ISSN 1729-4428

В.І. Бойчук, І.В. Білинський, І.О. Шаклеіна

Екситонний стан та зсув Стокса у квантовій точці кубічної форми

Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка, кафедра теоретичної фізики, вул. Івана Франка, 24, Дрогобич, 82100, Україна e-mail: <u>ioshak@mail.ru</u>

В роботі подано теорію екситонних станів у КТ кубічної форми з врахуванням того, що внаслідок неоднорідності системи та існування зв'язаних поверхневих зарядів, взаємодія між електроном та діркою відрізняється від кулонівської взаємодії двох точкових зарядів. Визначено залежність енергії зв'язку екситона, сили осцилятора переходу в екситонний стан та обмінної енергії екситона як функцію розмірів квантової точки і діелектричної проникності матриці. На основі проведеного дослідження пояснено деякі особливості екситонних спектрів КТ кристалу *CdTe*.

Ключові слова: квантова точка, екситон, енергія зв'язку екситона, обмінна взаємодія, зсув Стокса.

Стаття поступила до редакції 16.01.2008; прийнята до друку 15.06.2008.

Вступ

Квантові точки та квантові дроти, як низькорозмірні системи, характеризуються унікальними оптичними та електричними властивостями. Дослідження таких систем розширює наші знання про фізичні і хімічні властивості низькорозмірних систем [1-3].

Для широкого кола прикладних цілей значну роль відіграють нанокристали *CdTe*. Квантові точки (КТ) таких нанокристалів можна отримати за допомогою хімічного синтезу у різного типу колоїдних розчинах та полімерних матрицях [4-6].

В роботах [7-26] досліджено спектри випромінювання та люмінесценції гетероструктур на основі CdTe, CdSe, Si і т.д. Багаточастинкові ефекти та оптичні переходи для КТ вивчались в [8,26]. стани Електронні та діркові i g-фактори вимірювались в одиноких КТ і квантових ямах авторами робіт [9,10]. Теоретично електронна структура і g-фактори КТ досліджувались в [11,12,14,17,19].

Важливою проблемою з точки зору теорії залишається коректність пояснення зсуву Стокса у спектрах екситонного поглинання і випромінювання КТ [5,11,12,21]. Є два підходи до опису цього явища. Деякі автори величину зсуву Стокса у КТ кристалу пояснюють на основі наявності поверхневих станів [21]. Однак, в інших роботах пояснення цього явища дається, виходячи з складного зонного діркового спектру [12,19]. При цьому розглядається найпростіша модель КТ у вигляді нескінченно глибокої потенціальної ями для зарядів (електрона і дірки).

Метою даної роботи є побудова теорії екситонних станів у КТ кубічної форми з врахуванням того, що внаслідок неоднорідності системи та існування зв'язаних поверхневих зарядів, взаємодія між електроном та діркою відрізняється від кулонівської взаємодії двох точкових зарядів. На основі проведеного дослідження зроблено спробу пояснення деяких особливостей екситонних спектрів КТ кристалу *CdTe*, отриманих в роботі [5].

I. Постановка задачі

Розглядається КТ кубічної форми. Систему координат вибрано таким чином, щоб її початок знаходився в центрі куба, а осі були перпендикулярними до його граней

$$\left(-\frac{b}{2} \le x, y, z \le \frac{b}{2}\right).$$

Вважається, що для електрона та дірки кристалу справедливе наближення ефективної маси і квадратичний закон дисперсії.

Гамільтоніан електрон-діркової системи можна подати у вигляді:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{\nabla_e} \frac{1}{m_e} \frac{1}{\nabla_e} - \frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{\nabla_h} \frac{1}{m_h} \frac{1}{\nabla_h} + V(\vec{r}_e) + V(\vec{r}_h) + W(\vec{r}_e, \vec{r}_h),$$
(1)

де $V(\vec{r}_i)$, $W(\vec{r}_e, \vec{r}_h)$ – потенціальна енергія взаємодії *i*тої частинки з межами поділу середовищ та між собою відповідно, m_e, m_h – ефективні маси електрона та дірки.

