

# NGHIÊN CỨU SỰ ẢNH HƯỞNG CỦA PHỐI TỬ $\text{InF}_3$ ĐẾN TÍNH CHẤT QUANG-ĐIỆN TỬ CỦA CHẤM LƯỢNG TỬ LOẠI II CdTe-ZnSe



Use your smartphone to scan this QR code and download this article

## TÓM TẮT

Trong nghiên cứu này, chúng tôi sử dụng phương pháp lý thuyết phiếm hàm mật độ (density functional theory) có tích hợp với hiệu ứng spin lượng tử (spin-orbit coupling) để khảo sát tính chất quang điện tử của chấm lượng tử loại II CdTe-ZnSe thuần và chấm lượng tử có gắn phối tử  $\text{InF}_3$ . Chúng tôi đã chỉ ra rằng, khi đính kèm phối tử  $\text{InF}_3$  vào chấm lượng tử loại II CdTe-ZnSe, phổ hấp thụ quang học thực hiện chuyển dịch xanh về vùng năng lượng cao hơn so với phổ hấp thụ quang của chấm lượng tử CdTe-ZnSe thuần. Khi chúng tôi chủ động tăng hoặc giảm khoảng cách giữa hai chấm lượng tử đơn bên trong chấm lượng tử loại II thì độ rộng vùng cấm của chúng cũng tăng hoặc giảm tương ứng. Dưới sự ảnh hưởng của phối tử  $\text{InF}_3$ , độ rộng vùng cấm của chấm lượng tử này tăng so với mẫu chấm lượng tử loại II thuần của chúng. Đồng thời, khi tăng khoảng cách giữa hai chấm lượng tử đơn bên trong chấm lượng tử loại II, phổ hấp thụ quang thực hiện dịch chuyển đỏ và đỉnh hấp thụ quang của chấm lượng tử loại II có phối tử  $\text{InF}_3$  được tăng lên mạnh mẽ so với chấm lượng tử thuần tương ứng. Kết quả nghiên cứu này cho thấy sự ảnh hưởng rõ nét của phối tử  $\text{InF}_3$  trong việc tăng cường khả năng hấp thụ năng lượng Mặt trời dẫn đến thay đổi hiệu suất chuyển đổi quang năng thành điện năng của các tấm pin năng lượng mặt trời có tích hợp chấm lượng tử loại II CdTe-ZnSe.

**Từ khoá:** chấm lượng tử loại II, CdTe-ZnSe, phối tử  $\text{InF}_3$ , pin mặt trời

## 1 MỞ ĐẦU

Trong những năm gần đây, việc sử dụng các chấm lượng tử có kích thước từ vài nanomet đến vài trăm nanomet để cải thiện hiệu suất chuyển đổi quang năng thành điện năng cho pin Mặt trời đã đạt được rất nhiều thành tựu đáng quan tâm<sup>1-6</sup>. Nhờ hiệu ứng giam cầm lượng tử trong nội tại các chấm lượng tử hoặc giữa các chấm lượng tử liền kề<sup>6</sup>, khi các electron từ vùng hóa trị nhảy lên vùng dẫn, một cặp electron-lỗ trống sẽ được hình thành. Trạng thái liên kết của cặp electron-lỗ trống làm phát quang một “hạt exciton”. Năng lượng của hạt exciton này nhỏ hơn độ rộng vùng cấm của chấm lượng tử nên việc hình thành các hạt exciton này giúp mở rộng phổ hấp thụ quang học về vùng năng lượng thấp (chuyển dịch đỏ). Điều này dẫn đến làm tăng đáng kể hiệu suất phát quang của pin Mặt trời. Những tính chất đặc biệt này giúp cho các tấm pin năng lượng Mặt trời có tích hợp chấm lượng tử trở nên ưu thế hơn so với các loại vật liệu truyền thống khác<sup>7-10</sup>. Ngoài ra, chấm lượng tử còn được ứng dụng rộng rãi trong kỹ thuật chế tạo các thiết bị quang-điện tử như LED hoặc transistor hiệu ứng trường<sup>11,12</sup>, lĩnh vực y sinh<sup>13-16</sup> và đặc biệt là máy tính lượng tử<sup>17-20</sup>.

Chấm lượng tử có chứa các nguyên tử IV-VI chalcogenide như Selenium (Se) hoặc Tellurium (Te) gần đây được nghiên cứu sâu rộng về cả về lý thuyết, mô phỏng và thực nghiệm<sup>21-26</sup>. Chúng được ứng dụng rộng rãi trong thiết bị quang-điện tử và cả trong y học<sup>22,27-31</sup>. Các chấm lượng tử này thường được tổng hợp bằng phương pháp bơm áp suất cao, nhiệt phân các tiền chất hoặc dựa trên phản ứng khử halogen, ...<sup>32,33</sup>. Cấu trúc bề mặt, hình thái học và kích thước của các chấm lượng tử này có thể được điều khiển chủ động bằng các kỹ thuật hóa học tiên tiến<sup>34,35</sup>. Ngoài các chấm lượng tử được hình thành từ các đơn chất, chúng ta còn có thể kết hợp các chấm lượng tử đơn thành các chấm lượng tử dị thể, giúp chúng ta có thể điều khiển độ rộng vùng cấm và phổ hấp thụ quang một cách chủ động hơn<sup>36-40</sup>. Các chấm lượng tử dị thể thường được chia thành ba loại gồm chấm lượng tử loại I, loại II và loại III. Xét về hình thái học, các chấm lượng tử dị thể thường được hình thành bằng cách ghép các chấm lượng tử đơn lại theo dạng core-shell, core-crown, core-wings, core-shell-shell, ...<sup>41-44</sup>. Bằng cách này, chúng ta có thể dễ dàng tạo được các chấm lượng tử dị thể loại I và loại II<sup>45,46</sup> ở các dạng thù hình khác nhau. Để phân loại chấm lượng tử dị thể, người ta dựa vào độ chồng phủ vùng

### Lịch sử

- Ngày nhận:
- Ngày chấp nhận:
- Ngày đăng:

### DOI:



### Bản quyền

© ĐHQG Tp.HCM. Đây là bài báo công bố mở được phát hành theo các điều khoản của the Creative Commons Attribution 4.0 International license.



Trích dẫn bài báo này: . NGHIÊN CỨU SỰ ẢNH HƯỞNG CỦA PHỐI TỬ  $\text{InF}_3$  ĐẾN TÍNH CHẤT QUANG-ĐIỆN TỬ CỦA CHẤM LƯỢNG TỬ LOẠI II CdTe-ZnSe. *Sci. Tech. Dev. J. - Nat. Sci.* 2025; ():1-11.

50 năng lượng của các chấm lượng tử đơn thành phần, cụ  
 51 thể là so sánh độ lệch giữa đỉnh vùng hóa trị (HOMO)  
 52 và đáy vùng dẫn (LUMO) 47–49. Thực nghiệm chứng  
 53 tỏ, chấm lượng tử loại II giúp cải thiện đáng kể khả  
 54 năng hấp phụ quang vì đỉnh vùng hóa trị và đáy vùng  
 55 dẫn của hai chấm lượng tử đơn thành phần so le nhau.  
 56 Loại chấm lượng tử bán dẫn này cho phép tăng cường  
 57 tuổi thọ của chúng do có tỷ lệ tái tổ hợp thấp 36,39.  
 58 Hơn thế nữa, tính chất quang-điện tử của các chấm  
 59 lượng tử còn có thể được điều khiển bằng cách tích  
 60 hợp các phối tử bề mặt của chấm lượng tử giúp làm  
 61 tăng ổn định cấu trúc và quá trình hiệu chỉnh đặc tính  
 62 quang-điện tử của chấm lượng tử với các dạng thù  
 63 hình đặc biệt 29,34–36,50–53.  
 64 Chính vì vậy, trong nghiên cứu này, chúng tôi đã sử  
 65 dụng phương pháp mô phỏng dựa theo nguyên lý ban  
 66 đầu để tạo ra các chấm lượng tử dị thể loại II Cd<sub>6</sub>Te<sub>6</sub>-  
 67 Zn<sub>6</sub>Se<sub>6</sub> và chủ động gắn phối tử InF<sub>3</sub> vào các chấm  
 68 lượng tử này với mục đích khảo sát sự ảnh hưởng  
 69 của phối tử lên tính chất quang-điện tử của chúng.  
 70 Dựa trên sự thay đổi về cấu trúc vùng năng lượng và  
 71 phổ hấp thụ quang của chấm lượng tử thuần và chấm  
 72 lượng tử có phối tử, chúng tôi có thể dự đoán được  
 73 tiềm năng ứng dụng của chấm lượng tử này trong việc  
 74 chế tạo các vật liệu phát quang ứng dụng trong y sinh,  
 75 thiết bị quang-điện tử, các thiết bị lưu trữ năng lượng  
 76 và đặc biệt là các tấm pin mặt trời thế hệ mới.

