

Ігор Васильович Білинський,

доктор фізико-математичних наук, професор,
професор кафедри фізики та інформаційних систем
Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка, Україна
професор кафедри фізики
Криворізький державний педагогічний університет, Україна
orcid.org/0000-0002-4221-9225, email: iv.bilynskyi@gmail.com

Роман Ярославович Лешко,

кандидат фізико-математичних наук, доцент,
доцент кафедри фізики та інформаційних систем
Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка, Україна
orcid.org/0000-0002-9072-164X, email: leshkoroman@gmail.com

Ольга Володимирівна Лешко,

вчитель біології та хімії СШ № 1, м. Трускавець, Україна
orcid.org/0000-0001-9646-3189, email: leshkoolya9@gmail.com

Галина Ярославівна Бандура,

аспірантка кафедри фізики та інформаційних систем
Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка, Україна
email: galinka.bandura@gmail.com

Тарас Євстахович Шпитяк,

аспірант кафедри фізики та інформаційних систем
Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка, Україна
email: tasifacij@gmail.com

Володимир Олександрович Камінський,

аспірант кафедри фізики
Криворізький державний педагогічний університет, Україна
email: kaminskyi.v.o@gmail.com

ВПЛИВ ОБМЕЖЕНИХ ТА ІНТЕРФЕЙСНИХ ФОНОНІВ НА МІЖЗОННЕ ПОГЛИНАННЯ СВІТЛА У КВАНТОВИХ ТОЧКАХ CdS

Досліджено вплив обмежених та інтерфейсних фононів на коефіцієнт екситонного поглинання поляризованого світла від його частоти для сферичних квантових точок CdS, які поміщені у діелектричну матрицю SiO₂. Враховано складну структуру валентної зони, а саме її виродження у точці Г, у моделі багатозонної ефективної маси. Обчислення проводились для різних температур (від гелієвих до кімнатних температур) і радіусів сферичної квантової точки гетероструктури CdS/SiO₂. Досліджувалися такі розміри квантових точок, коли енергетичні рівні електрона та дірки достатньо віддалені один від одного. Визначено параметр електрон-фононної взаємодії (фактор Хуанга-Ріса) для різних радіусів квантових точок. Обчислено коефіцієнти поглинання, що зумовлені переходами носіїв заряду між

найнижчими двома оптично активними рівнями у квантовій точці під впливом лінійно-поляризованого світла. Враховано дисперсію квантових точок за розмірами за допомогою розподілу Гауса. Максимальна дисперсія за розмірами становила 5%. Отримано на спектрах поглинання фононні повтори. Зроблено порівняння отриманих результатів із відповідними при врахуванні окремих гілок поляризаційних фононів.

Ключові слова: фактор Хуанга-Ріса, оптичні переходи, фонони, коефіцієнт поглинання..

ВСТУП

Сучасний розвиток напівпровідникових технологій дає змогу отримувати наногетеросистеми різної вимірності та високої якості. Отримано квазідвовимірні, квазіодновимірні та квазінульвимірні системи – квантові точки (КТ). Саме останні демонструють значні перспективи у застосуванні їх у оптоелектроніці як джерела випромінювання білого світла та як детектори електромагнітного випромінювання. Змінюючи розміри КТ, можна налаштувати відповідний детектор на ту чи іншу довжину хвилі. Оскільки КТ мають дискретний спектр, то внаслідок поглинання електромагнітних хвиль можуть відбуватися переходи електрона між рівнями розмірного квантування (внутрізонні переходи) та між дозволеними відповідним рівнями валентної зони і зони провідності (міжзонні переходи). Останні і спричинюють у більшості випадків поглинання електромагнітних хвиль інфрачервоного та видимого діапазонів оптичного спектру [1-4].

Для отримання квантових точок, які поглинають або випромінюють електромагнітні хвилі видимої частини спектру необхідно використовувати широкозонні напівпровідники. Як правило, застосовують гетеросистеми з КТ на основі сполук A_2B_6 , A_3B_5 . Фізичні властивості таких напівпровідників значною мірою визначається поляризаційними коливаннями, їх впливом на енергію, часи релаксацій електронів, дірок, екситонів [5-13].

Електричні та оптичні властивості напівпровідникових наногетеросистем на основі сполук A_2B_6 інтенсивно досліджуються з огляду на значне коло різних застосувань. При зменшенні розмірів КТ значно змінюються властивості гетеросистеми через тривимірне квантове просторове обмеження електронів та дірок. Суттєва зміна властивостей досягається тоді, коли розміри нанокристалів стають співмірними або меншими за борівський радіус екситона [14, 15].

Крім зміни оптичних властивостей, зменшення розміру квантових точок часто спричиняє структурні зміни у просторовому розташуванні атомів всередині КТ. Відомо [16], що масивний кристал CdS характеризується стабільною гексагональною структурою аж до точки плавлення. Метастабільна кубічна фаза існує для тонких плівок, нанокристалічних порошків, колоїдних квантових точок [17-21]. Існування кубічної та гексагональної фаз в гетеросистемах з CdS досліджувалось в [22]. У роботі [23] проведено кількісний аналіз відносного об'єму зазначених фракцій CdS та зміну процентного складу КТ з кубічними та гексагональними фазами при відпалі. Зокрема, встановлено, що збільшення температури відпалу сприяє збільшенню кількості КТ з ґраткою типу вюрциту. Для температури відпалу 773K структура всіх КТ стає гексагональною.

У роботі [14, 17, 22] досліджено отримані КТ CdS методом хімічного осадження у воді та розчинах водорозчинних полімерів. Методом дифракції X-променів встановлено, що наночастинки, як правило (більше 80%) характеризуються кубічною симетрією.

Квантові точки CdS відзначаються ще однією особливістю. До цього часу однозначно не встановлено залежності величини екситон-фононної взаємодії від розмірів КТ у гетеросистемах зі сполуками A_2B_6 , зокрема у роботі [24] на основі аналізу раманівського

спектру наночастинок як кубічної, так і гексагональної фаз зроблено висновок про зменшення електрон-фононної взаємодії при зменшенні розмірів КТ. Аналогічні результати наведені в дослідженнях [23, 25]. Результати аналогічних вимірювань в гетеросистемах з КТ $\text{CdS}_x\text{Se}_{1-x}$ [26] та ZnSe [27] трактуються на основі протилежного висновку про електрон-фононну взаємодію – росту фактора Хуанга-Ріса при зменшенні розмірів КТ.

На основі викладеного вище, метою даної роботи є:

- визначення енергії екситона у КТ CdS ;
- дослідження впливу поляризаційних зарядів на екситонні стани;
- обчислення фактору Хуанга-Ріса для обмежених та інтерфейсних фононів.

МОДЕЛЬ ГЕТЕРОСИСТЕМИ

Розглядається наногетеросистема з сферичними квантовими точками широкозонного напівпровідника, які знаходяться у матриці з більшою забороненою зоною. Для дослідження спектрів поглинання та люмінесценції у видимій частині спектру необхідно обчислити енергію електрон-діркових пар КТ. Гамільтоніан пари двох зарядів, що взаємодіють між собою, має вигляд:

$$\hat{H}_{ex} = \hat{H}_e + \hat{H}_h + W. \quad (1)$$

У наближенні ефективної маси гамільтоніан електрона

$$\hat{H}_e = -\frac{\hbar^2}{2} \vec{\nabla} \frac{1}{m_e(\vec{r}_e)} \vec{\nabla} + V_e(\vec{r}_e), \quad (2)$$

де $V_e(\vec{r}_e) = \begin{cases} 0, & r_e \leq a \\ U_{0e}, & r_e > a \end{cases}$, $m_e(\vec{r}_e) = \begin{cases} m_1, & r_e \leq a \\ m_2, & r_e > a \end{cases}$, a – радіус квантової точки. Надалі

будемо досліджувати гетероструктури з КТ кристалу CdS кубічної фази, для якої в Γ -точці зони Брілюена характерне виродження зони важких та легких дірок. Відомо також, що енергія спін-орбітальної взаємодії в CdS ($\Delta_{so} = 70$ меВ) є малою у порівнянні із шириною забороненої зони $E_g = 2.56$ еВ. Якщо знехтувати спін-орбітальною взаємодією, то дірковий гамільтоніан можна представити формулою [28]:

$$\hat{H}_h = \frac{1}{2}(\gamma_1 + 4\gamma) \hat{\mathbf{p}}^2 - 3\gamma (\vec{\mathbf{p}} \vec{\mathbf{J}})^2 + U(r_h), \quad (3)$$

де $\vec{\mathbf{J}} = i\vec{\mathbf{J}}_x + j\vec{\mathbf{J}}_y + k\vec{\mathbf{J}}_z$ – оператор спінового моменту дірки $j = 1$, $\gamma_1, \gamma = 1/5(3\gamma_3 + 2\gamma_2)$ – параметри Латтінджера, які є характеристикою кристалу, тому є різними для КТ і матриці. Через них можна виразити масу важкої та легкої дірки кристалу:

$$m_{hh} = \frac{1}{\gamma_1 - 2\gamma}; \quad m_{lh} = \frac{1}{\gamma_1 + 2\gamma}. \quad (4)$$