Зважаючи на те, що в роботі досліджується енергія зв'язку екситона та енергія обмінної взаємодії між електроном та діркою, $V(\vec{r}_e)$ та $V(\vec{r}_h)$ можна вибрати у вигляді прямокутних потенціалів з нескінченими стінками.

Важливу роль В даній задачі відіграє потенціал $W(\vec{r}_e, \vec{r}_b)$. Для КТ великих об'ємів можна вважати його кулонівським (W₀), а при невеликих об'ємах необхідно враховувати неоднорідність гетеросистеми, бо при малих розмірах КT зменшується відстань між зарядами, і значну роль починає відігравати поле, створене цими зарядами в матриці. Якщо діелектрична проникність зовнішнього середовища набагато менша, ніж в КТ, то міжчастинкова взаємодія виявляється значно більшою, ніж в однорідному кристалі.

Якщо знехтувати особливостями потенціалу біля ребер куба та врахувати симетрію задачі, то з розв'язку рівняння Пуасона можна одержати:

$$W(\vec{r}_{e},\vec{r}_{h}) \equiv W_{0} + W_{1} = -\frac{e^{2}}{\varepsilon |\vec{r}_{e} - \vec{r}_{h}|} - \frac{3e^{2}}{\varepsilon} \int_{0}^{\infty} dk J_{0}(k\rho) \times \left[\frac{ch[k(z_{e} + z_{h})]}{sh(bk + 2\eta)} + \frac{2ch(k|z_{e} + z_{h}|]}{e^{2bk + 4\eta} - 1} \right],$$

$$M_{e} = \frac{|\vec{r}_{e} - \vec{r}_{h}| = \sqrt{(x_{e} - x_{h})^{2} + (y_{e} - y_{h})^{2} + (z_{e} - z_{h})^{2}}}{= \sqrt{\rho^{2} + (z_{e} - z_{h})^{2}},$$

$$(2)$$

 $\eta = \ln \frac{\varepsilon + \varepsilon_1}{\varepsilon - \varepsilon_1}, \quad \varepsilon, \quad \varepsilon_1 -$ діелектричні проникності КТ

та матриці. Потенціал W_1 виникає внаслідок наявності зв'язаних поверхневих зарядів, тому $W_1 \approx 0$, якщо $\varepsilon \approx \varepsilon_1$.

Для знаходження зв'язаного стану електрона і дірки (екситона) необхідно знайти розв'язок рівняння Шредінгера:

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}_e,\vec{r}_h) = E\Psi(\vec{r}_e,\vec{r}_h).$$
(3)

Задачу розв'язано варіаційним методом Рітца. Пробну хвильову функцію вибрано у вигляді:

$$\Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h) = A \quad \cos(\frac{\pi}{6}x_e) \quad \cos(\frac{\pi}{6}x_h) \quad *$$

$$* \quad \cos(\frac{\pi}{6}y_e) \quad \cos(\frac{\pi}{6}y_h) \quad \cos(\frac{\pi}{6}z_e) \quad *, \qquad (4)$$

$$* \quad \cos(\frac{\pi}{6}z_h) \quad \exp\{-\alpha \left| \vec{r}_e - \vec{r}_h \right| \}$$

де α – варіаційний параметр. Косинуси у функції $\Psi(\vec{r_e}, \vec{r_h})$ враховують розмірне квантування руху частинок у трьох напрямках, а останній співмножник описує міжчастинкову взаємодію. Для знаходження енергії екситона необхідно мінімізувати функціонал:

$$E(\alpha) = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}.$$
 (5)