## 77 PHƯƠNG PHÁP TÍNH TOÁN

78 Trong nghiên cứu này, chúng tôi sử dụng lý thuyết  
 79 phiếm hàm mật độ (DFT) được tích hợp trong gói  
 80 phần mềm AMS2023.101 54,55 để xác định cấu trúc  
 81 bền vững, khảo sát tính chất quang-điện tử của chấm  
 82 lượng tử loại II Cd<sub>6</sub>Te<sub>6</sub>-Zn<sub>6</sub>Se<sub>6</sub> thuần và chấm lượng  
 83 tử Cd<sub>6</sub>Te<sub>6</sub>-Zn<sub>6</sub>Se<sub>6</sub> có gắn phối tử InF<sub>3</sub>. Quá trình  
 84 tối ưu hóa cấu trúc của các chấm lượng tử được thực  
 85 hiện thông qua phương pháp tối ưu hình học Quasi  
 86 Newton 56. Ngưỡng hội tụ cho các tính toán trường  
 87 tụ hợp được đặt ở 10<sup>-3</sup> Hartree/Å và điều kiện tối  
 88 ưu về lực là 10<sup>-3</sup> Hartree. Để nâng cao độ tin cậy  
 89 của các tính toán lý thuyết về phổ hấp thụ quang học  
 90 của các chấm lượng tử dị cấu trúc này, ngoài phiếm  
 91 hàm tương quan trao đổi xấp xỉ gradient tổng quát  
 92 GGA dưới dạng PBE 57, chúng tôi sử dụng bộ hàm  
 93 cơ sở triple zeta-potential (TZP) và tích hợp hiệu ứng  
 94 spin-orbit coupling (SOC) 58 và phương pháp time-  
 95 dependent density functional theory. Thông qua việc  
 96 tích hợp hiệu ứng SOC trong các tính toán lý thuyết về  
 97 phổ hấp thụ quang học và hàm điện môi phức, chúng  
 98 tôi có thể dự đoán chính xác trạng thái exciton được  
 99 hình thành trong quá trình phát quang của các chấm  
 100 lượng tử, tương tự như tính toán gần đây của chúng

tôi về cho vật liệu kim loại chuyển tiếp Rhenium disul- 101  
 fide 59. Ngoài ra, để tăng độ tin cậy của các tính toán 102  
 về độ rộng vùng cấm, phiếm hàm lai HSE06 60 cũng 103  
 được sử dụng cho các chấm lượng tử thuần để đối 104  
 chiếu với phiếm hàm PBE tích hợp hiệu ứng spin- 105  
 orbit coupling. 106

## KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN 107

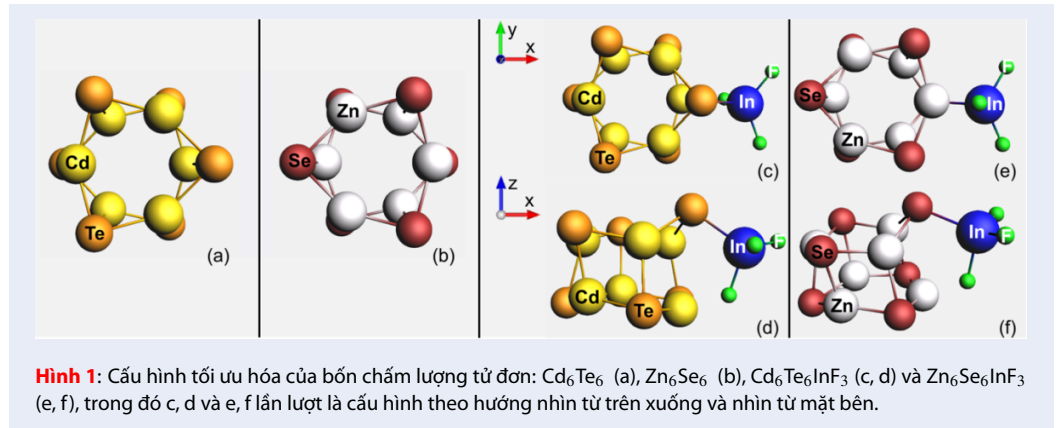
### Tính chất quang-điện tử của chấm lượng tử 108 thuần 109

#### Cấu trúc hình học 110

111 Để nghiên cứu tính chất quang-điện tử của chấm  
 112 lượng tử dị thể loại II Cd<sub>6</sub>Te<sub>6</sub>-Zn<sub>6</sub>Se<sub>6</sub>, chúng tôi tiến  
 113 hành tạo lập và tối ưu hóa cấu trúc hai chấm lượng  
 114 tử đơn Cd<sub>6</sub>Te<sub>6</sub> và Zn<sub>6</sub>Se<sub>6</sub>. Cấu hình tối ưu hóa của  
 115 hai chấm lượng tử đơn Cd<sub>6</sub>Te<sub>6</sub> và Zn<sub>6</sub>Se<sub>6</sub> được thể  
 116 hiện tương ứng trong Hình 1(a-b). Ô cơ sở của các  
 117 cấu hình được tối ưu hóa là một mạng lục giác với  
 118 nhóm đối xứng không gian là và rất phù hợp với các  
 119 công bố trước đó 21,61. Kích thước (L) của các mẫu  
 120 chấm lượng tử trong nghiên cứu được xác định là  
 121 đoạn thẳng dài nhất nối liền hai nguyên tử khác nhau  
 122 trong mỗi mẫu. Kích thước của chấm lượng tử đơn  
 123 Cd<sub>6</sub>Te<sub>6</sub> và Zn<sub>6</sub>Se<sub>6</sub> lần lượt là 5,48 Å và 4,72 Å. Điều  
 124 này cho thấy, chấm lượng tử Zn<sub>6</sub>Se<sub>6</sub> có kích thước  
 125 nhỏ hơn Cd<sub>6</sub>Te<sub>6</sub> rõ rệt dù có cùng số lượng nguyên tử.  
 126 Kết quả này hoàn toàn phù hợp với các nghiên cứu đã  
 127 được công bố trước đây 62,63. Từ cấu hình tối ưu hóa  
 128 của các chấm lượng tử đơn Cd<sub>6</sub>Te<sub>6</sub> và Zn<sub>6</sub>Se<sub>6</sub>, chúng  
 129 tôi gắn phối tử InF<sub>3</sub> để tạo cấu trúc InF<sub>3</sub>Cd<sub>6</sub>Te<sub>6</sub> và  
 130 Zn<sub>6</sub>Se<sub>6</sub>InF<sub>3</sub>. Phối tử InF<sub>3</sub> được gắn bởi nguyên tử In  
 131 lần lượt vào nguyên tử Te và Se của hai chấm lượng tử  
 132 đơn Cd<sub>6</sub>Te<sub>6</sub> và Zn<sub>6</sub>Se<sub>6</sub> như Hình 1(c-f). Ô cơ sở của  
 133 các cấu hình được tối ưu hóa vẫn đáp ứng là một mạng  
 134 lục giác với nhóm đối xứng không gian là D<sub>3d</sub><sup>3</sup>. Kích  
 135 thước của chấm lượng tử Cd<sub>6</sub>Te<sub>6</sub>InF<sub>3</sub> và Zn<sub>6</sub>Se<sub>6</sub>InF<sub>3</sub>  
 136 lần lượt là 9,94 Å và 8,82 Å.

#### Tính chất điện tử 137

138 Cấu trúc vùng năng lượng của các mẫu chấm lượng  
 139 tử đơn Cd<sub>6</sub>Te<sub>6</sub> và Zn<sub>6</sub>Se<sub>6</sub> thuần và có gắn phối tử  
 140 InF<sub>3</sub> được trình bày như Hình 2. Do trạng thái năng  
 141 lượng của các chấm lượng tử được lượng tử hóa như  
 142 những nguyên tử cô lập, dễ thấy cấu trúc vùng năng  
 143 lượng xung quanh mức Fermi có dạng đường thẳng.  
 144 Độ rộng vùng cấm được xác định bằng độ lệch năng  
 145 lượng từ đỉnh vùng hóa trị (HOMO) đến đáy của  
 146 vùng dẫn (LUMO). Độ rộng vùng cấm của Cd<sub>6</sub>Te<sub>6</sub> và  
 147 Zn<sub>6</sub>Se<sub>6</sub> ở trạng thái cơ bản lần lượt là 1,90 và 2,57 eV  
 148 (PBE+SOC và HSE06), và 2,32 và 3,38 eV (PBE+SOC  
 149 và HSE06). Kết quả này của chúng tôi phù hợp với các  
 150 nghiên cứu trước đó 38,64. Từ giản đồ cấu trúc vùng



151 năng lượng, dễ dàng thấy vùng cấm của Cd<sub>6</sub>Te<sub>6</sub> và  
 152 Zn<sub>6</sub>Se<sub>6</sub> so le nhau, cụ thể là đáy vùng dẫn và đỉnh  
 153 vùng hóa trị của Cd<sub>6</sub>Te<sub>6</sub> đều cao hơn Zn<sub>6</sub>Se<sub>6</sub>. Vị  
 154 trí tương đối của vùng hóa trị và vùng dẫn này cho  
 155 phép các electron di chuyển từ vùng dẫn của Cd<sub>6</sub>Te<sub>6</sub>  
 156 sang vùng dẫn của Zn<sub>6</sub>Se<sub>6</sub>, trong khi lỗ trống sẽ di  
 157 chuyển từ vùng hóa trị của Zn<sub>6</sub>Se<sub>6</sub> đến vùng hóa trị  
 158 của Cd<sub>6</sub>Te<sub>6</sub>. Mặc khác, các lỗ trống của Cd<sub>6</sub>Te<sub>6</sub> có  
 159 thể kết hợp với các điện tử của Zn<sub>6</sub>Se<sub>6</sub> tại bề mặt  
 160 tiếp xúc để tạo ra các cặp electron-lỗ trống sẵn có cho  
 161 hoạt động quang xúc tác. Do đó, chấm lượng tử loại II  
 162 Cd<sub>6</sub>Te<sub>6</sub>-Zn<sub>6</sub>Se<sub>6</sub> của chúng tôi có tỷ lệ phân tách điện  
 163 tích cực kì ấn tượng và tỷ lệ tái tổ hợp thấp. Từ đó,  
 164 quá trình kết cặp này góp phần tăng cường tuổi thọ  
 165 của các thiết bị tích hợp các chấm lượng tử này.  
 166 Hình 2 cũng trình bày cấu trúc vùng năng lượng của  
 167 các chấm lượng tử Cd<sub>6</sub>Te<sub>6</sub> và Zn<sub>6</sub>Se<sub>6</sub> có gắn phối tử  
 168 InF<sub>3</sub>. Độ rộng vùng cấm của các chấm lượng tử này  
 169 lần lượt là 2,07 và 2,87 eV (PBE+SOC và HSE06), và  
 170 2,50 và 3,49 eV (PBE+SOC và HSE06). Dưới tác dụng  
 171 của phối tử InF<sub>3</sub>, độ rộng vùng cấm của các chấm  
 172 lượng tử đơn được mở rộng khoảng dưới 10%. Điều  
 173 thú vị là, dù độ rộng vùng cấm được mở rộng  
 174 dưới ảnh hưởng của phối tử InF<sub>3</sub>, cấu trúc vùng năng  
 175 lượng của các chấm lượng tử mới hình thành vẫn so  
 176 le nhau. Điều này giúp chúng tôi dễ dàng xây dựng  
 177 chấm lượng tử loại II Cd<sub>6</sub>Te<sub>6</sub>InF<sub>3</sub>-Zn<sub>6</sub>Se<sub>6</sub>InF<sub>3</sub>. Để  
 178 hiểu rõ vai trò của phối tử trong việc mở rộng độ rộng  
 179 vùng cấm, chúng tôi tiến hành phân tích lượng điện  
 180 tử trao đổi giữa phối tử InF<sub>3</sub> và chấm lượng tử thuần  
 181 Cd<sub>6</sub>Te<sub>6</sub> và Zn<sub>6</sub>Se<sub>6</sub> (Bảng 1). So sánh hai loại chấm  
 182 lượng tử, mức HOMO và LUMO của chấm lượng tử  
 183 Zn<sub>6</sub>Se<sub>6</sub>InF<sub>3</sub> giảm mạnh hơn so với chấm lượng tử  
 184 Cd<sub>6</sub>Te<sub>6</sub>InF<sub>3</sub> đặc biệt là ở mức HOMO. Điều này thể  
 185 hiện qua năng lượng tương tác lỗ trống và electron của  
 186 Zn<sub>6</sub>Se<sub>6</sub>InF<sub>3</sub> lớn hơn rất nhiều so với Cd<sub>6</sub>Te<sub>6</sub>InF<sub>3</sub>. Đối  
 187 với từng chấm lượng tử mức HOMO giảm mạnh hơn  
 188 mức LUMO, thể hiện rõ bản chất Z-type của phối tử  
 189 InF<sub>3</sub>.

