., et al. Characterization of Si nanocrystals grown by annealing SiO₂ films with uniform concentrations of implanted Si. In: *Journal of Applied Physics*. 2000, vol. 88, pp.3954-3961. DOI: 10.1063/1.1308096
- [15] LI, B., LIN, L., LIN, H., et al. Photosensitized singlet oxygen generation and detection: Recent advances and future perspectives in cancer photodynamic therapy. In: *Journal of Biophotonics*. 2016, vol. 9, pp. 1314–1325. DOI: 10.1002/jbio.201600055
- [16] QIAN, X., ZHOU, J., Chen, G. Phonon-engineered extreme thermal conductivity materials. In: *Nature Materials*. 2021, vol. 20, p. 1188–1202. DOI: 10.1038/s41563-021-00918-3
- [17] HOSSEINI, S.A., KHANNICHE, S., GREANEY, P. A., et al. In: Universal effective medium theory to predict the thermal conductivity in nanostructured materials. In: *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2022, vol. 183, p. 122040. DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2021.122040.
- [18] NIKA, D. L. *Phonon engineering in graphene and semiconductor nanostructures*. CEP USM, Chişinău, 2015. 183 p.
- [19] ЗИНЧЕНКО, Н.Д. *Управление транспортными свойствами наноструктур методами фононной инженерии*: дис. д-ра физико-математических наук. CEP USM, Chişinău. 2010, p.135.
- [20] PERNOT, G., STOFFEL, M., SAVIC, I. et al. Precise control of thermal conductivity at the nanoscale through individual phonon-scattering barriers. In: *Nature Materials*. 2010, vol. 9, pp. 491-495. DOI: 10.1038/nmat2752
- [21] HOCHBAUM, A.I., CHEN, R., DELGADO R.D., et al. Enhanced thermoelectric performance of rough silicon nanowires. In: *Nature*. 2008, vol. 451, pp. 163-167. DOI: 10.1038/nature06381
- [22] CRISMARI, D.V., NIKA, D.L. Thermal conductivity reduction in Si/Ge core/shell nanowires. In: *Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics*. 2012, vol. 7, pp. 701–705. DOI: 10.1166/jno.2012.1421