Незважаючи на значні можливості комп'ютернорго числення, конкретні розрахунки функціонала $E(\alpha)$ є непростими. З цією метою варто ввести безрозмірні змінні і характерні розміри та енергії системи:

$$\tilde{\alpha} = \alpha \frac{b}{\pi}, \quad \tilde{b} = \frac{b}{a_0}, \quad a_0 = \frac{\varepsilon \hbar^2}{\mu e^2},$$
$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_e} + \frac{1}{m_h}, \quad R_0 = \frac{e^2}{2\varepsilon a_0}$$

Також, для кожного α необхідно знайти величину шести- і семикратних інтегралів з підінтегральною функцією, до складу якої входять функції Бесселя. Однак, врахування симетрії системи дозволило виразити $E = E(\alpha)$ через три-, чотири- та п'ятикратні інтеграли.

Після спрощення функціонал $E = E(\alpha)$ має вигляд:

$$E(\tilde{\alpha}) = \frac{3\hbar^2 \pi^2}{2\mu} - (\frac{\pi}{\tilde{b}}\tilde{\alpha})^2 - B_0^{-1}(\tilde{\alpha})^* * \left[\frac{\pi^2}{\tilde{b}^2}K(\alpha) + 2\frac{\pi}{\tilde{b}}B_{-1}(\alpha) + 6\frac{\pi}{\tilde{b}}\Pi(\alpha)\right],$$
(6)

Перші три доданки у формулі (6) задають кінетичну енергію частинок, яка визначається величинами:

$$\begin{split} B_{*}(\tilde{\alpha}) &= \frac{1}{512} \int_{0}^{\pi} d\xi_{1} \int_{0}^{\pi} d\xi_{2} * \\ & * \int_{0}^{\pi} d\xi_{2} f(\xi_{1}) f(\xi_{1}) f(\xi_{1}) t^{*} e^{-2\pi t}, \\ n &= 0, -1 \\ f(\xi_{1}) &= 2(\pi - \xi_{1})(2 + \cos 2\xi_{1}) + 3\sin 2\xi_{1}, \\ i &= 1, 2, 3 \quad t = \sqrt{\xi_{1}^{2} + \xi_{2}^{2} + \xi_{3}^{2}} ; \\ K(\alpha) &= \tilde{\alpha} B_{0}(\tilde{\alpha}) \quad \frac{\exp(-2\tilde{\alpha}\sqrt{\xi_{1}^{2} + \xi_{2}^{2} + \xi_{3}^{2}} * \\ 256(\xi_{1}^{2} + \xi_{2}^{2} + \xi_{3}^{2})^{3/2} * , \\ *(L_{1}(\tilde{\alpha}) + L_{2}(\tilde{\alpha}) + L_{3}(\tilde{\alpha})) \\ L_{1}(\tilde{\alpha}) &= -f(\xi_{1}) f(\xi_{2}) * \\ \text{Je} \quad \left\{ \begin{bmatrix} 2\xi_{1}^{3} + \pi\xi_{2}^{2} + \xi_{2}\xi_{2}^{2} + (\pi + \xi_{1})\xi_{2}^{2} \end{bmatrix} * \\ \cos(2\xi_{1}) + 3(\xi_{2}^{2} + \xi_{3}^{2}) \\ \times \cos(\xi_{1})\sin(2\xi_{1}) - 2 \begin{bmatrix} \xi_{1}^{3} - \pi(\xi_{2}^{2} + \xi_{3}^{2}) + 2\xi_{1}(\xi_{2}^{2} + \xi_{3}^{2}) + \\ +(\pi - \xi_{1})\xi_{1}(\xi_{1}^{2} + \xi_{2}^{2} + \xi_{3}^{2}) + 2\xi_{2}(2\xi_{1}^{2} + \xi_{2}^{2} + \xi_{3}^{2}) \\ +(\pi - \xi_{1})\xi_{1}(\xi_{1}^{2} + \xi_{2}^{2} + \xi_{3}^{2})\sin(2\xi_{1}) \end{bmatrix} \right\} \\ L_{2}(\tilde{\alpha}) &= f(\xi_{1})f(\xi_{3}) * \\ * \left\{ -2\pi(\xi_{1}^{2} + \xi_{3}^{2}) + 2\xi_{2}(2\xi_{1}^{2} + \xi_{2}^{2} + \xi_{3}^{2}) - \\ -\left[\pi\xi_{1}^{2} + \xi_{1}^{2}\xi_{2} + 2\xi_{2}^{2} + (\pi + \xi_{2})\xi_{3}^{2}) \right] \times \\ -3(\xi_{1}^{2} + \xi_{2}^{2}) * \\ \times \cos(2\xi_{2}) * \cos(\xi_{2})\sin(\xi_{2}) + 2(\pi - \xi_{2}) * \\ * \xi_{2}(\xi_{1}^{2} + \xi_{2}^{2} + \xi_{3}^{2})\sin(2\xi_{2}) \end{bmatrix} \right\}, \end{split}$$