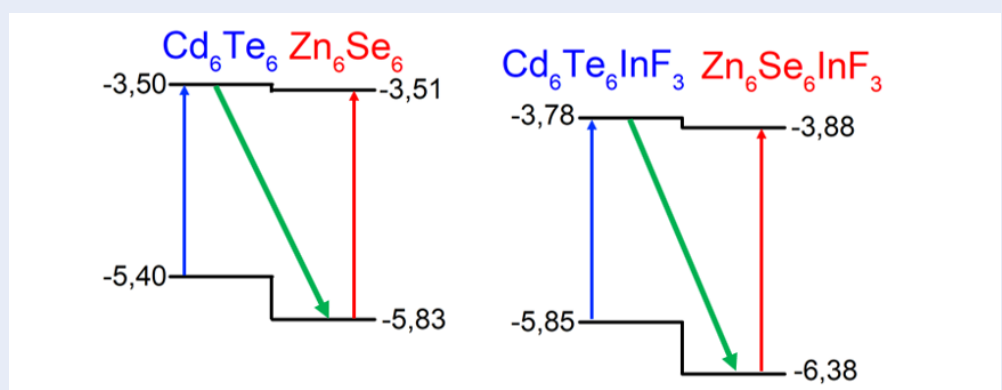
### Tính chất quang

190  
 191 Trong phần này, chúng tôi tiến hành khảo sát tính chất  
 192 quang của chấm lượng tử đơn thuần và chấm lượng  
 193 tử có gắn phối tử InF<sub>3</sub>. Phổ hấp thụ quang học được  
 194 trình bày trong bài báo này được khảo sát từ hàm điện  
 195 môi phức như những công bố gần đây<sup>65,66</sup>. Dựa trên  
 196 phổ hấp thụ quang, chúng ta dễ dàng đánh giá tiềm  
 197 năng ứng dụng của các mẫu chấm lượng tử này trong  
 198 việc tích hợp vào các tấm pin năng lượng mặt trời thế  
 199 hệ mới. Hình 3 trình bày phổ hấp thụ quang của các  
 200 chấm lượng tử đơn và chấm lượng tử đơn có phối tử.  
 201 Rất rõ ràng, chấm lượng tử đơn Zn<sub>6</sub>Se<sub>6</sub> có cường độ  
 202 đỉnh hấp thụ quang cực đại gấp 3,4 lần so với đỉnh  
 203 hấp thụ quang tương ứng của Cd<sub>6</sub>Te<sub>6</sub>. Đỉnh hấp thụ  
 204 quang đầu tiên của chấm lượng tử đơn Cd<sub>6</sub>Te<sub>6</sub> và  
 205 Zn<sub>6</sub>Se<sub>6</sub> lần lượt là 2,20 eV và 2,70 eV. Giá trị năng  
 206 lượng này tương ứng với dịch chuyển thẳng từ mức  
 207 LUMO về mức HOMO-1 (Hình 2). Đặc biệt là khi  
 208 có sự hiện diện của phối tử InF<sub>3</sub>, phổ hấp thụ quang  
 209 của hai chấm lượng tử này dịch chuyển về vùng năng  
 210 lượng cao do độ rộng vùng cấm tăng. Giá trị năng  
 211 lượng tại hai đỉnh hấp thụ quang đầu tiên của chấm  
 212 lượng tử có phối tử hoàn toàn phù hợp với độ rộng  
 213 vùng cấm. Do đó, thông qua việc tích hợp các phối tử  
 214 InF<sub>3</sub> vào chấm lượng tử Cd<sub>6</sub>Te<sub>6</sub> và Zn<sub>6</sub>Se<sub>6</sub>, chúng ta  
 215 có thể chủ động điều khiển trạng thái hấp thụ quang  
 216 của các chấm lượng tử về phía vùng năng lượng cao  
 217 hơn (dịch chuyển xanh).

### Tính chất quang-điện tử của chấm lượng tử loại II

#### Cấu trúc hình học

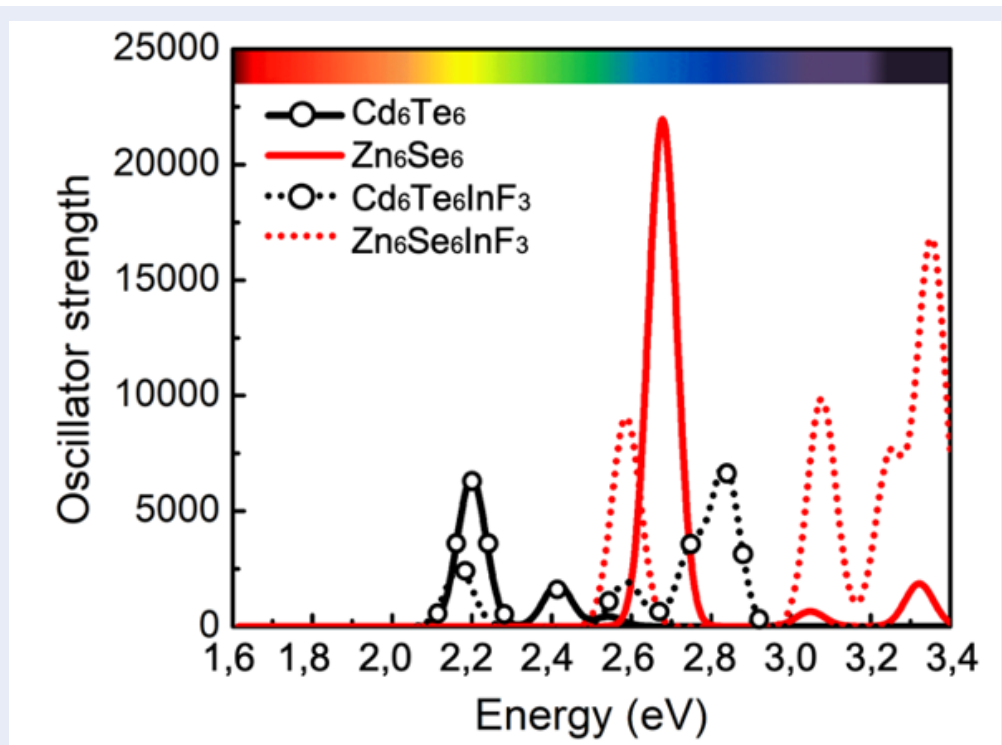
221 Dựa trên cấu trúc của hai chấm lượng tử đơn Cd<sub>6</sub>Te<sub>6</sub>  
 222 và Zn<sub>6</sub>Se<sub>6</sub>, chúng tôi tiến hành tạo lập chấm lượng  
 223 tử loại II Cd<sub>6</sub>Te<sub>6</sub>-Zn<sub>6</sub>Se<sub>6</sub> bằng cách đặt chúng gần  
 224 nhau và đồng phẳng để chúng hình thành các liên kết  
 225 cộng hóa trị. Sau khi tối ưu hóa cấu trúc, cấu hình



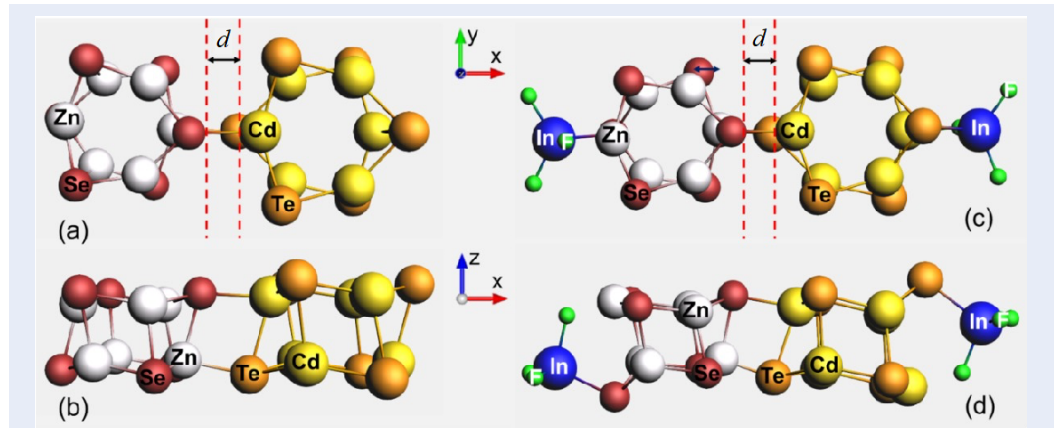
**Hình 2:** Cấu trúc vùng năng lượng của các chấm lượng tử  $Cd_6Te_6$ ,  $Zn_6Se_6$ ,  $Cd_6Te_6InF_3$  và  $Zn_6Se_6InF_3$  được tính toán với phiếm hàm PBE có tích hợp hiệu ứng spin-orbit coupling. Mức chân không được đặt ở không ở tất cả các mẫu.