- [23] NIKA, D.L., COCEMASOV, A.I., CRISMARI, D.V., et al. Thermal conductivity inhibition in phonon engineered core-shell cross-section modulated Si/Ge nanowires. In: *Applied Physics Letters*. 2013, vol. 102, p. 213109. DOI: 10.1063/1.4807389
- [24] NIKA, D.L., COCEMASOV, A., ISACOVA C., et al. Suppression of phonon heat conduction in cross-section modulated nanowires. In: *Physical Review B*. 2012, vol. 85, p. 205439. DOI: 10.1103/PhysRevB.85.205439
- [25] NIKA, D.L., POKATILOV, E.P., BALANDIN, A.A., et al., Reduction of lattice thermal conductivity in one-dimensional quantum-dot superlattices due to phonon filtering. In: *Physical Review B*. 2011, vol. 84, p. 165415. DOI: 10.1103/PhysRevB.84.165415
- [26] COCEMASOV, A.I., NIKA, D.L., V. M. FOMIN, et al. Phonon-engineered thermal transport in Si wires with constant and periodically modulated cross-sections: A crossover between nano- and microscale regimes. In: *Applied Physics Letters*. 2015, vol. 107, p. 011904. DOI: 10.1063/1.4926401
- [27] FOMIN, V.M., NIKA, D.L., COCEMASOV, A.S., et al. Strong reduction of the lattice thermal conductivity in superlattices and quantum dot superlattices. In: *AIP Conf. Proc., Saloniki, Greece*. 2012, vol. 1449, pp. 33–36. DOI: 10.1063/1.4731490
- [28] ИСАКОВА, К., Падение фононной теплопроводности в сегментированных Si/Ge нанонитях. In: *Studia Universitatis Moldaviae, Seria Științe exacte și economice*. 2015, vol. 2 (82), pp. 65–71. ISSN 1857-2073
- [29] DAVIDSON, E.R., THOMPSON, W.J., Monster matrices: their eigenvalues and eigenvectors. In: *Computers in Physics*. 1993, vol. 7, pp. 519-522. DOI: 10.1063/1.4823212
- [30] NIKA, D., POKATILOV, E., A. ASKEROV, et al. Phonon thermal conduction in graphene: role of Umklapp and edge roughness scattering. In: *Physical Review B*. 2009, vol. 79, p. 155413. DOI: 10.1103/PhysRevB.79.155413
- [31] MINGO, N. Calculation of Si nanowire thermal conductivity using complete phonon dispersion relations. In: *Physical Review B*. 2003, vol. 68, p. 113308. DOI: 10.1103/PhysRevB.68.113308
- [32] NIKA, D.L., ZINCENCO, N.D., POKATILOV, E.P. Lattice thermal conductivity of ultra-thin freestanding layers: Face-centered cubic cell model versus Continuum Approach. In: *Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics*. 2009, vol. 4, p. 170-173. DOI: 10.1166/jno.2009.1018
- [33] VOLZ, S.G., CHEN, G. Molecular dynamics simulation of thermal conductivity of silicon nanowires. In: *Applied Physics Letters*. 1999, vol. 75, pp. 2056-2058. DOI: 10.1063/1.124914
- [34] POKATILOV, E., NIKA, D., FOMIN, V. et al. Excitons in wurtzite AlGaIn/GaN quantum-well heterostructures. In: *Physical Review B*. 2008, vol. 77, p. 125328. DOI: 10.1103/PhysRevB.77.125328
- [35] QIU, B., RUAN, X. Molecular dynamics simulations of lattice thermal conductivity of bismuth telluride using two-body interatomic potentials. In: *Physical Review B*. 2009, vol. 80, p. 165203. DOI: 10.1103/PhysRevB.80.165203
- [36] LADD, A.J.C., MORAN, B., HOOVER, W.G. Lattice thermal conductivity: A comparison of molecular dynamics and anharmonic lattice dynamics. In: *Physical Review B*. 1986. vol. 34, p. 5058. DOI: 10.1103/PhysRevB.34.5058

- [37] WARD, A., BROIDO, D.A. Intrinsic phonon relaxation times from first-principles studies of the thermal conductivities of Si and Ge. In: *Physical Review B*. 2010, vol. 81, p. 085205. DOI: 10.1103/PhysRevB.81.085205
- [38] NIKA, D.L., ZINCENCO, N.D., POKATILOV, E.P. Engineering of thermal fluxes in phonon mismatched heterostructures. In: *Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics*. 2009, vol. 4, pp. 180-185. DOI: 10.1166/jno.2009.1020
- [39] TIMOSHENKO, V. Yu., LISACHENKO, M.G., KAMENEV, B.V., et al. Highly efficient sensitizing of erbium ion luminescence in size-controlled nanocrystalline Si/SiO₂ superlattice structures. In: *Applied Physics Letters*. 2004, vol. 84, pp. 2512-2514. DOI: 10.1063/1.1690465
- [40] TIMOSHENKO, V. Yu., LISACHENKO, M.G., SHALYGINA, O.A., et al. Comparative study of photoluminescence of undoped and erbium-doped size-controlled nanocrystalline Si/SiO₂ multilayered structures. In: *Journal of Applied Physics*. 2004, vol. 96, pp. 2254–2260. DOI: 10.1063/1.1773383
- [41] POKATILOV, E.P., FONOBEROV, V. A., FOMIN, V. M., et al. Development of an eight-band theory for quantum dot heterostructures. In: *Physical Review B*. 2001, vol. 64, p. 245328. DOI: 10.1103/PhysRevB.64.245328
- [42] MOSKALENKO, A. S., BERAHDAR, J., et al. Single-particle states in spherical Si/SiO₂ quantum dots. In: *Physical Review B*. 2007, vol. 76, p. 085427. DOI: 10.1103/PhysRevB.76.085427
- [43] LEDOUX, G., GONG, J., HUISKEN, F., et al. Photoluminescence of size-separated silicon nanocrystals: Confirmation of quantum confinement. In: *Applied Physics Letters*. 2002, vol. 80, pp. 4834-4836. DOI: 10.1063/1.1485302
- [44] WATANABE, K., FUJII, M., HAYASHI, S. Resonant excitation of Er³⁺ by the energy transfer from Si nanocrystals. In: *Journal of Applied Physics*. 2001, vol. 90, pp. 4761-4767. DOI: 10.1063/1.1409572
- [45] ISACOVA, C., COCEMASOV, A., NIKA, D.L., et al. Phonons and thermal transport in Si/SiO₂ multishell nanotubes: atomistic study. In: *Applied Sciences*. 2021, vol. 11(8), p. 3419. DOI: 10.3390/app11083419
- [46] COCEMASOV, A.I., ISACOVA, C. I., NIKA, D.L. Thermal transport in semiconductor nanostructures, graphene, and related two-dimensional materials. In: *Chinese Physics B*. 2018, vol. 27(5), p. 056301. DOI: 10.3390/app11083419
- [47] ИСАКОВА, К., ЗИНЧЕНКО, Н., НИКА, Д. Фононные моды и решеточная теплопроводность в сегментированных нанонитях и в нанонитях покрытых оболочкой. In: *Progrese în fizica teoretică*, CEP USM. Chişinău: CANȚER, V.; PALADI, F.; NICA, D., 2016, pp. 325–357. ISSN: 978-9975-71-817-2
- [48] LI, G., YARALI, M., COCEMASOV, A., et al. In-plane thermal conductivity of radial and planar Si/SiO_x hybrid nanomembrane superlattices. In: *ACS Nano*. 2017, vol. 11, pp. 8215–8222. DOI: 10.1021/acsnano.7b03219