Потенціал обмеження для дірки, як і для електрона, вибрано у вигляді прямокутного потенціального бар'єру:

$$U(r_h) = \begin{cases} 0, & r_h \leq a, \\ U_{0h}, & r_h > a. \end{cases} \quad (5)$$

Зважаючи на малу різницю між діелектричними проникливостями КТ та матриці, взаємодію між електроном та діркою врахуємо через кулонівський потенціал

$$W = -\frac{e^2}{\varepsilon|\vec{r}_e - \vec{r}_h|}, \text{ де } \varepsilon - \text{діелектрична проникність кристалу CdS.}$$

ЕЛЕКТРОННІ, ДІРКОВІ ТА ЕКСИТОННІ СТАНИ

Для знаходження екситонних станів спочатку було визначено електронні і діркові стани окремо. Хвильову функцію електрона, визначено на основі розв'язку рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (2). Її подано у вигляді добутку радіальної складової, яка виражається сферичними функціями Бесселя першого роду і модифікованими сферичними функціями Бесселя другого роду та кутовою частиною (сферичні гармоніки):

$$\Psi_{e,n,l,m}(\vec{r}_e) = R_{e,n,l}(r_e) Y_{l,m}(\Omega_e) = \begin{cases} A_{n,l} j_l(k_{n,l} r_e / a), & r \leq a \\ B_{n,l} k_l(x_{n,l} r_e / a), & r > a \end{cases} \times Y_{l,m}(\Omega_e), \quad (6)$$

де $k_{n,l} = a\sqrt{2m_{e1}^* E_{e,n,l}}$, $x_{n,l} = a\sqrt{2m_{e2}^* (U_0 - E_{e,n,l})}$. Енергія електрона $E_{e,n,l}$ та константи $A_{n,l}$, $B_{n,l}$ знайдено з граничних умов (неперервності хвильової функції і потоку густини ймовірності на межі КТ) та умови нормування. Тут l – орбітальне квантове число, m – магнітне квантове число ($-l \leq m \leq l$), n – номер розв'язку дисперсійного рівняння при заданому l .

Хвильову функцію, що є розв'язком рівняння Шредінгера для дірки з гамільтоніаном (3) у сферично-симетричному полі, можна задати добутком власних функцій оператора повного моменту імпульсу $\vec{F} = \vec{L}_h + \vec{J}$ і радіальних функцій. Існують три типи станів [29-30]:

$$\begin{cases} \Psi_{f,M}^{f-1,f+1}(r_h, \theta_h, \varphi_h) = R_f^{f-1}(r_h) \Phi_{f,M}^{f-1}(\Omega_h) + R_f^{f+1}(r_h) \Phi_{f,M}^{f+1}(\Omega_h), & f \geq 1; \quad l_h = f-1, f+1; \\ \Psi_{f,M}^f(r_h, \theta_h, \varphi_h) = R_f^f(r_h) \Phi_{f,M}^f(\Omega_h), & f \geq 1; \quad l_h = f; \\ \Psi_{0,0}^1(r_h, \theta_h, \varphi_h) = R_0^1(r_h) \Phi_{0,0}^1(\Omega_h), & f = 0; \quad l_h = 1, \end{cases} \quad (7)$$

де введено спінори, що відповідають спіну дірки $j = 1$:

$$\Phi_{f,M}^{l_h}(\Omega_h) = \sum_{m_h=-l_h}^{l_h} \sum_{m_j=-j}^j C_{l_h, m_h; j, m_j}^{f, M} Y_{l_h, m_h}(\Omega_h) \chi_{h, m_j}, \quad (8)$$

$f(f+1)$, $l_h(l_h+1)$, M , m_h , m_j у вибраній системі одиниць є власними значеннями операторів \hat{F}^2 , \hat{L}_h^2 , \hat{F}_z , \hat{L}_z , \hat{J}_z для дірки відповідно, χ_{h, m_j} – трикомпонентні спінові функції дірки, Y_{l_h, m_h} – сферичні гармоніки, які є власними функціями оператора \hat{L}_h^2 . Тут також використано коефіцієнти Клебша-Жордана $C_{l_h, m_h; j, m_j}^{f, M}$.

Якщо ж знехтувати складною структурою валентної зони і вважати, що дірка характеризується однією масою $m_{lh} = m_{hh} \equiv m_h^*$, тоді з (4) випливає, що $\gamma_1 = 1/m_h^*$, $\gamma = 0$. За цих умов розв'язки рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (3) можна подати у вигляді:

$$\Psi_{h; n_h, l_h, m_h}(\vec{r}_h) = R_{h; n_h, l_h}(r_h) Y_{l_h, m_h}(\Omega_h). \quad (9)$$

На основі поданих формул проведено обчислення енергетичного спектру електрона та дірки гетероструктури CdS/SiO₂ з урахуванням складної структури валентної зони

та нехтуючи нею. Для обчислень використано такі параметри гетеросистеми [31-33]: CdS – $\gamma_1 = 1.71$, $\gamma = 0.62$, $\varepsilon = 5.5$; SiO₂ – $\gamma_1 = 4.22$, $\gamma = 0.39$, $\varepsilon = 3$; $m_1^* = 0.2$, $m_{hh} = 2.128$, $m_h = 0.339$, $E_g = 2.56 \text{ eV}$, $U_{0e} = 2.7 \text{ eV}$, $U_{0h} = 4 \text{ eV}$.

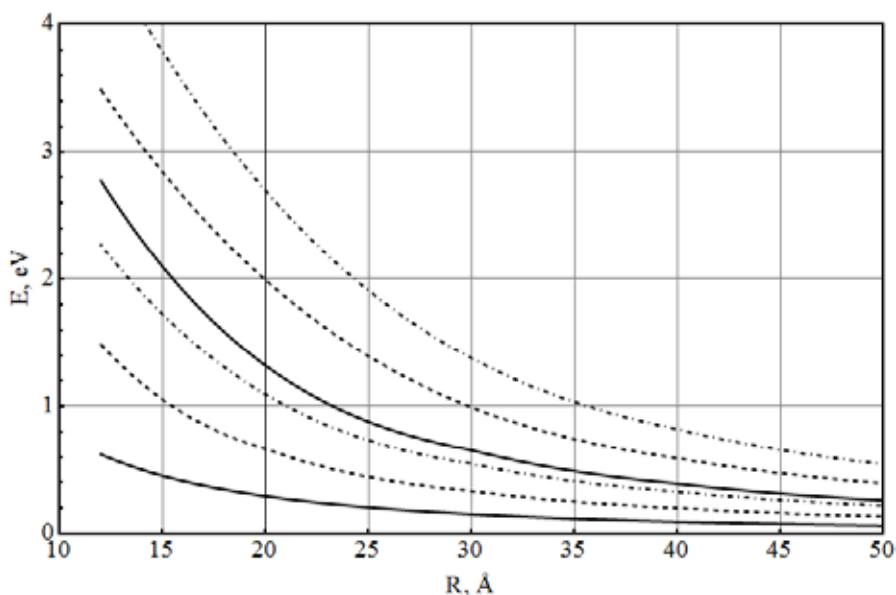


Рис. 1. Енергія електрона у сферичній КТ. Енергію s-станів позначено суцільними кривими, p-станів – штриховими, d-станів – штрих-пунктирними

На рисунку 1 подано залежності енергії електрона від радіуса КТ для основного та декількох збуджених станів.

Видно, що збільшення радіуса КТ супроводжується монотонним зниженням енергії всіх станів електрона. При малих радіусах $R < 25 \text{ \AA}$ відстань між основним та збудженими станами стає більшою за енергію повздовжнього поляризаційного фонуна кристалу CdS, що можна врахувати при дослідженні електрон(екситон)-фонуноної системи гетероструктури.

Аналогічні обчислення енергії проведено і для діркових станів (рис. 2). Кривою hh позначено енергію основного стану дірки, якщо знехтувати складною структурою валентної зони і в однозонному наближенні вважати, що маса дірки дорівнює масі важкої дірки, тобто $m_h^* = 2.128$. Відповідно крива hh – аналогічна енергія основного стану дірки за умови, що $m_h^* = 0.339$. Якщо ж врахувати складну структуру валентної зони, то енергію дірки зображено кривими 1–4. Енергія, що позначена кривою 1, відповідає найменшій енергії 1p-стану $\psi_{1,M}^1(r_h, \theta_h, \varphi_h)$ ($f = 1, l_h = 1, n_f = 1$), крива 2 – найменшій енергії змішаного 1sd-стану $\psi_{1,M}^{0,2}(r_h, \theta_h, \varphi_h)$ ($f = 1, l_h = 0, 2, n_f = 1$), крива 3 – 1d-стану $\psi_{2,M}^2(r_h, \theta_h, \varphi_h)$ ($f = 2, l_h = 2, n_f = 1$); крива 4 – змішаному 1pf-стану $\psi_{2,M}^{1,3}(r_h, \theta_h, \varphi_h)$ ($f = 2, l_h = 1, 3, n_f = 1$). Тут n_f – номер розв'язку відповідного дисперсійного рівняння для конкретного стану дірки. Якщо ввести підгоночне значення ефективної маси дірки $m_h^* = (m_{hh} + m_h) / 2 = 1.07$, то в однозонному наближенні енергія дірки зобразиться точковими кривими.