**Bảng 1:** Năng lượng tương tác electron và lỗ trống giữa phối tử  $InF_3$  và chấm lượng tử thuần.

Mẫu	Năng lượng tương tác lỗ trống (eV)	Năng lượng tương tác electron (eV)
$Zn_6Se_6InF_3$	0.301	0.136
$Cd_6Te_6InF_3$	0.258	0.076



**Hình 3:** Phổ hấp thụ quang của các chấm lượng tử thuần  $Cd_6Te_6$ ,  $Zn_6Se_6$ ,  $Cd_6Te_6InF_3$  và  $Zn_6Se_6InF_3$ .



**Hình 4:** Cấu hình tối ưu hóa của các mẫu chấm lượng tử loại II thuần  $Cd_6Te_6-Zn_6Se_6$  (a, b) và có chấm lượng tử loại II có phối tử  $Cd_6Te_6InF_3-Zn_6Se_6InF_3$  (c, d) lần lượt theo hướng nhìn từ trên xuống và nhìn từ mặt bên.

226 của của chấm lượng tử loại II  $Cd_6Te_6-Zn_6Se_6$  thuần  
 227 và có gắn phối tử được trình bày ở Hình 4 với  $d$  là  
 228 khoảng cách giữa hai nguyên tử Cd và Se tương ứng  
 229 của hai chấm lượng tử  $Cd_6Te_6$  và  $Zn_6Se_6$ . Cấu trúc  
 230 chấm lượng tử loại II  $Cd_6Te_6-Zn_6Se_6$  có xu hướng  
 231 dẫn nhẹ sau khi tối ưu hóa. Tuy nhiên, cấu trúc dạng  
 232 lục giác của các chấm lượng tử thành phần vẫn được  
 233 bảo toàn, mẫu chấm lượng tử trong nghiên cứu của  
 234 chúng tôi cho cấu hình phù hợp với chấm lượng tử loại  
 235 II điển hình theo tính toán dựa trên lý thuyết phiếm  
 236 hàm mật độ<sup>67</sup>. Tương tự như cách tạo lập cấu trúc  
 237 chấm lượng tử loại II  $Cd_6Te_6-Zn_6Se_6$  thuần, chấm  
 238 lượng tử loại II  $InF_3-Cd_6Te_6-Zn_6Se_6-InF_3$  cũng được  
 239 hình thành tương tự.

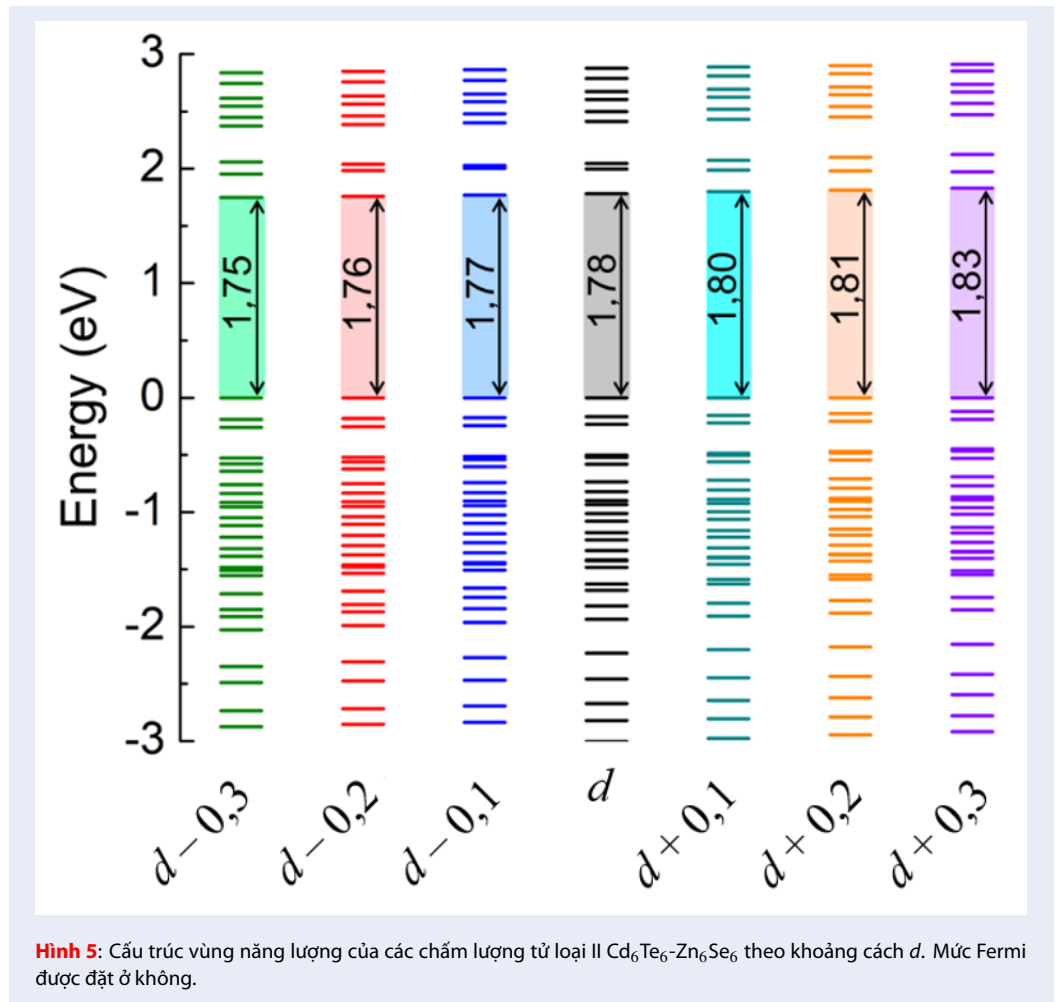
#### 240 **Tính chất điện tử**

241 Các tính chất quang-điện tử của chấm lượng tử chấm  
 242 lượng tử loại II  $Cd_6Te_6-Zn_6Se_6$  phụ thuộc rất lớn vào  
 243 khoảng cách  $d$  giữa các chấm lượng tử đơn thành  
 244 phần. Nếu khoảng cách này đủ nhỏ thì hiệu ứng  
 245 tương tác spin sẽ được tăng cường, làm tăng đáng kể  
 246 cường độ hấp thụ quang của vật liệu. Trong Hình 5,  
 247 chúng tôi trình bày cấu trúc vùng năng lượng của các  
 248 mẫu chấm lượng tử loại II  $Cd_6Te_6-Zn_6Se_6$  được khảo  
 249 sát theo sự tăng/giảm khoảng cách  $d$  giữa hai chấm  
 250 lượng tử đơn. Chấm lượng tử loại II  $Cd_6Te_6-Zn_6Se_6$   
 251 thuần ở trạng thái cơ bản với  $d = 2,62$  Å, chúng tôi sẽ  
 252 tăng/giảm khoảng cách  $d$  lần lượt 0,1 Å, 0,2 Å và 0,3  
 253 Å. Kết quả cho thấy, khi  $d$  giảm dần thì độ rộng vùng  
 254 cấm chấm lượng tử loại II cũng giảm dần và ngược lại.  
 255 Độ rộng vùng cấm của các mẫu chấm lượng tử loại II  
 256 này dao động từ 1,75 eV – 1,83 eV, có thể tạo ra phổ  
 257 hấp thụ quang học trong vùng ánh sáng đỏ.  
 258 Với các chấm lượng tử loại II có phối tử  $Cd_6Te_6InF_3-$   
 259  $Zn_6Se_6InF_3$ , kết quả cho thấy sự thu hẹp hay mở rộng

độ rộng vùng cấm cũng phụ thuộc vào xu hướng tăng  
 hoặc giảm tương ứng khoảng cách  $d$  giữa hai chấm  
 lượng tử thành phần (Hình 6). Rõ ràng, chấm lượng  
 tử loại II  $Cd_6Te_6InF_3-Zn_6Se_6InF_3$  ở trạng thái cơ bản  
 có độ rộng vùng cấm vào khoảng 1,97 eV, giá trị này  
 thậm chí còn cao hơn giá trị lớn nhất ở trạng thái  
 kích thích trong mẫu chấm lượng tử loại II  $Cd_6Te_6-$   
 $Zn_6Se_6$  thuần (1,83 eV). Độ rộng vùng cấm của các  
 mẫu chấm lượng tử có phối tử cho phép chúng tôi dự  
 đoán rằng các kích thích điện tử sẽ được tạo ra một  
 cách mạnh mẽ trong vùng khả kiến, từ đó giúp tăng  
 cường hiệu suất chuyển đổi năng lượng của các loại  
 vật liệu này. Kết quả về độ rộng vùng cấm của chấm  
 lượng tử có phối tử chúng tôi cho kết quả phù hợp  
 với các nghiên cứu về chấm lượng tử có pha tạp trước  
 đó<sup>68</sup>.