LISTA PUBLICAȚIILOR LA TEMA TEZEI

Rezultatele prezentate în teză sunt publicate în 4 articole în reviste ISI Web of science/SCOPUS și 4 articole în presa națională. Două articole sunt fără co-autori.

Articole în reviste științifice

1. NIKA, D.L., COCEMASOV, A.I., **ISACOVA, C.I.**, BALANDIN, A.A., FOMIN, V.M., SCHMIDT, O.G. Suppression of phonon heat conduction in cross-section-modulated nanowires. In: *Physical Review B*. 2012, vol. 85, p. 205439. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.205439>
2. **ISACOVA, C.**, COCEMASOV, A., NIKA D. L., FOMIN, V. M. Phonons and thermal transport in Si/SiO₂ multishell nanotubes: atomistic study. In: *Appl. Sci.* 2021, vol. 11(8), p. 3419. DOI: 10.3390/app11083419
3. COCEMASOV, A.I., **ISACOVA, C.I.**, NIKA, D.L. Thermal transport in semiconductor nanostructures, graphene, and related two-dimensional materials. In: *Chinese Physics B*. 2018, vol. 27(5), p. 056301. DOI: 10.1088/1674-1056/27/5/056301
4. FOMIN, V.M.; NIKA, D.L.; COCEMASOV, A.I.; **ISACOVA, C.I.**; SCHMIDT, O.G. Strong reduction of the lattice thermal conductivity in superlattices and quantum dot superlattices. In: *AIP Conference Proceedings*. 2012, vol. 1449, p. 33-36. DOI: 10.1063/1.4731490
5. **ИСАКОВА, К.** Падение фононной теплопроводности в сегментированных Si/Ge нанонитях. In: *Studia Universitatis. Seria științe exacte și economice*. 2015, nr. 2 (82), pp. 65-71. ISSN 1857-2073.
6. **ИСАКОВА, К.** Электронные, дырочные и экситонные состояния в кремниевых квантовых точках, помещенных в диэлектрическую среду оксида кремния. In: *Studia Universitatis Moldaviae. Seria științe exacte și economice*. 2011, nr. 7 (47), pp. 66-72. ISSN 1857-2073
7. **ИСАКОВА, К.**, НИКА, Д., ПОКАТИЛОВ, Е. Экситонные состояния в квантовых точках Si/SiO₂. In: *Studia Universitatis Moldaviae. Seria Științe Reale și ale Naturii*. 2008, nr. 2(12), pp. 232-236. ISSN 1814-3237
8. **ИСАКОВА, К.**, НИКА, Д., АСКЕРОВ, А., ЗИНЧЕНКО, Н., ПОКАТИЛОВ, Е. Исследование кулоновского взаимодействия в квантовой точке Si/SiO₂. In: *Studia Universitatis Moldaviae. Seria Științe Reale și ale Naturii*. 2007, nr. 7, pp. 280-284. ISSN 1814-3237