$$L_{3}(\tilde{\alpha}) = -f(\xi_{1})f(\xi_{2}) * \\ * \begin{cases} -\left[\pi(\xi_{1}^{2} + \xi_{2}^{2}) + \xi_{3}(\xi_{1}^{2} + \xi_{2}^{2} + 2\xi_{3}^{2})\right] * \\ +\cos(2\xi_{3}) - 3/2(\xi_{1}^{2} + \xi_{2}^{2})\sin(2\xi_{3}) + \\ +2\left[-\pi(\xi_{1}^{2} + \xi_{2}^{2}) + 2\xi_{3}(\xi_{1}^{2} + \xi_{2}^{2}) + \\ +(\pi - \xi_{3})\xi_{3}(\xi_{1}^{2} + \xi_{2}^{2} + \xi_{3}^{2})\sin(2\xi_{3}) \right] \end{cases}.$$

Кулонівська енергія між електроном і діркою визначається четвертим доданком формули (6). П'ятий доданок формули (6), в який входить $\Pi(\alpha)$, задає енергію, пов'язану з поляризаційними ефектами:

$$\Pi(\alpha) = \Pi_{1}(\alpha) + \Pi_{2}(\alpha),$$

$$\Pi_{1}(\tilde{\alpha}) = \frac{1}{512} \int_{0}^{\pi} d\xi_{1} \int_{0}^{\pi} d\xi_{2} \int_{0}^{\pi} d\xi_{3} \int_{0}^{\pi} d\tilde{k} f(\xi_{1}) f(\xi_{2}) f(\xi_{3})^{*}$$

$$*J_{0}(\tilde{k}\sqrt{\xi_{1}^{2} + \xi_{2}^{2}}) e^{-2\alpha t} \left[\frac{2ch(\tilde{k}|\xi_{2}|)}{\exp\left[2(2\eta + \pi - \tilde{k})\right] - 1} sh^{-1}(2\eta + \pi - \tilde{k}) \right],$$

$$\Pi_{2}(\tilde{\alpha}) = \frac{1}{64} \int_{0}^{\pi} d\xi_{1} \int_{0}^{\pi} d\xi_{2} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\tilde{z}_{e} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\tilde{z}_{h} \int_{0}^{\infty} d\tilde{k} f(\xi_{1}) f(\xi_{2})^{*}$$

$$*J_{0}(\tilde{k}\sqrt{\xi_{1}^{2} + \xi_{2}^{2}}) \left[\frac{ch\left[\tilde{k}(\tilde{z}_{e} + \tilde{z}_{h})\right]}{sh(2\eta + \pi - \tilde{k})} \right].$$

Тут введено наступні позначення: $\tilde{z}_{e} = \frac{\pi}{b} \frac{z_{e}}{b}, \quad \tilde{z}_{h} = \frac{\pi}{b} \frac{z_{h}}{b}, \quad \tilde{k} = \frac{k}{\pi} \frac{b}{\pi}, \quad \xi_{1e} = \frac{\pi}{b} x_{e}, \quad \xi_{2e} = \frac{\pi}{b}$ $\xi_{3e} = \frac{\pi}{b} z_{e}, \quad \xi_{i} = \xi_{ie} - \xi_{ih}, \quad i = 1, 2, 3.$

З наведених формул видно, що енергія екситона залежить не лише від параметрів кристалу квантової точки, а й від її розмірів та діелектричної проникності матриці.