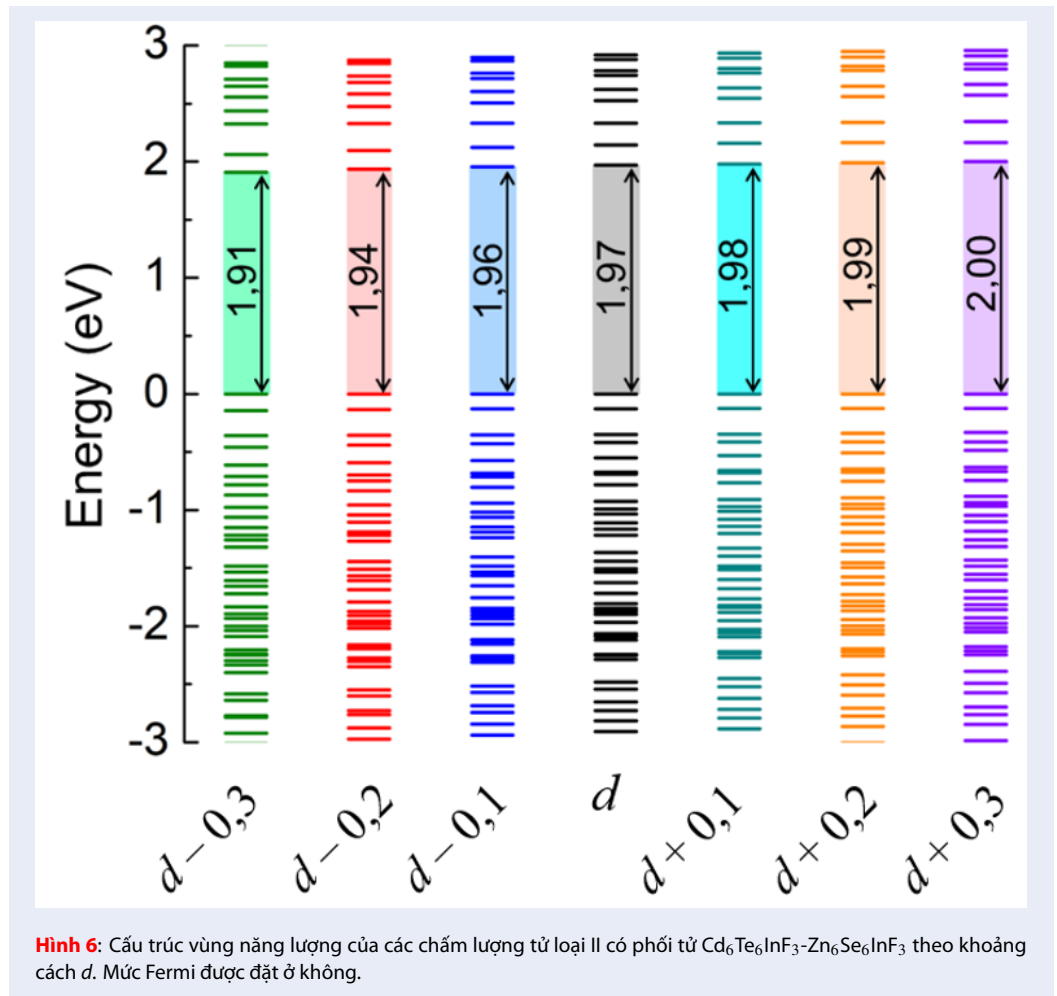
#### **Tính chất quang**

Tương tự như việc khảo sát phổ hấp thụ quang của  
 chấm lượng tử đơn, phổ hấp thụ quang của chấm  
 lượng tử loại II thuần và có gắn phối tử  $InF_3$  cũng dựa  
 trên phần thực và ảo của hàm điện môi phức. Hình 7  
 trình bày phổ hấp thụ quang của chấm lượng tử loại  
 II thuần. Giá trị đỉnh hấp thụ quang học đầu tiên  
 của các mẫu phù hợp với độ rộng vùng cấm các mẫu  
 chấm lượng tử loại II thuần được trình bày ở Hình 5  
 và tương đồng với kết quả trình bày trong TLTK<sup>64,69</sup>.  
 Để khảo sát hiệu ứng giam cầm lượng tử của các chấm  
 lượng tử đơn bên trong chấm lượng tử loại II, chúng  
 tôi khảo sát phổ hấp thụ quang của chấm lượng tử  
 loại II  $Cd_6Te_6-Zn_6Se_6$  theo khoảng cách  $d$ . Hình 7  
 cho thấy, vị trí đỉnh phổ ở vùng năng lượng thấp tăng  
 khi khoảng cách  $d$  tăng, tương ứng với phổ hấp thụ  
 quang có xu hướng dịch chuyển về vùng ánh sáng đỏ  
 hơn và đỉnh hấp thụ quang cực đại có giá trị xấp xỉ



294 4601 tại mức năng lượng 1,71 eV. Khi giảm *d* thì đỉnh  
 295 phổ quang ở vùng năng lượng thấp có cường độ giảm  
 296 dần (Bảng 2).  
 297 Điều thú vị là dưới ảnh hưởng của phối tử, sự dịch  
 298 chuyển đỉnh quang xảy ra theo chiều ngược lại. Cụ thể  
 299 là các đỉnh hấp thụ quang có xu hướng dịch chuyển  
 300 đỏ khi tăng khoảng cách *d* và chuyển xanh khi giảm  
 301 khoảng cách *d*. Hơn thế nữa, đối với các chấm lượng  
 302 tử loại II Cd<sub>6</sub>Te<sub>6</sub>InF<sub>3</sub>-Zn<sub>6</sub>Se<sub>6</sub>InF<sub>3</sub> có khoảng cách *d*  
 303 giảm, sự phân bố đỉnh có phần cục bộ hơn với sự  
 304 hiện diện của hai đỉnh ở vùng ánh sáng cam và lục.  
 305 Giá trị đỉnh phổ hấp thụ quang lớn nhất đạt 4152 ở  
 306 năng lượng xấp xỉ 2,38 eV tức vùng ánh sáng xanh  
 307 lục trong vùng ánh sáng khả kiến. Hình 8 cho thấy  
 308 có thay đổi đáng kể về vị trí đỉnh cũng như cường độ  
 309 hấp thụ quang khi khoảng cách giữa hai chấm lượng  
 310 tử đơn trong chấm lượng tử loại II tăng lên. Bảng 2  
 311 trình bày chi tiết về giá trị đỉnh phổ hấp thụ quang của  
 312 chấm lượng tử loại II có phối tử. Sự tồn tại của phối tử  
 313 InF<sub>3</sub> giúp tạo ra các trạng thái phát quang exciton đối

314 đảo hơn trong chấm lượng tử loại II Cd<sub>6</sub>Te<sub>6</sub>-Zn<sub>6</sub>Se<sub>6</sub>.  
 315 Điều này cho thấy hiệu suất chuyển đổi quang-điện  
 316 của pin năng lượng Mặt trời có tích hợp chấm lượng  
 317 tử loại II với phối tử InF<sub>3</sub> được cải thiện rõ nét. Kết  
 318 quả nghiên cứu này rất phù hợp với kết quả quan sát  
 319 thực nghiệm trong TLTK<sup>70</sup> và tương tự như chấm  
 320 lượng tử perovskite có tích hợp phối tử loại Z CsPbI<sub>3</sub>  
 321 trong TLTK<sup>71</sup>. Để hiểu rõ bản chất của sự tăng cường  
 322 hay giảm bớt cường độ hấp thụ quang, chúng tôi tiến  
 323 hành phân tích năng lượng tương tác điện tử electron  
 324 và lỗ trống giữa các chấm lượng tử CdTe và ZnSe khi  
 325 có và không có phối tử. Bảng 3 cho thấy, khi Cd<sub>6</sub>Te<sub>6</sub>  
 326 nhận thêm được năng lượng lỗ trống từ Zn<sub>6</sub>Se<sub>6</sub>, phổ  
 327 hấp thụ quang thể hiện sự dịch chuyển đỏ chứng tỏ  
 328 trạng thái exciton được hình thành. Trong trường  
 329 hợp tích hợp phối tử loại Z InF<sub>3</sub>, do phối tử InF<sub>3</sub> chỉ  
 330 tương tác với electron ở đỉnh vùng hóa trị, khi Zn<sub>6</sub>Se<sub>6</sub>  
 331 nhận thêm được năng lượng electron từ Cd<sub>6</sub>Te<sub>6</sub>, phổ  
 332 hấp thụ quang thể hiện sự dịch chuyển đỏ và cường  
 333 độ phổ hấp thụ quang được tăng lên đáng kể. Điều



334 này tương đồng với việc hình thành trạng thái exci- 353  
 335 ton trong mẫu. Kết quả này cho thấy vai trò đặc biệt 354  
 336 của phối tử  $\text{InF}_3$  trong việc cải thiện hiệu suất hấp thụ 355  
 337 quang của chấm lượng tử loại II có tích hợp phối tử và 356  
 338 phù hợp với kết quả quan sát thực nghiệm được công 357  
 339 bố gần đây (70).

### 340 KẾT LUẬN

341 Chúng tôi đã trình bày chi tiết các thông số cấu hình 361  
 342 mô phỏng, so sánh tính chất quang-điện tử của các 362  
 343 mẫu chấm lượng tử loại II  $\text{Cd}_6\text{Te}_6\text{-Zn}_6\text{Se}_6$  thuần và 363  
 344 các mẫu chấm lượng tử có gắn phối tử  $\text{InF}_3$  tương 364  
 345 ứng. Các kết quả cho thấy, khi tăng khoảng cách giữa 365  
 346 các chấm lượng tử thành phần thì độ rộng vùng cấm 366  
 347 của các chấm lượng tử loại II cũng tăng và ngược lại. 367  
 348 Hơn thế nữa, các mẫu chấm lượng tử loại II có phối 368  
 349 tử  $\text{InF}_3$  cho giá trị độ rộng vùng cấm lớn hơn các mẫu 369  
 350 thuần tương ứng. Chúng tôi cũng chỉ ra rằng sự thay 370  
 351 đổi độ rộng vùng cấm có quan hệ chặt chẽ đến sự 371  
 352 xuất hiện của các kích thích điện tử trong các hiệu

ứng quang-điện tử. Tính chất quang được khảo sát 353  
 thông qua phổ hấp thụ quang đã cho thấy các mẫu 354  
 chấm lượng tử trong nghiên cứu đều có xu hướng 355  
 hình thành các trạng thái phát quang trong vùng ánh 356  
 sáng đỏ đến xanh lục. Song song đó, các mẫu chấm 357  
 lượng tử loại II có phối tử  $\text{InF}_3$  có đỉnh hấp thụ quang 358  
 dịch chuyển sâu vào vùng khả kiến, cường độ phát 359  
 quang được tăng cường và hình thành các đỉnh tương 360  
 đối rõ nét trong vùng này. Đặc biệt, khi chấm lượng 361  
 tử gắn phối tử có sự thay đổi khoảng cách  $d$  tương đối 362  
 nhỏ, cường độ hấp thụ quang của các chấm lượng tử 363  
 này tăng lên rõ rệt giúp cải thiện đáng kể hiệu suất 364  
 chuyển đổi quang-điện của vật liệu phục vụ cho các 365  
 thiết bị lưu trữ và chuyển đổi năng lượng như pin mặt 366  
 trời. 367

### DANH MỤC TỪ VIẾT TẮT

DFT: density functional theory 369  
 AMS: Amsterdam Modeling Suite 370  
 ADF: Amsterdam Density Functional 371

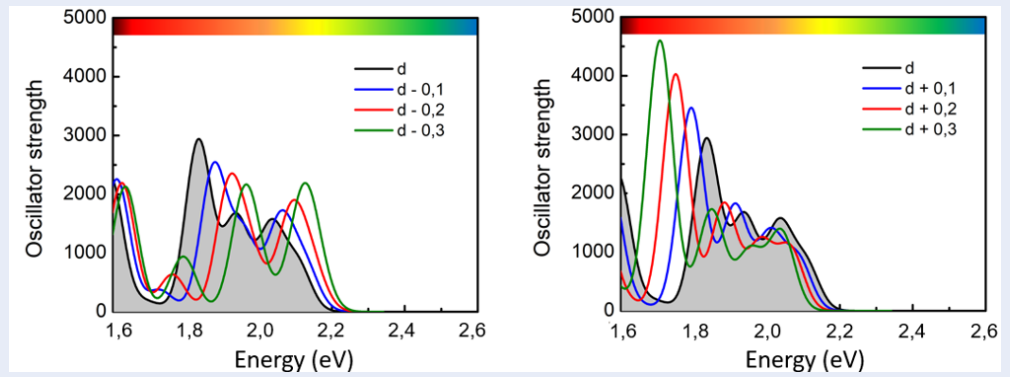
**Bảng 2:** Đỉnh hấp thụ quang của chấm lượng tử loại II Cd<sub>6</sub>Te<sub>6</sub>-Zn<sub>6</sub>Se<sub>6</sub> thuần và có phối tử InF<sub>3</sub>.