Rezumate ale comunicărilor științifice

1. **ИСАКОВА, К.**, КОЧЕМАСОВ, А., НИКА, Д. Фононная инженерия в одномерных наноструктурах. In: *Rezumatele ale comunicărilor, Științele exacte, Științele ale naturii Conferința științifică națională cu participare internațională „Integrare prin cercetare și inovare”*, 10-11 Noiembrie, 2022. Chișinău, Moldova, pp. 293-296. ISBN 978-9975-152-48-8.
2. **ИСАКОВА, К.**, КОЧЕМАСОВ, А., НИКА, Д. Фононная инженерия в нанонитях и нанотрубках на основе кремния. In: *Rezumatele ale comunicărilor, Științele exacte, Științele ale naturii Conferința științifică națională cu participare internațională „Integrare prin Cercetare și Inovare”, dedicată aniversării a 75-a a Universității de Stat din Moldova*, 10-11 noiembrie, 2021. Chișinău, Moldova, pp. 194-196. ISBN 978-9975-152-48-8.

3. **ISACOVA, C.**, COCEMASOV, A., NIKА, D., FOMIN, V. Thermal transport in Si/SiO₂ nanoshell nanotubes. In: *CMD2020GEFES, European Physical Society*, 31 August – 4 September, 2020 (online): https://www.cmd2020gefes.eu/_files/_event/_28512/_editorFiles/file/Scientific%20Program_CMD2020GEFES.pdf.
4. **ISACOVA, C.I.**, COCEMASOV, A.I., NIKА, D.L., SCHMIDT, O.G., FOMIN, V.M. Phonon modes and thermal conductivity in Si/SiO₂ multishell nanotubes. In: *DPG Spring Meeting*, 31 March – 05 April, 2019, Regensburg, Germany, DS 10.3.
5. **ISACOVA, C.I.**, COCEMASOV, A.I., NIKА, D.L. Suppression of the thermal flux in Si/Ge and Si/SiO₂ crosssection modulated nanowires. In: *Book of abstracts of the 4th Central and Eastern European Conference on Thermal Analysis and Calorimetry (CEEC-TAC4)*. 28–31 August 2017. Chisinau, Moldova, p. 84. ISBN 978-9975-9787-1-2.
6. **ИСАКОВА, К.Я.**, КОЧЕМАСОВ, А.И., НИКА, Д.Л. Зависимость теплопроводности сегментированных нанонитей на основе кремния от их геометрии и физических параметров материалов. In: *Abstract book of the 18-th International Conference “Modern information and electronic technologies”*, 22-26 May, Odessa, Ukraine, 2017, pp. 69-70. ISSN: 2308-8060
7. **ИСАКОВА, К.** Падение теплопроводности в сегментированных Si/Ge нанонитях с переменным сечением. In: *Rezumatele ale comunicărilor, Științele exacte, Științele ale naturii Conferința științifică națională cu participarea internațională „Integrarea prin cercetare și inovare”*, 9-10 Noiembrie, 2017, Chișinău, Moldova, pp. 232-236. ISBN 978-9975-71-701-4
8. **ISACOVA, C.I.**, COCEMASOV, A.I., NIKА, D.L. Strong suppression of the lattice thermal conductivity in silicon-based segmented nanowires. In: *Abstracts of the 8th Int. Conf. on Materials Science and Condensed Mater Physics, MSCMP 2016*, September 12-16, 2016, Chisinau, Moldova, p. 202. ISBN 978-9975-9787-1-2.
9. **ISACOVA, C.**, COCEMASOV, A., NIKА, D. Suppression of phonon heat conduction in cross-section, modulated nanowires. In: *Book of Abstracts of the 3rd International Conference on Nanotechnologies and Biomedical Engineering*, September 23-26, 2015, Chisinau, Moldova, S1-P.51. ISBN: 978-981-287-735-2
10. **ISACOVA, C.**, COCEMASOV, A., NIKА, D. Suppression of phonon heat conduction in cross-section modulated nanowires. In: *Rezumatele ale comunicărilor, Științele exacte, Științele ale naturii Conferința științifică națională cu participarea internațională „Integrarea prin cercetare și inovare”*, 10-11 Noiembrie, 2015, Chișinău, Moldova, pp. 147-148. ISBN: 978-9975-74-705-2
11. **ИСАКОВА, К.Я.**, НИКА, Д.Л. Теплопроводность сегментированных Si/Ge нанонитей. In: *Труды 14-ой Международной научно-практической конференции «Современные информационные и электронные технологии»*. Май, 27-31, 2013, Одесса, Украина pp. 158-159. ISBN 978-966-2666-04-5
12. **ИСАКОВА, К.** Экситонные и фотолуминесцентные свойства кремниевых квантовых точек. In: *Rezumatele ale comunicărilor Conferinței științifice cu participare internațională “Interferențe universitare – integrare prin cercetări și inovare”*, Septembrie 25-26, 2012, Chișinău, Moldova, p.154-156. ISBN: 978-9975-71-267-5
13. **ISACOVA, C.I.**, COCEMASOV, A.I., NIKА, D.L., BALANDIN, A.A., FOMIN, V.M., SCHMIDT, O.G. Reduction of thermal conductivity in cross-section modulated silicon nanowires. In: *Conference Proceedings of the “Modern information and electronic technologies”*, June 4-8, 2012, Odessa, Ukraine, p. 295.