II. Аналіз числових розрахунків

Конкретні обчислення проведено для КТ кристалу *CdTe* ($m_e = 0,11$ m_0 , $m_h = 0,35$ m_0 , $\varepsilon = 10,9$, $m_0 -$ маса вільного електрона).



Рис. 1. Залежність параметра β від b для $\varepsilon_1 = 1$ (крива 1) та $\varepsilon_1 \approx \varepsilon$ (крива 2).

На рис. 1 подано залежність параметра $\beta = (\alpha_m a_0)^{-1}$, де α_m – значення варіаційного параметра, для якого функція $E = E(\alpha)$ має мінімальне значення. Видно, що для всієї області зміни розмірів КТ збільшення b супроводжується зменшенням β . При великих b

 $(b > 10^3 A)$ варіаційний параметр β стає близьким до одиниці. Така поведінка функції пояснюється тим, що β задає найбільш імовірну відстань між електроном та діркою (в радіусах Бора екситона). Варіаційний параметр β також залежить від діелектричної проникності зовнішнього середовища – зменшення діелектричної проникності матриці веде до зменшення середньої відстані між зарядами. Знаючи функцію $\alpha_m = \alpha_m(b, \varepsilon_1)$, можна визначити енергію екситонного стану. Найзручніше вести відлік енергії від рівнів розмірного квантування електрона і дірки.

На рис. 2 подано залежність $E_c = E - \frac{3\hbar^2 \pi^2}{2 \mu b^2}$ від довжини ребра куба *b*. За аналогією до масивного кристалу, величину $|E_c|$ можна назвати енергією зв'язку екситона. Зменшення *b* веде до монотонного зменшення енергії E_c . Коли b = 20 Å, енергія зв'язку \mathcal{G}_{ec}^{k} ситона стає на порядок більшою, ніж у масивному кристалі *CdTe*. Збільшення діелектричної



Рис. 2. Енергія екситона для різної довжини ребра куба *b* та діелектричних проникностей матриці: крива $1 - \varepsilon_1 = 1$, крива $2 - \varepsilon_1 = 4$, крива $3 - \varepsilon_1 = 7$, крива $4 - \varepsilon_1 \approx \varepsilon$.

проникності матриці супроводжується зменшенням енергії $|E_c|$. Якщо не враховувати потенціал W_1 , то, як видно з рис. 2, якісно залежність $E = E_c(b)$ є такою ж. Однак кількісно одержуємо значно занижені результати. Зокрема, якщо b = 20 $\overset{\circ}{A}$, то $|E_c|$ лише в два рази більше за відповідне значення масивного кристалу. Цей результат якісно узгоджується з тим, що одержано для наноплівок [27,28].

Важливою характеристикою екситонних станів є сила осцилятора переходу в екситонний стан. Для квантової точки сила осцилятора *f* визначається наступним виразом [11]:

$$\frac{f}{f_{ex,is}} = \frac{\pi a_0^3}{V} \left| \int \Psi(\vec{r},\vec{r}) dr \right|^2 \frac{E_{ex}}{E_b},$$

де $f_{ex, is}$, E_{ex} – сила осцилятора та енергія утворення екситонного стану масивного кристалу об'єму V, E_b – енергія утворення екситона у КТ, $\Psi(\vec{r}, \vec{r}) \equiv \Psi(\vec{r}_e, \vec{r}_h)|_{\vec{r}_e = \vec{r}} -$ хвильова функція екситона

за умови, що електрон і дірка знаходяться в одній точці простору.

