

*Анотація доповіді на семінарі "Проблеми теоретичної фізики",
присвячений пам'яті академіка Олексія Ситенка 20 лютого 2024*

Андрій Баумкетнер

Інститут фізики конденсованих систем НАН України

Нанокристали свинцево-галогенідного перовскіту як колоїдні наноточки:
теорія, комп'ютерні симуляції та застосування

Нанокристали свинцево-галогенідного перовскіту (LHP NC) викликають великий інтерес з огляду на цікаві перспективи їхніх застосувань, зокрема таких як джерела світла (дисплеї, освітлення) чи квантова генерація світла (джерела окремих фотонів тощо). Основними факторами, що впливають на оптоелектричні властивості нанокристалів є їхні розмір та форма. Останні в значній мірі визначаються типом пасивуючих лігандів, які зв'язуються з поверхнею нанокристалів і забезпечують їхню стабілізацію. Розуміння механізмів формування м'якого інтерфейсу на поверхні перовскітного NC дає ключ до синтезу стабільних наночастинок із наперед заданими властивостями.

Для опису взаємодії лігандів із наночастинками на атомному рівні нами використано теоретичні методи та комп'ютерні симуляції. У доповіді будуть представлені результати, що визначають основні мікроскопічні фактори, які контролюють енергію зв'язування лігандів з NC. На прикладі цвітеріонних систем буде продемонстровано як із використанням цих теоретичних результатів вдалося отримати ліганди з покращеними характеристиками, що підтверджено експериментально.