14. FOMIN, V.M., NIKA, D.L., COCEMASOV, A.I., **ISACOVA, C.I.**, CRISMARI, D.V., BALANDIN, A.A., Schmidt, O.G. Phonon heat conduction in one-dimensional quantum-dot superlattices and cross-section modulated nanowires. In: *2012 EMN Open Access Week*, October 22-24, 2012, Chengdu, China, p. 39-40.
15. NIKA, D.L., COCEMASOV, A.I., **ISACOVA, C.I.**, CRISMARI, D.V., BALANDIN, A.A., FOMIN, V.M., SCHIMDT, O.G. Suppression of phonon heat conduction in undulated nanowires. In: *76th Annual Meeting of the DPG and DPG Spring Meeting*, March 25-30, 2012, Berlin, Germany, DS 33.4.
16. **ИСАКОВА, К.Я.**, КОЧЕМАСОВ, А.И. Падение решёточной теплопроводности в нанонитях переменного сечения. In: *Материалы XIX международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов»*, 9-13 апреля, 2012, Москва, Россия, Секция «Физика», Подсекция «Физика твердого тела», с. 46. https://lomonosov-msu.ru/archive/Lomonosov_2012/1880/29294_c41c.doc. ISBN: 978-5-317-04041-3
17. **ISACOVA, C.I.A.**, NIKA, D.L., POKATILOV, E.P. Exciton states of Si quantum dots. In: *Proceedings of the XIth International Young Scientists' Conference on Applied Physics*, June 15-18, 2011, Kyiv, Ukraine, pp. 117-118.
18. **ИСАКОВА, К.Я.** Экситонные состояния в кремниевых точках. In: *Материалы XVIII международной научной конференции студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов»*, 11-15 апреля, 2011, Москва, Россия, Секция «Физика» Подсекция «Физика твердого тела», с. 19-20. ISBN 978-5-317-03634-8
19. NIKA, D.L., ZINCENCO, N.D., **ISACOVA, C.I.A.**, POKATILOV, E.P., FOMIN, V.M., BALANDIN, A.A. Ultra-low lattice thermal conductivity of one-dimensional quantum dot Si/Ge superlattices. In: *Book of Abstracts of the 5th International Conference on Material Science and Condensed Matter Physics*, 13–17 September, 2010, Chişinău, Moldova, p. 206. ISBN 978-9975-66-190-4
20. **ИСАКОВА, К.Я.**, НИКА, Д.Л., ПОКАТИЛОВ, Е.П. Экситонные состояния в квантовых точках кристаллов кремния, помещенных в водную и воздушную среду. In: *Труды 11-ой международной научно-практической конференции «Современные информационные и электронные технологии»*, 24–28 Мая, 2010, Одесса, Украина, часть 2, p. 103.
21. **ИСАКОВА, К.**, НИКА, Д., ПОКАТИЛОВ, Е. Экситонные состояния и полосы фотолюминесценции в Si-квантовых точках в диэлектрической матрице SiO₂. In: *VIII-th Scientific Abstracts of the International conference of young researchers*, 5-6 November 2009, Chisinau, Moldova, p. 91. ISBN 978-9975-62-196-0.
22. **ИСАКОВА, К.**, ПОКАТИЛОВ, Е., НИКА, Д., ТИМОШЕНКО, В. Экситонные состояния в кремниевых точках. In: *Proceedings of conference of Moldovan physicists*, 26-28 November 2009, Chisinau, Moldova, p.143.
23. **ISACOVA, C.I.A.**, NIKA, D.L., POKATILOV, E.P. Exciton states in Si quantum dots imbedded into SiO₂ dielectric matrix. In: *Труды 10-ой международной научно-практической конференции «Современные информационные и электронные технологии»*, 18–22 May, 2009, Ukraine, Odessa, часть 2, p. 103.
24. **ИСАКОВА, К.Я.**, НИКА, Д.Л., ПОКАТИЛОВ, Е.П. Экситонные состояния и полосы фотолюминесценции в Si – квантовых точках в диэлектрической матрице SiO₂. In: *Тезисы докладов XVII Республиканской научной конференции аспирантов, магистрантов и студентов «Физика Конденсированного Состояния»*, 16 – 17 Апреля, 2009, Гродно, Беларусь, pp. 114 – 115. ISBN 978-985-515-135-8