З рисунка 2 видно, що підбором ефективної маси дірки можна добитись досить доброї збіжності енергії основного стану частинки в однозонному та багатозонному наближеннях. Проте, різниця для збуджених станів у цих підходах стає досить значною. Отже, послідовна теорія, яка враховує існування всіх діркових станів, повинна ґрунтуватися лише на багатозонній моделі напівпровідника CdS.

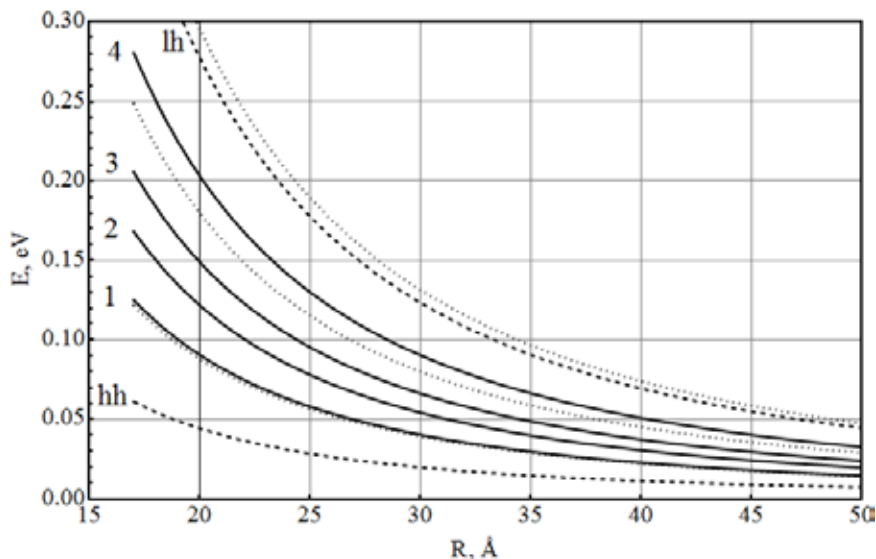


Рис. 2. Енергія дірки з урахуванням складної структури валентної зони (суцільні криві), та нехтуючи нею (штрихові криві)

Для обчислення хвильової функції та енергії електрон-діркової пари (екситона) для найнижчих станів використано теорію збурень. Хвильову функцію електрона в 1s-стані ($l = 0, n = 1, m = 0$) записано у такій формі:

$$\Psi_{e;1,0,0}(\vec{r}_e) = R_{e;1,0}(r_e) Y_{0,0}(\Omega_e), \quad (10)$$

а для дірки у 1sd-стані з квантовими числами ($f = 1, l_h = 0, 2, n_f = 1, M = 0, \pm 1$) хвильова функція має такий вигляд:

$$\Psi_{1,M}^{0,2}(r_h, \theta_h, \varphi_h) = R_1^0(r_h) \Phi_{1,M}^0(\Omega_h) + R_1^2(r_h) \Phi_{1,M}^2(\Omega_h). \quad (11)$$

Тоді для малих розмірів КТ хвильову функцію електрон-діркової пари (ЕДП) можна подати у вигляді добутку електронної та діркової функцій:

$$\Psi_M(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = \Psi_e(\vec{r}_e) \Psi_{1,M}^{0,2}(r_h, \theta_h, \varphi_h). \quad (12)$$

Енергія електрон-діркової пари без врахування кулонівської та обмінної взаємодії є 3-кратно виродженою за квантовим числом M . Тому для знаходження повної енергії екситона та відповідних хвильових функцій використано теорію збурень для вироджених станів. Хвильову функцію екситона нульового наближення вибрано у вигляді лінійної комбінації функцій (12):

$$\Psi_{ex} = \sum_M C_M \Psi_M(\vec{r}_e, \vec{r}_h). \quad (13)$$

Підстановкою (13) у (1) можна отримати систему рівнянь:

$$\sum_M C_M \left\{ (E_e^0 + E_h^0 + E_g - E_{ex}) \delta_{M'M} + \langle \psi_{M'}^+ | W | \psi_M \rangle \right\} = 0. \quad (14)$$

Обчислення кулонівського матричного елемента для зазначених вище квантових чисел дає результат:

$$\langle \psi_{M'}(\vec{r}_e, \vec{r}_h) | W | \psi_M(\vec{r}_e, \vec{r}_h) \rangle = -\frac{1}{\varepsilon_1} \delta_{M',M} Q_{M',M} I_{02} - \frac{\mu_1 - \mu_2}{\mu_1 \mu_2} \frac{1}{a} \delta_{M',M} Q_{M',M} = K \delta_{M',M} Q_{M',M}, \quad (15)$$

де $Q_{M',M} = \delta_{M',M}$ тільки для $-1 \leq (M', M) \leq 1$, що і виконується у цьому випадку,

$$K = -\frac{1}{\varepsilon_1} I_{02} - \frac{\mu_1 - \mu_2}{\mu_1 \mu_2} \frac{1}{a}, \quad (16)$$

$$I_{02} = \int dr_h dr_e r_e^2 r_h^2 |R_{e,1,0}(r_e)|^2 \left(|R_1^0(r_h)|^2 + |R_1^2(r_h)|^2 \right) \begin{cases} \frac{1}{r_e}, & r_h < r_e, \\ \frac{1}{r_h}, & r_h > r_e. \end{cases} \quad (17)$$

Аналогічні обчислення проведено для випадку, коли електрон e в 1s-стані, а дірка у 1p-стані з квантовими числами ($f = 1, l_h = 1, n_f = 1, M = 0, \pm 1$):

$$\psi_{1,M}^1(r_h, \theta_h, \varphi_h) = R_1^1(r_h) \Phi_{1,M}^1(\Omega_h). \quad (18)$$

Враховуючи усі знайдені матричні елементи, отримано енергію основного та збудженого станів ЕДП.

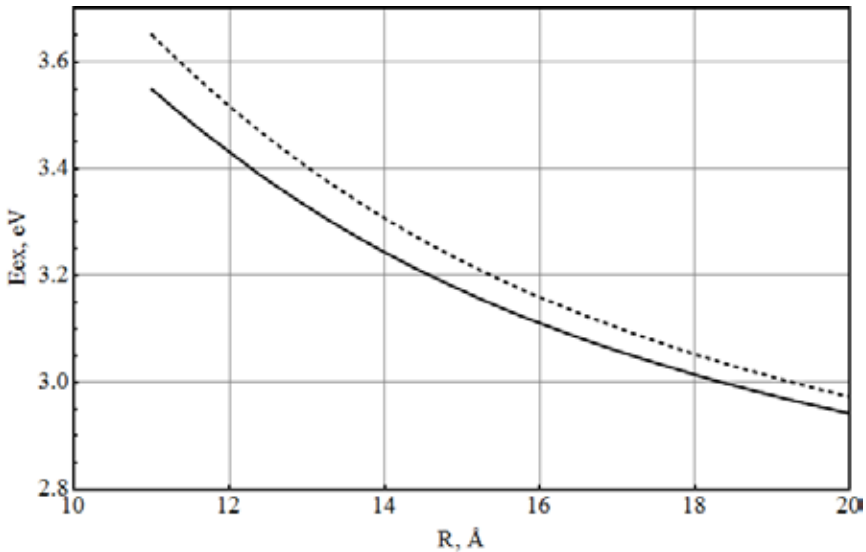


Рис. 3. Енергія ЕДП у КТ

На рисунку 3 подано результати обчислень основного та збудженого стану електрон-діркової пари. Видно що в області малих розмірів КТ $R < 20 \text{ \AA}$ відстань між енергетичними рівнями екситона стає більшою за енергію оптичного фонона кристалу CdS. У цій області розмірів квантових точок при врахуванні впливу поляризаційних фононів на екситонні стани можна скористатись адіабатичним наближенням.

ВПЛИВ ПОЛЯРИЗАЦІЙНИХ КОЛИВАНЬ НА ЕНЕРГІЮ ЕКСИТОНА

Гамільтоніан електрон-діркової пари (екситона) та фононої системи у квантовій точці:

$$\widehat{H} = \widehat{H}_{ex} + \widehat{H}_{ph} + \widehat{H}_{int}, \quad (19)$$

де $\widehat{H}_{ex} = \sum_{nm'} E_{nm'} a_{nm'}^+ a_{nm'}$, $\widehat{H}_{ph} = \sum_{slm} \Omega_{slm} b_{slm}^+ b_{slm}$ – оператори ЕДП та поляризаційних фононів, відповідно $\widehat{H}_{int} = \sum \Phi_{n_1 n_1'}^{n_2 n_2'}(slm) a_{n_2 n_2'}^+ a_{n_1 n_1'} (b_{slm}^+ + b_{sl-m})$ – оператор взаємодії поляризаційних фононів з ЕДП; $a_{nm'}^+ (a_{nm'})$ – оператор народження (знищення) електрон-діркової пари, коли електрон перебуває у стані n , а дірка – у стані n' , енергія пари – $E_{nm'}$; $b_{slm}^+ (b_{slm})$ – оператор народження (знищення) фонона вітки s з орбітальним та азимутними квантовими числами l і m , енергія якого Ω_{slm} , $\Phi_{n_1 n_1'}^{n_2 n_2'}(slm)$ – функція зв'язку фонона з електрон-дірковою парою.