Mẫu		Đỉnh cường độ dao động đầu tiên /Năng lượng (eV)	Đỉnh cường độ dao động thứ hai/ Năng lượng (eV)	Đỉnh cường độ dao động thứ ba/ Năng lượng (eV)
Cd <sub>6</sub> Te <sub>6</sub> -Zn <sub>6</sub> Se <sub>6</sub>	d – 0,3	2129/1,63	939/1,79	2167/1,97
	d – 0,2	2190/1,62	635/1,76	2354/1,93
	d – 0,1	2256/1,61	377/1,72	2548/1,88
	d	2318/1,60	2940/1,84	1681/1,94
	d + 0,1	2337/1,57	3456/1,80	1828/1,91
	d + 0,2	2255/1,54	4029/1,75	1843/1,88
	d + 0,3	2059/1,50	4601/1,71	1731/1,85
Cd <sub>6</sub> Te <sub>6</sub> InF <sub>3</sub> -Zn <sub>6</sub> Se <sub>6</sub> InF <sub>3</sub>	d – 0,3	2639/2,12	1003/2,24	4152/2,38
	d – 0,2	2451/2,10	3475/2,38	-
	d – 0,1	2236/2,06	1730/2,14	2389/2,28
	d	2107/2,01	2190/2,13	2724/2,23
	d + 0,1	2039/2,00	2656/2,10	3192/2,19
	d + 0,2	1998/1,90	3044/2,05	3639/2,14
	d + 0,3	1966/1,84	3364/2,00	4021/2,08

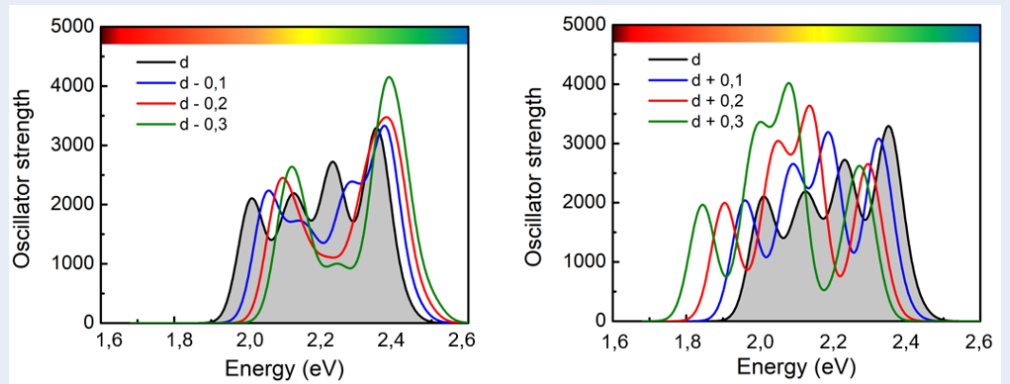
**Bảng 3:** Năng lượng tương tác electron và lỗ trống trao đổi giữa các thành phần trong chấm lượng tử loại II Cd<sub>6</sub>Te<sub>6</sub>-Zn<sub>6</sub>Se<sub>6</sub> thuần và có phối tử InF<sub>3</sub>.

Mẫu		Năng lượng tương tác lỗ trống từ Zn <sub>6</sub> Se <sub>6</sub> → Cd <sub>6</sub> Te <sub>6</sub> (eV)	Năng lượng tương tác electron từ Cd <sub>6</sub> Te <sub>6</sub> → Zn <sub>6</sub> Se <sub>6</sub> (eV)
Cd <sub>6</sub> Te <sub>6</sub> -Zn <sub>6</sub> Se <sub>6</sub>	d – 0,3	0,085	0,306
	d – 0,2	0,094	0,249
	d – 0,1	0,102	0,197
	d	0,107	0,150
	d + 0,1	0,110	0,108
	d + 0,2	0,111	0,071
	d + 0,3	0,110	0,038
Cd <sub>6</sub> Te <sub>6</sub> InF <sub>3</sub> -Zn <sub>6</sub> Se <sub>6</sub> InF <sub>3</sub>	d – 0,3	0,237	0,267
	d – 0,2	0,240	0,304
	d – 0,1	0,239	0,343
	d	0,234	0,381
	d + 0,1	0,224	0,420
	d + 0,2	0,209	0,457
	d + 0,3	0,188	0,492





Hình 7: Phổ hấp thụ quang của chấm lượng tử loại II  $Cd_6Te_6-Zn_6Se_6$  thuần.



Hình 8: Phổ hấp thụ quang của chấm lượng tử loại II có có phối tử  $Cd_6Te_6InF_3-Zn_6Se_6InF_3$ .

372 TZP: triple zeta-potential

373 SOC: spin-orbit coupling

374 GGA: generalized gradient approximation

375 PBE: Perdew – Burke – Ernzerhof – 1996

### 376 XUNG ĐỘT LỢI ÍCH

377 Các tác giả đồng ý không có bất kỳ xung đột lợi ích

378 nào liên quan đến các kết quả đã công bố.

### 379 ĐÓNG GÓP CỦA TÁC GIẢ

380 XXX

### 381 TÀI LIỆU THAM KHẢO

- 382 1. Yakar Y, Çakır B, Özmen A. Superlattices and Microstructures  
383 Off-center hydrogenic impurity in spherical quantum dot with  
384 parabolic potential. Superlattices Microstruct. 2013;60:389–  
385 97;.
- 386 2. Jean J, Chang S, Brown PR, Cheng JJ, Rekemeyer PH. ZnO  
387 Nanowire Arrays for Enhanced Photocurrent in PbS Quantum  
388 Dot Solar Cells. 2013;1–7;.
- 389 3. Marino E, Kodger TE, ten Hove JB, Velders AH, Schall P.  
390 Assembling quantum dots via critical Casimir forces. Solar  
391 Energy Materials and Solar Cells [Internet]. 2016;158:154–  
392 9; Available from: <https://www.sciencedirect.com/science/>

[article/pii/S0927024816000271](https://doi.org/10.1016/j.sml.2017.12.002).

- 394 4. van Dam B, Nie H, Ju B, Marino E, Paulusse MJM, Schall  
395 P, et al. Excitation-Dependent Photoluminescence  
396 from Single-Carbon Dots. Small [Internet]. 2017 Dec  
397 1;13(48):1702098; Available from: <https://doi.org/10.1002/sml.201702098>.  
398
- 399 5. Marino E, Balazs DM, Crisp RW, Hermida-Merino D,  
400 Loi MA, Kodger TE, et al. Controlling Superstructure-  
401 Property Relationships via Critical Casimir Assembly  
402 of Quantum Dots. The Journal of Physical Chem-  
403 istry C [Internet]. 2019;123(22):13451–7; Available from:  
404 <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b02033>.
- 405 6. Marino E, Sciortino A, Berkhout A, MacArthur KE, Heggen M,  
406 Gregorkiewicz T, et al. Simultaneous Photonic and Excitonic  
407 Coupling in Spherical Quantum Dot Supercrystals. ACS Nano  
408 [Internet]. 2020 Oct 27;14(10):13806–15; Available from: <https://doi.org/10.1021/acsnano.0c06188>.  
409
- 410 7. Pan Z, Rao H, Mora-Seró I, Bisquert J, Zhong X. Quantum dot-  
411 sensitized solar cells. Chem Soc Rev. 2018;47(20):7659–702;.
- 412 8. Song H, Lin Y, Zhang Z, Rao H, Wang W, Fang Y, et al. Improving  
413 the Efficiency of Quantum Dot Sensitized Solar Cells beyond  
414 15% via Secondary Deposition. 2021;.
- 415 9. Kim Jyup, Yang J, Yu JH, Baek W, Lee H, Son HJ, et al. Highly Effi-  
416 cient Copper-Indium-Selenide Quantum Dot Solar Cells: Sup-  
417 pression of Carrier Recombination by Controlled ZnS Overlay-  
418 ers. 2015;.
- 419 10. García de Arquer FP, Talapin D V., Klimov VI, Arakawa Y, Bayer  
420 M, Sargent EH. Semiconductor quantum dots: Technological