25. **ISACOVA, C.**, NIKА, D., POKATILOV, E. Exciton states in Si quantum dots imbedded into the dielectric matrix. In: *Scientific abstracts of International conference of young researchers*, 6-7 November, 2008, Chişinău, Republic of Moldova, p. 113. ISBN 978-9975-62-196-0
26. **ISACOVA, C.**, NIKА D., POKATILOV, E. Exciton states in Si quantum dots imbedded into SiO₂ dielectric matrix. In: *Abstracts of the 4th International Conference "Material Science and Condense Matter Physics"*, 23-25 September, 2008, Chisinau, Republic of Moldova, p. 218.
27. **ISACOVA, C.IA.**, NIKА, D.L., POKATILOV, E.P. Development of charge-carriers states theory for Si quantum dots. In: *Труды 9-ой международной научно-практической конференции «Современные информационные и электронные технологии»*, 19-23 Мая, 2008, Одесса, Украина, часть 2, p. 106.
28. **ISACOVA, C.Ia.**, NIKА, D.L., POKATILOV, E.P. Development of charge-carriers states theory for Si quantum dots. In: *Тезисы докладов XVI Республиканской научной конференции аспирантов, магистрантов и студентов «Физика Конденсированного Состояния»*, 23-25 April, 2008, Гродно, Беларусь, часть 2, pp. 116-117. ISBN 978-985-515-102-0
29. **ISACOVA, C.**, NIKА, D., POKATILOV, E. Exciton states in rectangular Si quantum dots, Scientific abstracts, In: *Scientific abstracts of international conference of young researchers*, November, 9, 2007, Chisinau, Moldova, p. 123. ISBN 978-9975-62-196-0
30. NIKА, D., POKATILOV, E., **ISACOVA, C.**, TIMOSHENKO, V. Electron and hole states in Si quantum dots imbedded into dielectric medium: Role of the quantum dot shape and size. In: *Proceedings of conference of Moldovan physicists*, 11-12 October, 2007, Chisinau, Moldova, p. 17.
31. NIKА, D., POKATILOV, E., **ISACOVA, C.** Charge-carriers states in Si quantum dots with rectangular, conical and tetrahedral shapes. In: *Scientific abstracts of international conference of young researchers*, November, 9, 2007, Chisinau, Moldova, p. 125. ISBN 978-9975-62-196-0
32. **ISACOVA, C.**, NIKА, D., ZINCENCO, N., POKATILOV, E. Exciton states in rectangular Si quantum dots. In: *Conference Proceedings of the Second annual international conference of young scientists "Computer Science and Engineering - 2007"*, 4-6 October, 2007, Lviv, Ukraine, p.231-233

ADNOTARE

Isacova Calina,

teza „Proprietățile electronice și fononice ale nanostructurilor formate din puncte cuantice” pentru conferirea titlului de doctor în științe fizice, specialitatea 131.04 *Fizica computațională și modelarea proceselor*, elaborată în laboratorul de cercetări științifice „Fizica și ingineria nanomaterialelor „E. Pokatilov” al Universității de Stat din Moldova, or. Chișinău, R. Moldova, în anul 2023.