Запишемо оператор взаємодії у вигляді суми:

$$\widehat{H}_{int} = \widehat{H}_{int}^{(0)} + \widehat{H}_{int}^{(1)}. \quad (20)$$

Перший доданок не враховує міжрівневі переходи ЕДП через взаємодію електрон-діркової пари з фононами:

$$\widehat{H}_{int}^{(0)} = \sum_{\substack{n_1 n_1' \\ slm}} \Phi_{n_1 n_1'}^{n_1 n_1'}(slm) a_{n_1 n_1'}^+ a_{n_1 n_1'} (b_{sl-m}^+ + b_{slm}), \quad (21)$$

а другий доданок важливий при малих міжрівневих відстанях, таких, що $\Delta E_{nm'} \leq \Omega_{slm}$:

$$\widehat{H}_{int}^{(1)} = \sum_{\substack{n_1 n_2 (n_1 \neq n_2) \\ n_1' n_2' (n_1' \neq n_2') \\ slm}} \Phi_{n_1 n_1'}^{n_2 n_2'}(slm) a_{n_2 n_2'}^+ a_{n_1 n_1'} (b_{sl-m}^+ + b_{slm}). \quad (22)$$

Надалі будемо досліджувати КТ малих розмірів, тому основним буде оператор (21), а другий доданок вважаємо малою поправкою. Зручно ввести позначення: $slm = m$, $n_1 m_1 = n$, $\Phi_{n_1 n_1'}^{n_1 n_1'}(slm) = \Phi(n, m)$.

Гамільтоніан (9) з оператором (21) можна спростити за допомогою унітарного перетворення, переходячи від бозонних операторів $a_{nm'}$, b_m до нових бозонних операторів A_n , β_m :

$$S = \exp \left\{ \sum_{nm} A_n^+ A_n (\Lambda_{nm}^* \beta_m^+ - \Lambda_{nm} \beta_{-m}) \right\}, \quad b_m = S \beta_m S^+, \quad \beta_m = S^{-1} b_m S,$$

де $\Lambda_{nm} = \frac{\Phi(n, m)}{\Omega_m}$. Можна довести, що

$$b_m = \beta_m \sum_n \Lambda_{nm} A_n^+ A_n, \quad a_n^+ = \exp \left\{ - \sum_m \left(\Lambda_{nm}^* \beta_m^+ - \Lambda_{nm} \beta_m \right) \right\} A_n \equiv e^{-\hat{\sigma}} A_n.$$

Для малих концентрацій електрон-діркових пар в системі отримуємо, гамільтоніан екситон-фононої системи у вигляді:

$$\hat{H} = \sum_n \tilde{E}_n A_n^+ A_n + \sum_m \Omega_m \beta_m^+ \beta_m, \quad (23)$$

де $\tilde{E}_n = E_n - \sum_m \Lambda_{nm}^2 \Omega_m$ – перенормована взаємодією з фонами енергія екситона.

Діелектрична проникність гетеросистеми виражається через Фур'є-образ загаяної функції Гріна [34]:

$$\varepsilon(\tilde{\omega}) = \tilde{\varepsilon}_0 - \frac{4\pi\omega_n d^2 N_{KT}}{d_{ez}} G_n(\tilde{\omega}), \quad (24)$$

де $\tilde{\omega} = \omega + i\eta$, $\eta \rightarrow 0$, $\vec{d} = e \langle n | \vec{r} | 0 \rangle$ – дипольний момент переходу, N_{KT} – концентрація КТ, $\tilde{\varepsilon}_0$ – діелектрична проникність, зумовлена іншими збудженими станами, $G_n(\tilde{\omega}) = \frac{1}{\hbar} \int e^{i\tilde{\omega}t} \langle \langle a_n(t), a^+(0) \rangle \rangle dt$, $\langle \langle a_n(t), a^+(0) \rangle \rangle = G_n(t) = -i\Theta(t) S_p \{ \rho_0 [a_n(t), a^+(0)] \}$.

У функції Гріна усереднення ведеться за вакуумним станом електрон-діркової пари та розподілом Гібса фононої підсистеми $\rho_0 = \frac{1}{Z} e^{-\frac{\hat{H}_{ph}}{k_B T}}$. Оператори $a_n(t)$ та $a_n(0)$ можна виразити через оператори A_n і β_n :

$$a_n(t) = e^{\frac{iHt}{\hbar}} a_n(0) e^{-\frac{iHt}{\hbar}} = e^{-\hat{\sigma}(t)} e^{-\frac{i\tilde{E}_n t}{\hbar}} A_n, \quad a_n(0) = e^{\hat{\sigma}(0)} A_n^+,$$

де

$$\hat{\sigma}(t) = \sum_m \left(\Lambda_{nm}^* e^{\frac{i\Omega_m t}{\hbar}} \beta_m^+ - \Lambda_{nm} e^{-\frac{i\Omega_m t}{\hbar}} \beta_m \right).$$

Тоді функція Гріна екситон-фононої системи буде мати вигляд:

$$G_n(t) = -i\Theta(t) \langle e^{-\hat{\sigma}(t)} e^{\hat{\sigma}(0)} \rangle \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \tilde{E}_n t \right). \quad (25)$$

Використовуючи тотожності для добутку експонент від бозонних операторів, отримуємо

$$\langle e^{-\hat{\sigma}(t)} e^{\hat{\sigma}(0)} \rangle = \exp \left\{ \sum_m \left[|\Lambda_{nm}|^2 e^{-\frac{i\Omega_m t}{\hbar}} (\bar{v}_m + 1) + |\Lambda_{nm}|^2 e^{\frac{i\Omega_m t}{\hbar}} \bar{v}_m - |\Lambda_{nm}|^2 (2\bar{v}_m + 1) \right] \right\} \equiv e^{g(t)},$$

де $\bar{v}_m = \frac{1}{e^{\frac{\Omega_m}{k_B T}} - 1}$ – середнє число фононів з енергією Ω_m при температурі системи T .

Отже, фур'є-образ функції Гріна дорівнює:

$$G_n(\tilde{\omega}) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^{\infty} \exp\left\{i\left[\omega - \frac{1}{\hbar}\tilde{E}_n + i\eta\right]t + g(t)\right\} dt. \quad (26)$$

Параметр η формально враховує процеси екситонної релаксації. Надалі функцію $g(t)$ варто надалі записати так:

$$g(t) = -g_0 + \sum_m |\Lambda_{nm}|^2 \left((\bar{v}_m + 1) e^{-\frac{i}{\hbar}\Omega_m t} + \bar{v}_m e^{\frac{i}{\hbar}\Omega_m t} \right),$$

$$\text{де } g_0 = \sum_m |\Lambda_{nm}|^2 (2\bar{v}_m + 1).$$

Функцію Гріна (26) ЕДП можна подати в іншому вигляді:

$$G_n(\tilde{\omega}) = -\frac{i}{\hbar} e^{-g_0} \int_0^{\infty} \sum_{k,l} \frac{1}{k!!l!!} e^{i\left(\omega - \frac{1}{\hbar}\tilde{E}_n + i\eta\right)t} \left(\sum_m |\Lambda_{nm}|^2 (\bar{v}_m + 1) e^{-\frac{i}{\hbar}\Omega_m t} \right)^k \left(\sum_m |\Lambda_{nm}|^2 \bar{v}_m e^{\frac{i}{\hbar}\Omega_m t} \right)^l dt. \quad (27)$$

Для однієї гілки фононів, енергія яких не залежить від квантових чисел (обмежені фонони) вираз для $G_n(\omega)$ спрощується:

$$G_n(\tilde{\omega}) = e^{-g_0} \sum_p e^{-\frac{\Omega_0 p}{2k_B T}} \frac{1}{\hbar\omega - \tilde{E}_n - \Omega_0 p + i\eta\hbar} I_p \left(2 \sum_m |\Lambda_{nm}|^2 \sqrt{\bar{v}_0(\bar{v}_0 + 1)} \right), \quad (28)$$

$$\text{де } I_p(z) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(z/2)^{2l+p}}{l!(l+p)!} - \text{функція Бесселя, } \Omega_0 \equiv \Omega_L = \hbar\omega_L - \text{енергія обмежених}$$

фононів, $p = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$, $p + l \geq 0$.