На рис. 3 подано залежність відношення сил осциляторів КТ та масивного кристалу *CdTe*. Зменшення розміру КТ супроводжується монотонним зростанням *f*. Якщо ж діелектричні властивості матриці і КТ близькі ($W_1 \approx 0$), то, наприклад, для b = 55 Å відношення $f/f_{ex, is} = 10$. Врахування поверхневих зарядів на межі поділу зменшує середню відстань між частинками і

збільшує силу осцилятора екситона. Для $\varepsilon_1 = 1$ і

b = 55 $\overset{\circ}{A}$ одержано, що $\frac{f}{f_{ex, is}} = 13$.

Одним з можливих пояснень зсуву Стокса у екситонному поглинанні та фотолюмінісценції є існування «темних» і «яскравих» екситонних станів. Різниця енергії цих станів дорівнює енергії обмінної взаємодії між електроном і діркою. Якщо врахувати лише короткодіючі сили, то обмінна енергія екситона



Рис. 3. Сила осцилятора переходу в екситонний стан для різних ε_1 і *b*: крива $1 - \varepsilon_1 = 1$, крива $2 - \varepsilon_1 \approx \varepsilon$.

у КТ визначається формулою [11,29]:

$$E_{c,exch} = E_{exch} \quad \pi \quad a_0^3 \quad K$$

де $K_0 = \int d\vec{r} |\Psi(\vec{r}, \vec{r})|^2$, E_{exch} – обмінна енергія *Is*екситона масивного кристалу. На рис. 4 подано залежність відношення обмінної енергії КТ і масивного кристалу від *b* для різних значень



Рис. 4. Залежність відношення обмінної енергії екситона від *b* для різних значень діелектричних проникностей матриці: крива $1 - \varepsilon_1 = 1$, крива $2 - \varepsilon_1 \approx \varepsilon$.

обмінна енергія досить різко змінюється при зменшенні розмірів КТ, особливо в області малих значень b. Порівняння результатів теорії та експерименту показує, що якісно теорія узгоджується з даними вимірювань. Якщо вважати, що для масивного кристалу зсув Стокса дорівнює 0.15 meV[5,11], то в області малих розмірів КТ одержуємо наступні результати:

$$\begin{split} E_{c,exch} &= 21 \quad meV(b = 30 \, A) \,, \\ E_{c,exch} &= 45 \quad meV(b = 25 \stackrel{\circ}{A}), \\ E_{c,exch} &= 75 \quad meV(b = 20 \stackrel{\circ}{A}) \,. \end{split}$$

Отримані значення E_{c.exch} у декілька разів менші за експериментально одержаний зсув Стокса [5]. Крім того, проведені обчислення показали, що в рамках запропонованої моделі $E_{c.exch}$ слабо залежить від діелектричних властивостей матриці. Вважаємо, що як величина $E_{c exch}$, так і залежність її від \mathcal{E}_1 пов'язані з тим, що в рамках вибраної моделі ймовірність перебування зарядів біля межі поділу є малою, що зменшує вплив матриці на обмінну енергію взаємодії. Для кращої збіжності теорії та експерименту врахувати скінченність необхілно розриву енергетичних зон електрона та дірки. Цим питанням буде присвячена наступна робота.

Автори висловлюють щиру подяку завідуючому відділом Інституту фізики напівпровідників НАН України, професору Корбутяку Д.В. за конструктивні пропозиції під час обговорень результатів цієї роботи.

 D.R. Mendes Junior, F. Qu, A.M. Alcalde, N.O. Dantas. Photoluminescence and optical absorption in CdSe nanocrystals // Microelectronics Journal, 4, pp. 787-801 (2003).