- 421 progress and future challenges. *Science*. 2021;373(6555);
- 422 11. Xing SG, Wang K. As featured in : *Nanoscale Advances Electric dipole modulation for boosting carrier electron injection*. 2023;.
- 423
- 424
- 425 12. Sun Y, Jiang Y, Sun XW, Zhang S, Chen S. Beyond OLED : Efficient Quantum Dot Light-Emitting Diodes for Display and Lighting Application. 2019;1–25;
- 426
- 427
- 428 13. Wagner AM, Knipe JM, Orive G, Peppas NA. Quantum dots in biomedical applications. *Acta Biomater*. 2019 Aug;94:44–63;.
- 429
- 430 14. Bad U, Mollarasouli F, Bakirhan NK, Ozkan Y, Ozkan SA. Trends in Analytical Chemistry Role of quantum dots in pharmaceutical and biomedical analysis , and its application in drug delivery. 2020;131;.
- 431
- 432
- 433
- 434 15. Ji X, Zheng J, Xu J, Rastogi VK, Cheng T chen, Defrank JJ, et al. ( CdSe ) ZnS Quantum Dots and Organophosphorus Hydrolase Bioconjugate as Biosensors for Detection of Paraoxon. 2005;3793:3793–9;.
- 435
- 436
- 437
- 438 16. Cai Q, Wu D, Li H, Jie G, Zhou H. Biosensors and Bioelectronics Versatile photoelectrochemical and electrochemiluminescence biosensor based on 3D CdSe QDs-DNA nanonetwork-SnO 2 nanoflower coupled with DNA walker amplification for HIV detection. 2021;191(June);.
- 439
- 440
- 441
- 442
- 443 17. Keifer G, Effenberger F. *Synthesis of Inorganic Nanomaterials*. Vol. 6, *Angewandte Chemie International Edition*. 1967. 951–952 p;.
- 444
- 445
- 446 18. Ruland A, Schulz-Drost C, Sgobba V, Guldi DM. Enhancing photocurrent efficiencies by resonance energy transfer in CdTe quantum dot multilayers: Towards rainbow solar cells. *Advanced Materials*. 2011;23(39):4573–7;.
- 447
- 448
- 449
- 450 19. Tartakovskii A. Quantum dots: Optics, electron transport and future applications. Vol. 9781107012, *Quantum Dots: Optics, Electron Transport and Future Applications*. 2012. 1–358 p;.
- 451
- 452
- 453 20. Algar WR, Tavares AJ, Krull UJ. Beyond labels: A review of the application of quantum dots as integrated components of assays, bioprobes, and biosensors utilizing optical transduction. *Anal Chim Acta*. 2010;673(1):1–25;.
- 454
- 455
- 456
- 457 21. Deglmann P, Ahrlichs R, Tsereteli K. Theoretical studies of ligand-free cadmium selenide and related semiconductor clusters. *J Chem Phys*. 2002 Jan 10;116(4):1585–97;.
- 458
- 459
- 460 22. Jadhav AA, Khanna PK. 1,2,3-Selenadiazole-driven single family MSNCs of CdSe. *New Journal of Chemistry*. 2017;41(23):14713–22;.
- 461
- 462
- 463 23. Yong KT, Law WC, Roy I, Jing Z, Huang H, Swihart MT, et al. Aqueous phase synthesis of CdTe quantum dots for biophotonics. *J Biophotonics*. 2011;4(1–2):9–20;.
- 464
- 465
- 466 24. Bang JH, Suh WH, Suslick KS. Quantum dots from chemical aerosol flow synthesis: Preparation, characterization, and cellular imaging. *Chemistry of Materials*. 2008;20(12):4033–8;.
- 467
- 468
- 469 25. Talapin D V., Rogach AL, Shevchenko E V., Kornowski A, Haase M, Weller H. Dynamic distribution of growth rates within the ensembles of colloidal II-VI and III-V semiconductor nanocrystals as a factor governing their photoluminescence efficiency. *J Am Chem Soc*. 2002;124(20):5782–90;.
- 470
- 471
- 472
- 473 26. Yu S, Huang D, Withanage K. Computational insights into structural and optical properties of P-containing and N-containing ligands capped CdSe clusters. *Mol Simul*. 2019;45(17):1426–31;.
- 474
- 475
- 476
- 477 27. Bulbula ST, Zeweldi HW. Density Functional Study of Electronic and Structural Properties of Gold-Cadmium Selenide / Telluride Nanoclusters. 2015;2015;.
- 478
- 479
- 480 28. Dukes AD, McBride JR, Rosenthal SJ. Synthesis of magic-sized CdSe and CdTe nanocrystals with diisooctylphosphinic acid. *Chemistry of Materials*. 2010;22(23):6402–8;.
- 481
- 482
- 483 29. Cui Y, Lou Z, Wang X, Yu S, Yang M. A study of optical absorption of cysteine-capped CdSe nanoclusters using first-principles calculations. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2015;17(14):9222–30;.
- 484
- 485
- 486
- 487 30. Zhao FA, Xiao HY, Bai XM, Zu XT. Effects of Ag doping on the electronic and optical properties of CdSe quantum dots. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 2019;21(29):16108–19;.
- 488
- 489
- 490 31. Chopade P, Jagtap S, Gosavi S. 5 - Material properties and potential applications of CdSe semiconductor nanocrystals. In: Pawade VB, Dhoble SJ, Swart HCBTNCs and their OA, editors. *Woodhead Publishing Series in Electronic and Optical Materials*. Woodhead Publishing; 2022. p. 105–53; Available from: <https://doi.org/10.1016/b978-0-12-824062-5.00013-0>.
- 491
- 492
- 493
- 494
- 495
- 496
- 497 32. Gaponik N, Talapin D V, Rogach AL, Hoppe K, Shevchenko E V, Kornowski A, et al. Thiol-Capping of CdTe Nanocrystals: An Alternative to Organometallic Synthetic Routes. 2002;7177–85; Available from: <https://doi.org/10.1021/jp025541k>.
- 498
- 499
- 500 33. Salem A, Saion E, Al-Hada NM, Mohamed Kamari H, Shaari AH, Abdullah CAC, et al. Synthesis and characterization of CdSe nanoparticles via thermal treatment technique. *Results Phys*. 2017;7:1556–62; Available from: <https://doi.org/10.1016/j.rinp.2017.04.026>.
- 501
- 502
- 503
- 504
- 505 34. Yashina L V, Zyubin AS, Püttner R, Zyubina TS, Neudachina VS, Stojanov P, et al. The oxidation of the PbS(001) surface with O2 and air studied with photoelectron spectroscopy and ab initio modeling. *Surf Sci [Internet]*. 2011;605(5):473–82; Available from: <https://doi.org/10.1016/j.susc.2010.11.020>; <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0039602810004796>.
- 506
- 507
- 508
- 509 35. Bielewicz T, Dogan S, Klinke C. Tailoring the Height of Ultrathin PbS Nanosheets and Their Application as Field-Effect Transistors. *Small [Internet]*. 2015 Feb 1;11(7):826–33; Available from: <https://doi.org/10.1002/smll.201402144>.
- 510
- 511
- 512 36. Grimaldi G, Van Den Brom MJ, Du Fossé I, Crisp RW, Kirkwood N, Gudjonsdottir S, et al. Engineering the Band Alignment in QD Heterojunction Films via Ligand Exchange. *Journal of Physical Chemistry C*. 2019;123(49):29599–608; Available from: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.9b09470>.
- 513
- 514
- 515 37. Antanovich A V., Prudnikau A V., Melnikau D, Rakovich YP, Chuvilin A, Woggon U, et al. Colloidal synthesis and optical properties of type-II CdSe-CdTe and inverted CdTe-CdSe core-wing heteronanostructures. *Nanoscale*. 2015;7(17):8084–92; Available from: <https://doi.org/10.1039/c4nr07134d>.
- 516
- 517
- 518 38. Ściesiek M, Suffczyński J, Pacuski W, Parlińska-Wojtan M, Smoleński T, Kossacki P, et al. Effect of electron-hole separation on optical properties of individual Cd(Se,Te) quantum dots. *Phys Rev B*. 2016;93(19):1–8; Available from: <https://doi.org/10.1103/physrevb.93.195313>.
- 519
- 520
- 521 39. Barman B, Oszwaldowski R, Schweidenback L, Russ AH, Pientka JM, Tsai Y, et al. Time-resolved magnetophotoluminescence studies of magnetic polaron dynamics in type-II quantum dots. *Phys Rev B Condens Matter Mater Phys*. 2015;92(3); Available from: <https://doi.org/10.1103/physrevb.92.035430>.
- 522
- 523
- 524 40. Prudnikau A, Chuvilin A, Artemyev M. CdSe-CdS nanoheterostructures with efficient photoexcitation of central CdSe region through epitaxially grown CdS wings. *J Am Chem Soc*. 2013;135(39):14476–9; Available from: <https://doi.org/10.1021/ja401737z>.
- 525
- 526
- 527 41. Ivanov SA, Piryatinski A, Nanda J, Tretiak S, Zavdil KR, Wallace WO, et al. Type-II Core/Shell CdS/ZnSe Nanocrystals: Synthesis, Electronic Structures, and Spectroscopic Properties. *J Am Chem Soc*. 2007 Sep 1;129(38):11708–19; Available from: <https://doi.org/10.1021/ja068351m>.
- 528
- 529
- 530 42. Prudnikau A, Chuvilin A, Artemyev M. CdSe-CdS Nanoheterostructures with Efficient Photoexcitation of Central CdSe Region through Epitaxially Grown CdS Wings. *J Am Chem Soc*. 2013 Oct 2;135(39):14476–9; Available from: <https://doi.org/10.1021/ja401737z>.
- 531
- 532
- 533 43. Tessier MD, Spinicelli P, Dupont D, Patriarche G, Ithurria S, Dubertret B. Efficient Exciton Concentrators Built from Colloidal Core/Crown CdSe/CdS Semiconductor Nanoplatelets. *Nano Lett*. 2014 Jan 8;14(1):207–13; Available from: <https://doi.org/10.1021/nl403746p>.
- 534
- 535
- 536 44. García de Arquer FP, Talapin D V, Klimov VI, Arakawa Y, Bayer M, Sargent EH. Semiconductor quantum dots: Technological progress and future challenges. *Science* (1979). 2024 Sep 7;373(6555):eaa28541; Available from: <https://doi.org/10.1126/science.aaz8541>.
- 537
- 538
- 539
- 540 45. Park H, Shin DJ, Yu J. Categorization of Quantum Dots,
- 541
- 542
- 543
- 544
- 545
- 546
- 547
- 548
- 549
- 550
- 551
- 552
- 553
- 554
- 555
- 556
- 557
- 558
- 559
- 560
- 561
- 562