Інтерфейсні фонони характеризуються залежною від орбітального квантового числа енергією (частотою). Для визначення енергії інтерфейсних фононів необхідно розв'язати дисперсійне рівняння [35]:

$$l \cdot \varepsilon_0(\omega) + (l+1) \cdot \varepsilon_1(\omega) = 0,$$

$$\text{де } \varepsilon_i(\omega) = \varepsilon_{i\infty} \frac{\omega^2 - \omega_{iL}^2}{\omega^2 - \omega_{iT}^2}. \text{ Врахування цих фононів у функції Гріна потребує}$$

використання формул (26-27).

Функція екситон-фононної взаємодії для обмежених фононів визначається формулою:

$$\Phi(s_0 l m) = \sqrt{\frac{4\pi\Omega_L e^2}{a^3} \left(\frac{1}{\varepsilon_{\infty}} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right)} \frac{1}{k_{s_0} |j_{l-1}(k_{s_0} a)|} \times F(s_0 l m), \quad (29)$$

$$\text{де } F(s_0 l m) = \int |\Psi_{ex}|^2 \left(j_l(k_{s_0} r_h) Y_{lm}(\vartheta_h, \varphi_h) - j_l(k_{s_0} r_e) Y_{lm}(\vartheta_e, \varphi_e) \right) d\vec{r}_e d\vec{r}_h, \quad k_{s_0} = \frac{s_0}{a}, \quad s_0 -$$

номер розв'язку рівняння $j_l(k_{s_0} a) = 0$.

Функція взаємодії екситона з інтерфейсними поляризаційними фононами має вигляд:

$$\Phi(slm) = \left(\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \delta_{l=0} \delta_{m=0} \right) \cdot (F_{lm}^{f_e} (\text{електрона}) - F_{lm}^{f_h} (\text{дірки})), \quad (30)$$

$$\text{де } (F_l^s)_{\rho_1 l_1}^{\rho_2 l_2} = e \sqrt{\frac{2\pi\Omega_{ls}}{r_0 Y_{ls}}} \left(\int_0^{r_0} R_{\rho_2 l_2}^{0*}(r) R_{\rho_1 l_1}^0(r) \left(\frac{r}{r_0}\right)^l r^2 dr + \int_{r_0}^{\infty} R_{\rho_2 l_2}^{1*}(r) R_{\rho_1 l_1}^1(r) \left(\frac{r_0}{r}\right)^{l+1} r^2 dr \right),$$

$$Y_{ls} = \frac{l(\varepsilon_{00} - \varepsilon_{0\infty})}{\left(\frac{\Omega_l^s}{\Omega_{T0}} - \frac{\Omega_{T0}}{\Omega_l^s}\right)} + \frac{(l+1)(\varepsilon_{10} - \varepsilon_{1\infty})}{\left(\frac{\Omega_l^s}{\Omega_{T1}} - \frac{\Omega_{T1}}{\Omega_l^s}\right)}.$$

Функцію Гріна екситон-фононої системи для обмежених фононів можна подати формулою:

$$G_{очн}(\tilde{\omega}) = e^{-g_0} \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\Omega_0}{2k_B T} n} I_n \left(2 \sum_{s_0 l m} \frac{|\Phi_0(s_0 l m)|^2}{\Omega_0^2} \sqrt{\bar{\nu}_0(\bar{\nu}_0 + 1)} \right) \frac{1}{\hbar\omega - E_{ex}^0 + \Omega_0 \sum_{s_0 l m} \frac{|\Phi_0(s_0 l m)|^2}{\Omega_0^2} - n\Omega_0 + i\eta\hbar},$$

де

$$g_0 = \sum_{s_0 l m} \frac{|\Phi_0(s_0 l m)|^2}{\Omega_0^2} (2\bar{\nu}_0 + 1) = g_{H-R} (2\bar{\nu}_0 + 1), \quad (31)$$

а

$$g_{H-R}^o = \sum_{s_0 l m} \frac{|\Phi_0(s_0 l m)|^2}{\Omega_0^2} - \text{фактор Хуанга-Ріса (ФХР)}. \quad (32)$$

Аналогічний коефіцієнт для інтерфейсних фононів має вигляд: $g_{H-R}^i = \sum_{s_0 l m} \frac{|\Phi_i(s_0 l m)|^2}{\Omega_{sl}^2}$, де s – номер гілки інтерфейсних фононів.

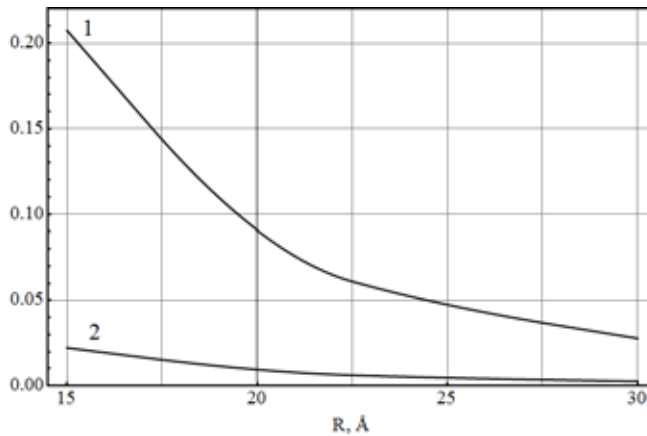


Рис. 4. Фактор Хуанга-Ріса як функція радіуса КТ для різних фононних гілок:

1 – g_{H-R}^o , 2 – g_{H-R}^i

Коефіцієнти g_{H-R}^o і g_{H-R}^i задають величину екситон-фононної взаємодії обмежених та інтерфейсних поляризаційних фононів. ФХР визначають внесок фононних гілок екситонного поглинання та значення перенормованої енергії екситона, що зумовлена екситон-фононною взаємодією. Результат проведених нами обчислень подано на рисунку 4. Видно, що для обох типів фононних гілок ФХР гетеросистеми CdS/SiO₂ зі зменшенням радіусу КТ монотонно зростає, що однозначно можна трактувати як підсилення екситон-фононної взаємодії у гетеросистемі CdS/SiO₂.

ЕКСИТОННЕ ПОГЛИНАННЯ СВІТЛА У ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ

Повертаючись до формул (26)–(31), можна визначити коефіцієнт екситонного поглинання світла:

$$\alpha(\omega) = \text{Im} \varepsilon(\omega). \quad (33)$$

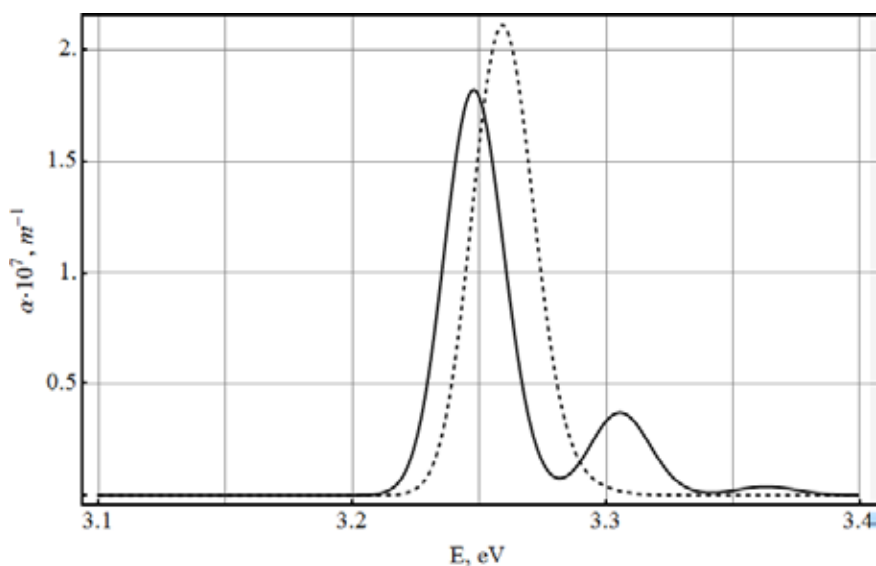


Рис. 5. Коефіцієнт екситонного поглинання світла із врахуванням тільки обмежених фононів (суцільна) при $T=4.2\text{K}$, $\sigma=1\%$ та лише інтерфейсних фононів (штрихова крива)

У цих формулах зроблено припущення, що всі КТ однакові за розміром, що яка б методика вирощування наногетеросистеми не використовувалася, завжди сукупність КТ у матриці характеризується дисперсією за розмірами. Будемо вважати, що розподіл КТ за розмірами апроксимується функцією Гауса:

$$g(\xi, \bar{a}, a) = \frac{1}{\zeta\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(a-\bar{a})^2}{2\zeta^2}\right), \quad (34)$$

де a – радіус будь-якої КТ (змінна величина), ζ – півширина розподілу. Для характеристики дисперсій за розмірами КТ зручно ввести параметр $\sigma = \frac{\zeta}{a} \cdot 100\%$.