Structura lucrării: Lucrarea este formată din Introducere, trei capitole, Concluzii generale și Recomandări, Bibliografie din 157 titluri, 145 pagini, 79 figuri, 53 formule și 1 tabel. Rezultatele obținute în teză au fost publicate în 8 articole științifice și au fost prezentate la 32 conferințe științifice internaționale și naționale.

Cuvinte-cheie: suprarețea unidimensională, Hamiltonian multizonal, exciton, fonon, conductibilitate termică.

Scopul și obiectivele: cercetarea influenței parametrilor materiali și geometrici ai suprarețelor unidimensionale din puncte cuantice (1D-SRPC) Si/SiO₂ și Si/SiC asupra proprietăților electronice, de gol și excitonice; dezvoltarea modelului „face-centred cubic cell” al oscilațiilor rețelei cristaline pentru studierea proprietăților fononice și termoconductibile ale 1D- SRPC Si/Ge și Si/SiO₂, cât și a nanotuburilor multistrat (NTM) Si/SiO₂.

Noutatea științifică și originalitatea: Se arată, că descrierea cantitativă a stărilor excitonice în SRPC cercetate necesită utilizarea Hamiltonianului multizonal al golurilor, care permite de a ține cont de amestecarea golurilor grele, ușoare și de tip „split-off”; s-a stabilit faptul, că conductibilitatea termică a 1D-SRPC și NTM cercetate este semnificativ mai joasă decât a nanofirelor corespunzătoare datorită efectului de captare a modele fononice și împrăștierea fononilor pe suprafețele interioare ale structurilor.

Problema științifică soluționată: au fost teoretic studiate detaliat proprietățile excitonice, fononice și termoconductibile ale 1D-SRPC Si/SiO₂ și Si/SiC, cât și transportul de căldură în NTM Si/SiO₂.

Valoarea teoretică: au fost dezvoltate modelele teoretice ale stărilor excitonice și fononice în 1D-SRPC și NTM.

Valoarea aplicativă a lucrării: implementarea practică a rezultatelor obținute va contribui la apariția unei clase noi de nanomateriale, având perspective promițătoare în aplicațiile optoelectronice, termoelectrice și de izolare termică.

SUMMARY

**Isacova Calina, “Exciton and phonon properties in quantum dot nanostructures”,
Ph. D. thesis in physics,
speciality 131.04 *Computational physics and modelling of processes*, was elaborated
in “E. Pokatilov laboratory of physics and engineering of nanomaterials”, Moldova
State University, Chişinău, R. Moldova, 2023.**

Work structure. The Thesis consists of an Introduction, 3 Chapters, General conclusions and recommendations, 157 references, 145 pages, 79 figures, 53 equations, and 1 table. The results presented in the work are published in 8 scientific articles and presented at 32 international and national conferences.

Keywords: one-dimensional quantum dot superlattice, multi-band Hamiltonian, exciton, phonon, thermal conductivity

Goals and objectives: the study of material and geometrical parameters’ influence on electronic, holes’, and excitonic properties in one-dimensional quantum dot superlattice (1D-QDSL) Si/SiO₂ and Si/SiC; development of face-centred cubic cell (FCC) lattice dynamic model for studying phonon and thermal properties in Si/Ge and Si/SiO₂ 1D-QDSL, as well as in Si/SiO₂ multishell nanotube (MNT)

Scientific novelty and originality: it was demonstrated, that three-band Hamiltonian for holes, which takes into account the mixing of the heavy, light, and split-off holes’ states, is required for more accurate quantitative description of exciton states in 1D-QDSL; it was theoretically shown that thermal conductivity of the Si-based 1D-QDSL and Si/SiO₂ MNT is significantly lower than that in corresponding silicon nanowires due to the trapping of phonon modes in nanostructure’s segments and phonon scattering at interfaces of the QDSL.