діелектричних проникностей матриці. Видно, що

- [2] Davide Cozzoli, L. Manna, M.L. Curri, S. Kudera, C. Giannini, M. Striccodi, and A. Agostiano. Shape and Phase Control of Colloidal *ZnSe* Nanocrystals // *Chem. Matetr.*, 17, pp. 1296-1306 (2005).
- [3] G.W. Bryant, W. Jaskolski. Surface Effects on Capped and Uncapped Nanocrystals // J. Phys. Chem.B., 109, pp. 19650-19656 (2005).
- [4] F. Sander Wuister, I. Swart, F. van Driel, S.G. Hickey, C. de Mello Donega, Highly Luminescent Water-Soluble CdTe Quantum Dots // *Nano Lett.*, **3**, pp. 503-507 (2003).
- [5] Д.В. Корбутяк, С.М. Калитчук, Ю.Б. Халявка, А.П. Щербак, П.І. Фейчук, В.В. Стрельчук. Спектри фотолюмінісценції та оптичного поглинання квантових точок *CdTe* в колоїдних розчинах і полімерних матрицях // *Tesu donoвideй III Української наукової конференції з фізики напівпровідників*, Одесса, с. 75 (2007).
- [6] Y. Liu, W. Chen, A.G. Joly, Y. Wang, C. Pope, Y. Zhang, J-O Bovin, and P. Sherwood. Comparison of Water-Soluble *CdTe* Nanoparticles Synthesized in Air and in Nitrogen. // J. Phys. Chem.B., 110, pp. 16992-17000 (2006).
- [7] L. Besombes, L. Marsal, K. Kheng, T. Charvolin, Le Si Dang, A. Wasiela, H. Mariette. <u>Fine structure of the exciton in a single asymmetric CdTe quantum dot</u>. // J.Crystal Growth., 214/215, pp. 742-746 (2000).
- [8] S.J. Prado, C. Trallero-Giner, A.M. Alcalde, V. Lopez-Richard, G.E. Marques. Optical Transitions in a single CdTe spherical quantum dot // Phys. Rev. B., 68, pp. 235327-235336 (2003).
- [9] Y. Masumoto, K. Sonobe, Size-dependent energy levels of CdTe quantum dots // *Phys.Rew.B.*, **56**, pp. 9734-9737 (1997).
- [10] [X. W. Zhahg, J.B. Xia. Electronic structure and g factors of CdTe quantum ellipsoids // Physica E., 35, pp. 69-74 (2006).
- [11] R. Romestain and G. Fishman. Exitonic wave function, correlation energi, exchange energy, and oscillatorstrength in a cubic quantum dot // Phys. Rev. B., 49(3), pp.1774-1781 (1994).
- [12] Al. L. Efros, A.V. Rodina. Band-edge absortion and luminescence of nonspherical nanometer-size crystals // Phys.Rew.B., 47(15), pp. 10005-10007 (1993).
- [13] A.A. Sirenko, T. Ruf, M. Cardona, D.R. Yakovlev, W. Ossan, A. Waag, G. Landwehz, Photoluminescence and optical absorption in CdS_xSe_{1-x} nanocrystals // *Phys.Rew.B.*, 56, pp. 2114-2119 (1997).
- [14] S.J. Prado, C. Trallero-Giner, A.M. Alcalde, V. Lopez-Richard, G.E. Marques. Influence of quantum dot shape on the Landé g-factor determination // Phys. Rew.B., 69, pp. 201310-201314 (2004).
- [15] K. Yu, B. Zaman, S. Singh, D. Wang, and J.A. Ripmeester, The Effect of Dispersion Media on Photoluminescence of Colloidal CdSe Nanocrystals Synthesized from TOP // Chem. Matetr., 17, pp. 2552-2561 (2005).
- [16] M. Nirmal, D.J. Norris, M. Kuno, and M.G Bawendi, Al. L. Efros and M. Rosen. Observation of the "Dark Exciton" in CdSe Quantum Dot // Phys. Rew. Letters, 75(20), pp. 3728-3731 (1995).
- [17] D.J. Norris, Al. L. Efros and M. Rosen, M.G Bawendi, Size dependence of exciton fine structure in CdSe quantum dot. // Phys. Rew. B., 53(24), pp. 16347-16354 (1996).