На рисунку 5 подано коефіцієнт поглинання, отриманий з формули (33) при середньому радіусі КТ $\bar{a} = 1.5 \text{ нм}$. Вважаємо, що $T = 4.2 \text{ K}$. В області енергії переходу із врахуванням обмежених фононів є три піки поглинання: один із них зумовлений переходами носіїв заряду між оптично активними рівнями у КТ (безфононна смуга), а інші виникають завдяки електрон-фононній взаємодії і є фононними повторами. У випадку врахування взаємодії екситонів із інтерфейсними фононами (штрихова крива) фононних повторів не видно через меншу величину екситон-фононної взаємодії.

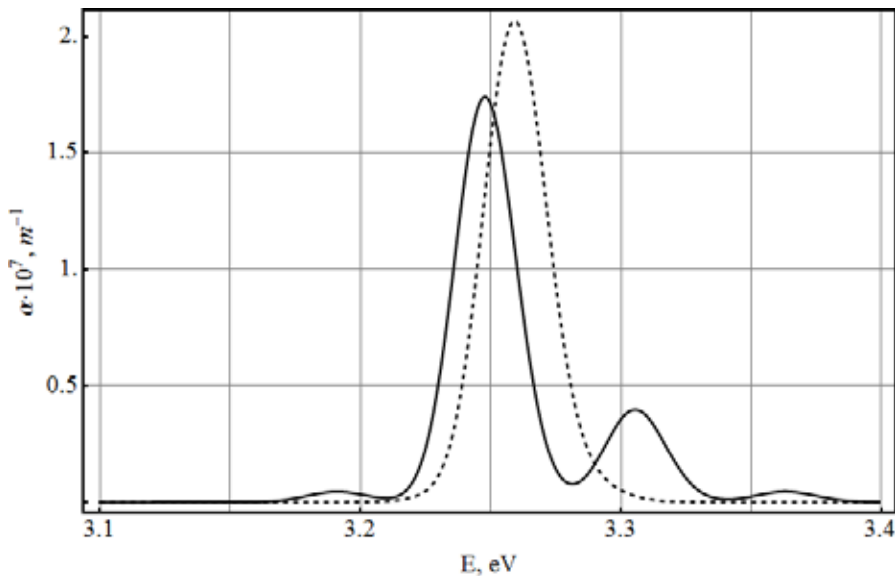


Рис. 6. Коефіцієнт поглинання світла за умови, що $T=300\text{K}$, $\sigma=1\%$: суцільна крива – внесок обмежених фононів, штрихова – внесок екситонних інтерфейсних фононів

Бачимо, що для обох випадків (врахування обмежених та інтерфейсних фононів) поглинання світла відбувається при тих самих значеннях енергії екситона ($\Delta E = 10 \text{ meV}$). Деяке зміщення піків поглинання пов'язано із відмінністю між факторами Хуанга-Ріса для обох цих випадків (рисунок 4), що веде до різниці між енергіями перенормування екситонів взаємодією в різних гілках поляризаційних фононів.

При дослідженні коефіцієнтів поглинання міжзонних оптичних переходів важливим фактором є температура, при якій відбувається перехід. На рис. 6 зображено коефіцієнт поглинання світла при міжзонних переходах носія заряду у тій же моделі при кімнатній температурі ($T = 300 \text{ K}$). Порівнюючи залежності коефіцієнта поглинання від частоти світла при гелієвих температурах ($T = 4.2 \text{ K}$), відзначаємо «появу» додаткового фононного повтору зліва від безфононного максимуму. Фононні повтори справа від без фононного піка характеризуються більшими величинами

максимумів. Отриманий результат зумовлений збільшенням середнього числа фононів при зростанні температури.

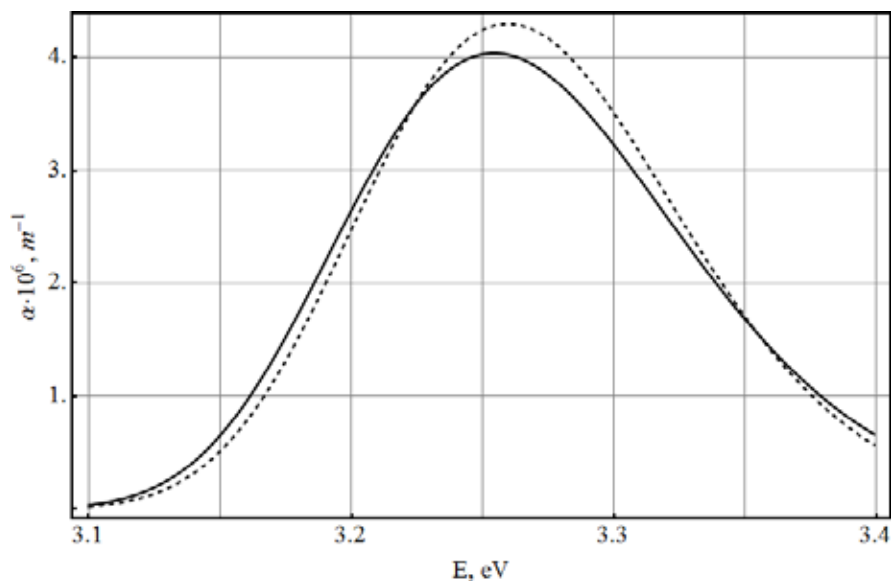


Рис. 7. Коефіцієнт поглинання світла за умови, що $T=4.2\text{K}$, $\sigma=5\%$: суцільна крива – внесок обмежених фононів, штрихова – внесок екситонних інтерфейсних фононів

Розглядаючи рисунок 7, на якому зображено спектри поглинання для сферичної КТ радіусом 1,5 нм із дисперсією $\sigma = 5\%$, бачимо, що через збільшення півширини безфононної смуги та фононних повторів, отримуємо одну смугу поглинання світла для двох найнижчих оптично активних рівнів зарядів.

ВИСНОВКИ

У даній роботі нами досліджено спектр міжзонного поглинання квантових точок CdS сферичної форми, що поміщені у матрицю SiO_2 , з урахуванням взаємодії електрон-діркової пари із поляризаційними фононами. Проаналізовано відмінність між взаємодією екситон-фононної системи із врахуванням обмежених та інтерфейсних фононів. Обчислено коефіцієнти поглинання, що зумовлені переходами носіїв заряду між найнижчими двома оптично активними рівнями у КТ під впливом лінійно-поляризованого світла.

Досліджувалися такі розміри квантових точок, коли енергетичні рівні електрона та дірки достатньо віддалені один від одного. Тому, зважаючи на можливу дисперсію КТ за розмірами у матриці, зазначені рівні можна виділити при аналізі частотної залежності коефіцієнта міжзонного поглинання. Обчислення показують, що як величини максимумів, так і енергія піків коефіцієнта міжзонного поглинання залежать від розкиду за розмірами КТ і від вибору фононної моделі.

Для даної гетероструктури, таким чином, ми довели схожість спектрів поглинання при врахування як обмежених фононів, так і інтерфейсних фононів із врахуваннями розкиду за розмірами квантових точок.