Solved scientific problem: it has been carried out a detailed theoretical study of the exciton, phonon and thermal properties in the Si/Ge, Si/SiC and Si/SiO₂ QDSLs as well as of phonon and thermal properties in the Si/SiO₂ MNTs

Theoretical importance is related to development of the theoretical model of the exciton and phonon states in 1D-QDSLs

Practical significance: practical implementation of the obtained results may lead to the appearance of new nanomaterials promising for optoelectronic, thermoelectric and thermal insulating applications

АННОТАЦИЯ

Исакова Калина, диссертация «Экситонные и фононные свойства квантовоточечных наноструктур» на соискание ученой степени доктора физических наук по специальности 131.04 *Вычислительная физика и моделирование процессов*, выполненная в лаборатории «Физика и инженерия наноматериалов имени Е. Покатилова» Государственного университета Молдовы, г. Кишинев, Р. Молдова, в 2023 году.

Структура работы: Работа состоит из Введения, трех глав, Общих выводов и рекомендаций, Библиографии из 157 названий, 145 страниц, 79 рисунков, 53 формул и 1 таблицы. Полученные результаты опубликованы в 8 научных работах и представлены на 32 международных и национальных конференциях.

Ключевые слова: одномерная сверхрешетка, многозонный гамильтониан, экситон, фононы, теплопроводность

Цели и задачи: исследование влияния материальных и геометрических параметров одномерных квантовоточечных сверхрешеток (1D-KTCP) Si/SiO₂ и Si/SiC на электронные, дырочные и экситонные свойства; развитие «face-centred cubic cell» модели колебаний кристаллической решетки для изучения фононных и теплопроводящих свойств одномерных квантовоточечных сверхрешеток Si/Ge и Si/SiO₂, а также многослойных нанотрубок (МНТ) Si/SiO₂.

Научная новизна и оригинальность: показано, что для количественного описания экситонных состояний в рассматриваемых 1D-KTCP необходимо использовать многозонный дырочный гамильтониан, который позволяет учесть перемешивание тяжелых, легких и «split-off» дырок; установлено, что теплопроводность 1D-KTCP и МНТ значительно ниже теплопроводности соответствующих нанонитей благодаря эффекту захвата фононных мод в сегментах этих наноструктур и рассеянию фононов на внутренних интерфейсах

Решенная научная задача: проведено подробное теоретическое изучение экситонных, фононных и теплопроводящих свойств 1D-KTCP Si/Ge и Si/SiO₂, а также теплового транспорта в МНТ Si/SiO₂.

Теоретическая значимость: развиты модели экситонных и фононных состояний в 1D-KTCP и МНТ.

Практическая ценность работы: практическое внедрение полученных результатов будет способствовать появлению нового класса наноматериалов перспективных для оптоэлектронных, термоэлектрических и теплоизоляционных применений.

ISACOVA CALINA

**PROPRIETĂȚILE EXCITONICE ȘI FONONICE ALE NANOSTRUCTURILOR
FORMATE DIN PUNCTE CUANTICE**

131.04 FIZICĂ COMPUTAȚIONALĂ ȘI MODELAREA PROCESELOR

Rezumatul tezei de doctor în științe fizice

Aprobat spre tipar: 20.12.2023

Hârtie offset. Tipar offset.

Coli de tipar.: 2,1

Formatul hârtiei 60x84 1/16

Tiraj 25 ex.

Comanda nr. 150/23

Centrul Editorial-Poligrafic al U.S.M.,
str. A. Mateevici 60, MD-2009, Chișinău

MOLDOVA STATE UNIVERSITY

With the rights of manuscript

UDC: 539.21

ISACOVA CALINA

EXCITON AND PHONON PROPERTIES IN QUANTUM DOT NANOSTRUCTURES

131.04 - COMPUTATIONAL PHYSICS AND MODELLING OF PROCESSES

Abstract of doctor thesis in physics

CHIȘINĂU, 2023