- [18] Z. Yu, J. Li, O.B. O Connor, L.-W. Wang, and P.F. Barbara, Large Resonant Stokes Shift in CdS Nanocrystals // J. Phys. Chem.B., 107, pp. 5670-5674 (2003).
- [19] Al. L. Efros and M. Rosen, M. Kuno, M. Nirmal, D.J. Norris, and M. G Bawendi, Band-edge exciton in quantum dots of semiconductors with a degenerate valense band: Dark and bright exciton states // *Phys.Rew.B.*, 54(7), pp. 4843-4857 (1996).
- [20] P. Nandakumas and C. Vijayan, Y.V.G.S. Marti. Optical absorption and photoluminescence staies on CdS quantum dots in Nafion // *J.of Appl.Phys.*, **91**(3), pp.1509-1515 (2002).
- [21] Н.В. Бондарь, М.С. Бродик, Г.М. Тельбиз. Вклад внутренних и поверхностных состояний носителей заряда в спектры излучения квантовых точек *CdS* в боросиликатном стекле // ФТП., **40**(8), сс.948-952 (2006).
- [22] M. Nirmal and L. Brus, Luminescence Photophysics in Semiconductor Nanocrystals. // Acc.Chem. Res., 32, pp. 407-414 (1999).
- [23] S. Maskowskii, G. Prechtl and W. Heiss, F.V. Kyrychenko, G. Karczewski and J. Kossut, Impact of carrier redistribution on the photoluminescence of CdTe self-assembled quantum dot ensembles // Phys.Rew.B., 69, pp. 205325-205336 (2004).
- [24] W.W. Yu, J. Zhang, J. Aldana, X. Peng, and M. Xiao. Photoluminescence upconversion in colloidal CdTe quantum dots // *Phys.Rew.B.*, **68**, pp. 125318-125324 (2003).
- [25] E.R. Glaser, B.R. Bennett, B.V. Shanabrook, and R. Magno, Photoluminescence studies of self-assembled InSb, GaSb, and AlSb quantum dot heterostructures // Appl. Phys. Lett., 68, pp. 3614-3616 (1996).
- [26] L. Besombes, K. Kheng, L. Marsal, H. Mariette, Few-particle effects in single CdTe quantum dots // *Phys.Rew.B.*, 65, pp. 121314-121318 (2002).
- [27] Л.В. Келдыш. Кулоновское взаимодействие в тонких пленках полупроводников и полуметаллов. // Письма в ЖЭТФ., **29**(11), сс. 716-719 (1979).

Екситонний стан та зсув Стокса...

- [28] V.I. Boichuk and I.V. Bilynskii. Bound Energy of the Wannier Exciton in Similar Heterogeneous Double Structures // Phys. Stat. Sol.(b).,174, pp. 463-470 (1992)
- [29] R.J. Elliott, Symmetry of Excitons in *Cu₂O* // *Phys.Rew.*, 124(2), pp. 340-345 (1961).

V.I.Boichuk, I.V.Bilynsky, I.O.Shakleina

Exciton State and Stokes Shift in a Cubic Quantum Dot

Ivan Franko Drohobych State Pedagogical University, кафедра теоретичної фізики 24 Ivan Franko St., Drohobych,UA–82100, Ukraine, e-mail: ioshak@mail.ru

We present the theory of exciton states in cubic quantum dots taking into account the fact that the interaction between an electron and a hole differs from the Coulomb interaction of two point charges. It is caused by inhomogenuity of the system and existence of confined surface charges. We defined the dependence of exciton binding energy, oscillator strength in an exciton state and the exciton exchange energy as a function of quantum dot size and dielectric permittivity of the matrix. On the basis of the performed investigation we explained some peculiarities of exciton spectra of the CdTe crystal quantum dot.