ЛІТЕРАТУРА

1. Rogach A.L., Franzl T., Klar T.A. and other. Aqueous Synthesis of Thiol-Capped CdTe Nanocrystals: State-of-the-Art. *J. Phys. Chem. C*. 2007. Vol. 111. P. 14628–14637. <https://doi.org/10.1021/jp072463y>.
2. Chin T.K.P., Stouwdam J. W., Bavel, S.S. et other. *Nanotechnology*. 2008. Vol. 19. P. 205602–205612. <https://doi.org/10.1088/0957-4484/19/20/205602>.
3. Hasselbarth A., Eychmuller E., and Well H. *Chem. Phys. Lett.* 1993. Vol. 203. P. 271–276. [https://doi.org/10.1016/0009-2614\(93\)85400-I](https://doi.org/10.1016/0009-2614(93)85400-I).
4. Zhong X., Feng Y., Knoll W., Han M. Alloyed $Zn_xCd_{1-x}S$ Nanocrystals with Highly Narrow Luminescence Spectral Width. *J. Am. Chem. Soc.* 2003. Vol. 125. P. 13559–13563. <https://doi.org/10.1021/ja036683a>.
5. Tkach M.V., Makhnats O.M., Prots I.V. Properties of Phonon, Electron and Hole Spectra in Some Cylindrical Nanoheterosystems. *Ukr. J. Phys.* 2001. Vol. 4646. P. 727–734.
6. Boichuk, V.I., Borusevych, V.A., Shevchuk, I.S. Electronic polaron of the AlN/GaN/AlN double nanoheterostructure of hexagonal symmetry crystals. *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials*. 2008. Vol. 10. P. 1357–1364.
7. Matos-Abiague A., Rodríguez-Suárez R.L. Spin-orbit coupling mediated spin torque in a single ferromagnetic layer. *Phys. Rev. B*. 2009. Vol. 80. P. 094424–094430. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.094424>.
8. Sun K.W., Huang C.L., Huang G.B., Lee H.C. Inter- and intra-subband relaxation of hot electrons in GaAs/AlGaAs quantum wells. *Solid St. Communication*. 2003. Vol. 126. P. 519–522. [https://doi.org/10.1016/S0038-1098\(03\)00235-7](https://doi.org/10.1016/S0038-1098(03)00235-7).
9. H'ohberger E. M., Kirschbaum J., Blick R.H., Kotthaus J.P., Wegscheider W. Electron–phonon interaction in freely suspended quantum dots. *Physica E*. 2003. Vol. 18. P. 99–100. [https://doi.org/10.1016/S1386-9477\(02\)01029-9](https://doi.org/10.1016/S1386-9477(02)01029-9).
10. Tkach N.V., Zharkoi V.P. Spectrum and electron-phonon interaction in a medium with a cylindrical quantum wire. *Semiconductors*. 1999. Vol. 33. P. 559–563.
11. Ипатова И.П., Маслов А.Ю., Прошина О. В. Полярное состояние в квантовой точке для частицы с вырожденным зонным спектром. *Физ. тех. полупров.* 1999. Т. 33. С. 832–838.
12. Fomin V.M., Gladilin V.N., Devreese J.T., Pokatilov E.P., Balaban S.N., Klimin S.N. Photoluminescence of spherical quantum dots *Phys. Rev. B*. 1998. Vol. 57. P. 2415–2421. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.57.2415>.
13. Фрисов Ю.А. Полярони. Москва : Наука, 1975. 367 с.
14. Bandaranyak R.J., Wen G.W., Lin J.Y., Jiang H.X., Sorensen C.M. Structural phase behavior in II–VI semiconductor nanoparticles. *Appl. Phys. Lett.* 1995. Vol. 67. P. 834–839. <https://doi.org/10.1063/1.115458>.
15. Angel O.Z., Alvarado-Gil J.J., Morales R.L. Band-gap shift in CdS semiconductor by photoacoustic spectroscopy: Evidence of a cubic to hexagonal lattice transition. *Appl. Phys. Lett.* 1994. Vol. 64. P. 291–298. <https://doi.org/10.1063/1.111184>.
16. Бир Г.В., Пикус Г.Е. Симметрия и деформационные дефекты в полупроводниках. Москва : Наука, 1972. 347 с.
17. Wang W., Germanenko I., El-Shall M.S. Room-Temperature Synthesis and Characterization of Nanocrystalline CdS, ZnS, and $CdxZn_{1-x}S$. *Chem. Mater*: 2002. Vol. 14. P. 3028–3033. <https://doi.org/10.1021/cm020040x>.

18. Корбутяк Д.В., Коваленко О.В., Будзуляк С.І. Світловипромінюючі властивості квантових точок напівпровідникових сполук A_2B_6 . *УФЖ*. 2012. Т.7. № 1. С. 48–95.
19. Корбутяк Д.В., Токарев С.В., Будзуляк С.І., Курик А.О., Кладько В.П., Полішук Ю.О., Шевчук О.М., Ільчук Г.А., Токарев В.С. Оптичні та структурно-дефектні характеристики нанокристалів CdS:Cu і CdS:Zn, синтезованих в полімерних матрицях. *Фіз. і хім. тверд. тіла*. 2013. Т. 14. № 1. С. 222–227.
20. Fediv V.I., Rudko G.Yu., Savchuk A.I. Synthesis of Mn^{2+} -doped CdS nanoparticles covered with different adsorptive layers and their application as biosensors. *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics*. 2014. Vol. 17(1). P. 46–51.
21. Fediv V.I., Rudko G.Yu., Savchuk A.I. Synthesis of colloidal nanoparticles CdS:Mn in the polymer solution for biological applications. *Functional materials*. 2014. Vol. 21(2). P. 220–225.
22. Li Y., Huang F., Zhang Q., Gu Z. Solvothermal synthesis of nanocrystalline cadmium sulfide. *Journal of Materials Science*. 2000. Vol. 35. P. 5933–937.
23. Sivasubramanian V., Arora A.K., Premila M. Optical properties of CdS nanoparticles. *Physica E: Low-dim. Systems and Nanostructures*. 2006. Vol. 31. P. 93–98. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2005.10.001>
24. Risbul S.H., Alivisatos A.P. Resonance Raman studies of the ground and lowest electronic excited state in CdS nanocrystals. *J. Chem. Phys.* 1993. Vol. 98. P. 8432–8437. <https://doi.org/10.1063/1.464501>.
25. Schmitt-Rink S., Miller D.A.B., Chemla D.S. Theory of the linear and nonlinear optical properties of semiconductor microcrystallites. *Phys. Rev. B*. 1987. Vol. 35. P. 8113–8120. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.35.8113>.
26. Scamarcio G., Spagnolo V., Venturi G., Lugará M., Righini G.C. Size dependence of electron-LO-phonon coupling in semiconductor nanocrystals. *Phys. Rev. B*. 1995. Vol. 53., No 15-16. P. R10489-R10492. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.53.R10489>.
27. Hayashi S., Sando H., Agata M., Yamamoto Y. Resonant Raman scattering from ZnTe microcrystals: Evidence for quantum size effects. *Phys. Rev. B*. 1989. Vol. 40. P. 5544–5549. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.40.5544>.
28. Абакумов В.Н., Перель В.И., Ясиевич И.Н. Безызлучательная рекомбинация в полупроводниках. Санкт-Петербург: Издательство «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константиновна РАН», 1997. 256 с.
29. Baldereschi A., Lipari N.O. Spherical model of shallow acceptor states in semiconductors. *Phys. Rev. B*. 1973. Vol. 8. P. 2697-2709.
30. Moskalenko A.S., Berakdar J., and other. Single-particle states in spherical Si/SiO₂ quantum dots. *Phys. Rev. B*. 2007. Vol. 76(8). P. 085427-085427.
31. Sirenko Yu.M., Jeon J.-B., Kim K.W., Littlejohn M. A., Stroscio M.A. Envelope-function formalism for valence bands in wurtzite quantum wells. *Phys. Rev. B*. 1997. Vol. 53. P. 3456-3461.
32. Xia J. -B., Li J. Electronic structure of quantum spheres with wurtzite structure. *Phys. Rev. B*. 1999. Vol. 60. P. 11540-1999.
33. Lawaetz P. Valence-Band Parameters in Cubic Semiconductors. *Phys. Rev. B*. 1971. Vol. 4. P. 3460-3471.
34. Давыдов А.С. Теория твердого тела. Москва : Наука. 1976. 431 с.
35. Ткач М, Сеті Ю., Войцехівська О. Квазічастинки у наногетеросистемах. Квантові точки та дроти. Чернівці : Книги-XXI. 2015. 386 с.
36. Huang K., Rhys A. Theory of Light Absorption and Non-Radiative Transitions in F-Centers. *Proc. R. Soc. Lond.* 1951. Vol. 204. P. 406–429.