- 563 Clusters, Nanoclusters, and Nanodots. *J Chem Educ.* 2021  
 564 Mar 9;98(3):703–9; Available from: <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.0c01403>.  
 565
- 566 46. Liu X, Liu L, Yang L, Wu X, Chu PK. Optical Identification of  
 567 Topological Defect Types in Monolayer Arsenene by First-  
 568 Principles Calculation. *The Journal of Physical Chemistry C.*  
 569 2016 Nov 3;120(43):24917–24; Available from: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.6b10303>.  
 570
- 571 47. Ściesiek M, Suffczyński J, Pacuski W, Parlińska-Wojtan M,  
 572 Smoleński T, Kossacki P, et al. Effect of electron-hole separa-  
 573 tion on optical properties of individual Cd(Se,Te) quantum  
 574 dots. *Phys Rev B.* 2016;93(19):1–8; Available from: <https://doi.org/10.1103/physrevb.93.195313>.  
 575
- 576 48. Arotiba OA, Orimolade BO, Koiki BA. Visible light-  
 577 driven photoelectrocatalytic semiconductor hetero-  
 578 junction anodes for water treatment applications. *Curr Opin Electrochem.* 2020;22:25–34; Available from: <https://doi.org/10.1016/j.coelec.2020.03.018>.  
 579
- 580 49. Wang ZP, Wang Y, Yu J, Yang JQ, Zhou Y, Mao JY, et al. Type-I  
 581 Core-Shell ZnSe/ZnS Quantum Dot-Based Resistive Switching  
 582 for Implementing Algorithm. *Nano Lett.* 2020;20(7):5562–  
 583 9; Available from: <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.0c02227>.  
 584
- 585 50. Nguyen VD, Dang MT, Nguyen TA, Schall P. Critical Casimir  
 586 forces for colloidal assembly. Vol. 28, *Journal of Physics Con-*  
 587 *densed Matter.* Institute of Physics Publishing; 2016; Available  
 588 from: <https://doi.org/10.1088/0953-8984/28/4/043001>.  
 589
- 590 51. Nguyen TA, Newton A, Veen SJ, Kraft DJ, Bolhuis PG, Schall P.  
 591 Switching Colloidal Superstructures by Critical Casimir Forces.  
 592 *Advanced Materials.* 2017 Sep 13;29(34); Available from: <https://doi.org/10.1002/adma.201700819>.  
 593
- 594 52. Chakraborty A, Das B, Dasgupta I. Unlocking the electronic,  
 595 optical and transport properties of semiconductor coupled  
 596 quantum dots using first principles methods. *Int J Quantum*  
 597 *Chem.* 2023;(October 2022):1–11; Available from: <https://doi.org/10.1002/qua.27101>.  
 598
- 599 53. Lee WS, Kang YG, Woo HK, Ahn J, Kim H, Kim D, et al. De-  
 600 signing High-Performance CdSe Nanocrystal Thin-Film Transistors  
 601 Based on Solution Process of Simultaneous Ligand Ex-  
 602 change, Trap Passivation, and Doping. *Chemistry of Materials.*  
 603 2019;31(22):9389–99; Available from: <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.9b02965.s001>.  
 604
- 605 54. SCM AMS2023, Theoretical Chemistry, Vrije Universiteit, Am-  
 606 sterdam, The Netherlands. 2023;.  
 607
- 608 55. te Velde G, Bickelhaupt FM, Baerends EJ, Fonseca Guerra C,  
 609 van Gisbergen SJA, Snijders JG, et al. Chemistry with ADF. *J*  
 610 *Comput Chem [Internet].* 2001 Jul 15;22(9):931–67; Available  
 611 from: <https://doi.org/10.1002/jcc.1056>.  
 612
- 613 56. Leach A. *Molecular modelling: Principles and Applications.*  
 614 2nd Edition. Pearson; 2001;.  
 615
- 616 57. Perdew JP, Burke K, Ernzerhof M. Generalized Gradient Ap-  
 617 proximation Made Simple. *Phys Rev Lett [Internet].* 1996  
 618 Oct;77(18):3865–8; Available from: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.77.3865>.  
 619
- 620 58. Marian CM. Spin-orbit coupling and intersystem crossing in  
 621 molecules. *WIREs Computational Molecular Science [Inter-*  
 622 *net].* 2012 Mar 1;2(2):187–203; Available from: <https://doi.org/10.1002/wcms.83>.  
 623
- 624 59. van der Laan M, Heemskerck E, Kienhuis F, Diepeveen N, Poonia  
 625 D, Kinge S, et al. Stacking-Order-Dependent Excitonic Prop-  
 626 erties Reveal Interlayer Interactions in Bulk ReS<sub>2</sub>. *ACS Pho-*  
 627 *tonics [Internet].* 2023 Sep 20;10(9):3115–23; Available from:  
 628 <https://doi.org/10.1021/acsp Photonics.3c00477>.  
 629
- 630 60. Lee K, Murray ED, Kong L, Lundqvist BI, Langreth DC. Higher-  
 631 accuracy van der Waals density functional. *Phys Rev B Con-*  
 632 *dens Matter Mater Phys.* 2010;82(8):3–6; Available from: <https://doi.org/10.1103/physrevb.82.081101>.  
 633
- 634 62. Amelia M, Lincheneau C, Silvi S, Credi A. Electrochemical  
 635 properties of CdSe and CdTe quantum dots. *Chem Soc Rev.*  
 636 2012;41(17):5728–43; Available from: <https://doi.org/10.1039/c2cs35117j>.  
 637
- 638 63. Nanavati SP, Sundararajan V, Mahamuni S, Kumar V, Ghaisas  
 639 S V. Optical properties of zinc selenide clusters from first-  
 640 principles calculations. *Phys Rev B Condens Matter Mater*  
 641 *Phys.* 2009;80(24):1–9; Available from: <https://doi.org/10.1103/physrevb.80.245417>.  
 642
- 643 64. Arivarasan A, Sasikala G, Jayavel R. In situ synthesis of  
 644 CdTe:CdS quantum dot nanocomposites for photovoltaic  
 645 applications. *Mater Sci Semicond Process.* 2014;25:238–  
 646 43; Available from: <https://doi.org/10.1016/j.mssp.2013.12.018>.  
 647
- 648 65. Dang MT, Duy NVA, Zaccone A, Schall P, Dinh VA. Structural  
 649 modification enhances the optoelectronic properties of def-  
 650 ect blue phosphorene thin films. *Journal of Physics: Con-*  
 651 *densed Matter [Internet].* 2022;34(28):285702; Available from:  
 652 <https://dx.doi.org/10.1088/1361-648X/ac68be>.  
 653
- 654 66. Dang MT, Bich Thao PT, Ngoc Thao TT, Tien NT. First-principles  
 655 study of electronic and optical properties of small edge-  
 656 functionalized penta-graphene quantum dots. *AIPL Adv [Inter-*  
 657 *net].* 2022 Jun 1;12(6):065008; Available from: <https://doi.org/10.1063/5.0091475>.  
 658
- 659 67. Choi JJ, Luria J, Hyun BR, Bartnik AC, Sun L, Lim YF, et al.  
 660 Photogenerated exciton dissociation in highly coupled  
 661 lead salt nanocrystal assemblies. *Nano Lett.* 2010;10(5):1805–  
 662 11; Available from: <https://doi.org/10.1021/nl100498e>.  
 663
- 664 68. Liu R, Wu D, Feng X, Müllen K. Bottom-Up Fabrication of Photo-  
 665 luminescent Graphene Quantum Dots with Uniform Morphol-  
 666 ogy. *J Am Chem Soc.* 2011 Oct 5;133(39):15221–3; Available  
 667 from: <https://doi.org/10.1021/ja204953k>.  
 668
- 669 69. Groeneveld E, Witteman L, Lefferts M, Ke X, Bals S, Van Ten-  
 670 deloo G, et al. Tailoring ZnSe-CdSe colloidal quantum dots  
 671 via Cation Exchange: From core/shell to alloy nanocrystals.  
 672 *ACS Nano.* 2013;7(9):7913–30; Available from: <https://doi.org/10.1021/nn402931y>.  
 673
- 674 70. Stam M, Almeida G, Ubbink RF, van der Poll LM, Vogel YB, Chen  
 675 H, et al. Near-Unity Photoluminescence Quantum Yield of  
 676 Core-Only InP Quantum Dots via a Simple Postsynthetic InF<sub>3</sub>  
 677 Treatment. *ACS Nano [Internet].* 2024 Jun 4;18(22):14685–  
 678 95; Available from: <https://doi.org/10.1021/acsnano.4c03290>.  
 679
- 680 71. Liu L, Najjar A, Wang K, Du M, Liu S. Perovskite Quantum Dots  
 681 in Solar Cells. *Advanced Science.* 2022;9(7):1–20;.  
 682

# OPTOELECTRONIC PROPERTIES OF SMALL TYPE II CdTe-ZnSe QUANTUM DOTS PASSIVATED BY $\text{InF}_3$ LIGANDS



Use your smartphone to scan this QR code and download this article

## ABSTRACT

In this study, we employ first-principles methods with density functional theory including the spin-orbit coupling effect to investigate the optoelectronic properties of pristine and  $\text{InF}_3$ -ligand-assisted CdTe-ZnSe type II quantum dots. We show that when attaching  $\text{InF}_3$  ligands to type II CdTe-ZnSe quantum dots, the optical absorption spectra of these dots is red-shifted towards the lower energy range with respect to that of the pristine CdTe-ZnSe quantum dots. When we actively increase or decrease the distances between the two single dots inside a type II quantum dot, their band gaps also increase or decrease accordingly. Upon attaching  $\text{InF}_3$  ligands, the band gap of this quantum dot performs a small blue shift compared to the corresponding pristine quantum dot sample. By increasing the distances between the two interior CdTe and ZnSe portions inside the CdTe-ZnSe dots, due to the charge transfer from the ligands to the interior portions, the absorption spectra exhibit a red-shift with a significant increase of the absorption intensity with respect to the case of the pristine type II quantum dots. The results demonstrate the essence of  $\text{InF}_3$  ligands to enhance the light absorption capacity resulting in improving the light-to-electricity conversion efficiency of solar panels embedding CdTe-ZnSe type II quantum dots.

**Key words:** type II quantum dots, CdTe-ZnSe,  $\text{InF}_3$  ligands, solar cells

## History

- Received:
- Accepted:
- Published Online:

DOI :



## Copyright

© VNUHCM Press. This is an open-access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution 4.0 International license.



Cite this article : . OPTOELECTRONIC PROPERTIES OF SMALL TYPE II CdTe-ZnSe QUANTUM DOTS PASSIVATED BY  $\text{InF}_3$  LIGANDS. *Sci. Tech. Dev. J. - Nat. Sci.* 2025; ();1-1.