REFERENCES

1. Rogach A.L., Franzl T., Klar T.A. and other. (2007). Aqueous Synthesis of Thiol-Capped CdTe Nanocrystals: State-of-the-Art. *J. Phys. Chem. C*. Vol. 111. P. 14628-14637. <https://doi.org/10.1021/jp072463y> [in English].
2. Chin T.K.P., Stouwdam J. W., Bavel, S.S. et other (2008). *Nanotechnology*. Vol. 19. P. 205602-205612. <https://doi.org/10.1088/0957-4484/19/20/205602> [in English].
3. Hasselbarth A., Eychmuller E., and Well H. (1993). *Chem. Phys. Lett.* Vol. 203. P. 271-276. [https://doi.org/10.1016/0009-2614\(93\)85400-I](https://doi.org/10.1016/0009-2614(93)85400-I) [in English].
4. Zhong X., Feng Y., Knoll W., Han M. (2003). Alloyed $Zn_xCd_{1-x}S$ Nanocrystals with Highly Narrow Luminescence Spectral Width. *J. Am. Chem. Soc.* Vol. 125. P. 13559-13563. <https://doi.org/10.1021/ja036683a> [in English].
5. Tkach M.V., Makhnats O.M., Prots I.V. (2001). Properties of Phonon, Electron and Hole Spectra in Some Cylindrical Nanoheterosystems. *Ukr. J. Phys.* 2001. Vol. 4646. P. 727-734 [in English].
6. Boichuk, V.I., Borusevych, V.A., Shevchuk, I.S. (2008). Electronic polaron of the AlN/GaN/AlN double nanoheterostructure of hexagonal symmetry crystals. *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials*. Vol. 10. P. 1357-1364 [in English].
7. Matos-Abiague A., Rodríguez-Suárez R.L. (2009). Spin-orbit coupling mediated spin torque in a single ferromagnetic layer. *Phys. Rev.* Vol. 80. P. 094424-094430. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.094424> [in English].
8. Sun K.W., Huang C.L., Huang G.B., Lee H.C. (2003). Inter- and intra-subband relaxation of hot electrons in GaAs/AlGaAs quantum wells. *Solid St. Communication*. Vol. 126. P. 519-522. [https://doi.org/10.1016/S0038-1098\(03\)00235-7](https://doi.org/10.1016/S0038-1098(03)00235-7) [in English].
9. H'ohberger E. M., Kirschbaum J., Blick R.H., Kotthaus J.P., Wegscheider W. (2003). Electron-phonon interaction in freely suspended quantum dots. *Physica E*. Vol. 18. P. 99-100. [https://doi.org/10.1016/S1386-9477\(02\)01029-9](https://doi.org/10.1016/S1386-9477(02)01029-9) [in English].
10. Tkach N.V, Zharkoi V.P. (1999). Spectrum and electron-phonon interaction in a medium with a cylindrical quantum wire. *Semiconductors*. Vol. 33. P. 559-563 [in English].
11. Ipatova I. P., Maslov A. Yu., and Proshina O. V. (1999). Polaronnoe sostoyanie v kvantovoy tochke dlya chastitsyi s vyirozhdennyim zonnym spektrom [Polaron state in a quantum dot for a particle with a degenerate band spectrum]. *Fiz. teh. poluprov – Phys. those semiconductor*, 33, 832-838 [in Russian].
12. Fomin V.M., Gladilin V.N., Devreese J.T., Pokatilov E.P., Balaban S.N., Klimin S.N. (1998). Photoluminescence of spherical quantum dots *Phys. Rev. B*. Vol. 57. P. 2415-2421. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.57.2415> [in English].
13. Frisov Yu.A. (1975). *Polyaroni [Polaroni]*. Moscow: Nauka. 367 [in Russian].
14. Bandaranyak R.J., Wen G.W., Lin J.Y., Jiang H.X., Sorensen C.M. (1995). Structural phase behavior in II–VI semiconductor nanoparticles. *Appl. Phys. Lett.* Vol. 67. P. 834-839. <https://doi.org/10.1063/1.115458> [in English].
15. Angel O.Z., Alvarado-Gil J.J., Morales R.L. (1994). Band-gap shift in CdS semiconductor by photoacoustic spectroscopy: Evidence of a cubic to hexagonal lattice transition. *Appl. Phys. Lett.* Vol. 64. P. 291-298. <https://doi.org/10.1063/1.111184> [in English].
16. Bir G.V., Pikus G.E. (1972). *Simmetriya i deformatsionnyie defektyi v poluprovodnikah [Symmetry and deformation defects in semiconductors]*. Moscow: Nauka, 1972. 347 [in Russian].
17. Wang W., Germanenko I., El-Shall M.S. (2002). Room-Temperature Synthesis and Characterization of Nanocrystalline CdS, ZnS, and $CdxZn_{1-x}S$. *Chem. Mater.* Vol. 14. P. 3028–3033. <https://doi.org/10.1021/cm020040x> [in English].
18. Korbutyak D.V., Kovalenko O.V., Budzulyak S.I. (2012). Svitlovyprominiuiuchi vlastyvoli kvantovykh tochk napivprovodnykh spoluk A2B6 [Light-emitting properties of

- quantum dots of semiconductor compounds A₂B₆]. *Ultraviolet radiation, Vol. 7, No. 1*, 48-95 [in Ukrainian].
19. Korbutyak D.V., Tokarev S.V., Budzulyak S.I., Kuryk A.O., Kladko V.P., Polishchuk Yu.O., Shevchuk O.M., Ilchuk G.A., Tokarev V. (2013). Optychni ta strukturno-defektni kharakterystyky nanokrystaliv CdS:Cu i CdS:Zn, syntezyovanykh v polimernykh matrytsiakh [Optical and structural defect characteristics of CdS:Cu and CdS:Zn nanocrystals synthesized in polymer matrices]. *Phys. and chem. firm bodies*, Vol. 14, No. 1, 222-227 [in Ukrainian].
 20. Fediv V.I., Rudko G.Yu., Savchuk A.I. (2014). Synthesis of Mn²⁺-doped CdS nanoparticles covered with different adsorptive layers and their application as biosensors. *Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics*. Vol. 17(1). P. 46-51 [in English].
 21. Fediv V.I., Rudko G.Yu., Savchuk A.I. (2014). Synthesis of colloidal nanoparticles CdS:Mn in the polymer solution for biological applications. *Functional materials*. Vol. 21(2). P. 220-225 [in English].
 22. Li Y., Huang F., Zhang Q., Gu Z. (2000). Solvothermal synthesis of nanocrystalline cadmium sulfide. *Journal of Materials Science*. Vol. 35. P. 5933-937 [in English].
 23. Sivasubramanian V., Arora A.K., Premila M. (2006). Optical properties of CdS nanoparticles. *Physica E: Low-dim. Systems and Nanostructures*. Vol. 31. P. 93-98. <https://doi.org/10.1016/j.physe.2005.10.001> [in English].
 24. Risbul S.H., Alivisatos A.P. (1993). Resonance Raman studies of the ground and lowest electronic excited state in CdS nanocrystals. *J. Chem. Phys.* Vol. 98. P. 8432-8437. <https://doi.org/10.1063/1.464501> [in English].
 25. Schmitt-Rink S., Miller D.A.B., Chemla D.S. (1987). Theory of the linear and nonlinear optical properties of semiconductor microcrystallites. *Phys. Rev. B*. Vol. 35. P. 8113-8120. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.35.8113> [in English].
 26. Scamarcio G., Spagnolo V., Venturi G., Lugará M., Righini G.C. (1995). Size dependence of electron-LO-phonon coupling in semiconductor nanocrystals. *Phys. Rev. B*. Vol. 53., No 15-16. P. R10489-R10492. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.53.R10489> [in English].
 27. Hayashi S., Sando H., Agata M., Yamamoto Y. (1989). Resonant Raman scattering from ZnTe microcrystals: Evidence for quantum size effects. *Phys. Rev. B*. Vol. 40. P. 5544-5549. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.40.5544> [in English].
 28. Abakumov V.N., Perel V.I., Yassievich I.N. (1997). Bezyizluchatel'naya rekombinatsiya v poluprovodnikah [Radiative recombination in semiconductors]. St. Petersburg: Publishing house "Petersburg Institute of Nuclear Physics. B.P. Konstantinovna RAN". 256 [in Russian].
 29. Baldereschi A., Lipari N.O. (1973). Spherical model of shallow acceptor states in semiconductors. *Phys. Rev. B*. Vol. 8. P. 2697-2709 [in English].
 30. Moskalenko A.S., Berakdar J., and other. (2007). Single-particle states in spherical Si/SiO₂ quantum dots. *Phys. Rev. B*. Vol. 76(8). P. 085427-085427 [in English].
 31. Sirenko Yu.M., Jeon J.-B., Kim K.W., Littlejohn M. A., Strocio M.A. (1997). Envelope-function formalism for valence bands in wurtzite quantum wells. *Phys. Rev. B*. Vol. 53. P. 3456-3461 [in English].
 32. Xia J. -B., Li J. (1999). Electronic structure of quantum spheres with wurtzite structure. *Phys. Rev. B*. Vol. 60. P. 11540-1999 [in English].
 33. Lawaetz P. (1971). Valence-Band Parameters in Cubic Semiconductors. *Phys. Rev. B*. Vol. 4. P. 3460-3471 [in English].
 34. Davydov A.S. (1976). Teoriya tverdogo tela [Theory of a rigid body]. Moscow: Nauka. 1976. 431 [in Russian].
 35. Tkach M, Seti Y., Voitsekhivska O. (2015). Kvazichastyvky u nanoheterosystemakh. Kvantovi tochky ta droty [Quasiparticles in nanoheterosystems]. Quantum dots and wires, Chernivtsi: Books-XXI, 386 [in Ukrainian].
 36. Huang K., Rhys A. (1951). Theory of Light Absorption and Non-Radiative Transitions in F-Centers. *Proc. R. Soc. Lond.* Vol. 204. P. 406-429 [in English].

ABSTRACT

THE EFFECT OF CONFINED AND INTERFACE PHONONS ON INTERBAND LIGHT ABSORPTION IN CdS QUANTUM DOTS

The effect of confined and interface phonons on the exciton absorption coefficient of polarized light as a function of its frequency for spherical CdS quantum dots placed in an SiO₂ dielectric matrix was studied. The complex structure of the valence band, namely its degeneracy at point Γ , is taken into account in the multi-band effective mass model. Calculations were performed for different temperatures (from helium to room temperature) and radii of the spherical quantum dot of the CdS/SiO₂ heterostructure. Such sizes of quantum dots were studied when the energy levels of the electron and the hole were sufficiently far from each other. The electron-phonon interaction parameter (Huang-Rhys factor) was determined for different radii of quantum dots. Absorption coefficients due to transitions of charge carriers between the lowest two optically active levels in a quantum dot under the influence of linearly polarized light were calculated. The size dispersion of quantum dots is taken into account using the Gaussian distribution. The maximum variance in size was 5%. Phonon repetitions were obtained in the absorption spectra. A comparison of the obtained results with the corresponding ones taking into account individual branches of polarization phonons was made.

Key words: Huang-Rhys factor, optical transitions, phonons, absorption coefficient.