

В.І. Бойчук, І.В. Білинський, О.А. Сокольник

## Вплив форми квантової точки на коефіцієнт поглинання світла, зумовлений міжрівневими переходами

*Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка,  
82100, Львівська обл., Дрогобич, вул. Стрийська, 3, e-mail: sokolnik@gmail.com*

У роботі за допомогою теорії збурень досліджено вплив форми квантової точки (КТ) на енергетичний спектр електрона. Зокрема, детально проаналізовано генезис енергетичних рівнів для КТ кубічної, еліпсоїдальної, циліндричної та тетраедричної форми при зміні об'єму квантової точки. Базовою прийнято квантову точку сферичної симетрії, для якої енергію електрона можемо знайти точно, розв'язавши рівняння Шредінгера. Для основного стану та перших збуджених станів електрона знайдено енергії та їх хвильові функції. На основі проведених обчислень енергії та хвильових функцій станів визначено правила відбору та залежність коефіцієнту поглинання світла, що зумовлене міжрівневими переходами електрона у квантових точках зазначених форм. Конкретні обчислення проведено для КТ GaAs у напівпровідниковій матриці AlAs.

**Ключові слова:** квантова точка, форма квантової точки, енергетичний спектр, оптичні переходи, сили осцилятора, коефіцієнт поглинання.

*Стаття постуила до редакції 12.03.2012; прийнята до друку 15.06.2012.*

### Вступ

Нуль-вимірні квантові точки (КТ) привертають велику увагу дослідників не лише через різноманітність нових фізичних та хімічних властивостей, але й завдяки потенційним можливостям застосування гетеросистем з квантовими точками в різних оптоелектронних пристроях [1 - 3]. Ряд експериментальних та теоретичних досліджень зосереджено на вивченні квантових розмірних ефектів. Коли розміри КТ наближаються до борівського радіуса екситона, як відомо, спостерігаються нові фізичні властивості систем, які значно відрізняються від властивостей відповідних масивних кристалів. Одним з проявів зазначених особливостей гетеросистем є залежність ширини забороненої зони від розміру напівпровідникової квантової точки. Відомо також, що деякі малі параметри об'ємних матеріалів стають суттєво більшими для квантових точок. Зокрема, енергії обмінної електрон-діркової та електрон-фононної взаємодій напівпровідників чи діелектриків зростають у декілька разів при зменшенні розмірів КТ [4 - 6].

В останні роки зріс інтерес до вивчення оптичних властивостей низьковимірних гетероструктур на основі широкозонних напівпровідників. Пристрої на їх основі (лазери, світлодіоди, фотоприймачі) не лише працюють у фіолетовій та ультрафіолетовій, але й у червоній та інфрачервоній областях спектру

[7, 8]. Гетеструктури з КТ створюються на базі різних напівпровідників: GaAs, GaN, ZnSe, ZnO, CdS, CdSe, CdTe [9 - 13]. Проведені дослідження показали, що квантові точки гетеросистем зазначених та інших напівпровідників залежно від технології їх отримання та матриць, у яких вони знаходяться, можуть мати різну форму. Незважаючи на те, що від форми КТ можуть залежати різні фізичні властивості гетероструктури, вона часто є невідомою не лише через недостатню кількість експериментальних вимірювань та внаслідок існування "дисперсії" як за розмірами, так і за формою КТ [14]. Тому форму КТ нерідко встановлюють на основі загальних фізичних принципів. Найчастіше в теоретичних моделях розглядаються сферичні, еліпсоїдальні, кубічні, циліндричні та пірамідальні КТ [15 - 20].

Для заданої гетероструктури енергетичний спектр різних квазічастинок (електронів, дірок, фононів і т.д.) визначається виглядом поверхні КТ. З іншого боку, на основі порівняння теоретичних розрахунків та даних експерименту можна встановити форму КТ. Зокрема, досить чутливими до форми КТ є оптичні вимірювання. Обчислення оптичних характеристик гетероструктур (сили осциляторів переходів, коефіцієнтів поглинання світла та люмінесценції) ґрунтуються на визначенні значення енергії та хвильових функцій квазічастинок. Проте лише для КТ сферичної форми ці величини можна точно визначити. Якщо ж КТ є іншої форми, то навіть для найпростішої задачі Шредінгера для

електрона в однозонному наближенні необхідно, взагалі кажучи, використовувати наближені методи (через неможливість розділення змінних) або використовувати чисельні методи розв'язку диференціальних рівнянь [21], які визначаються поставленими крайовими умовами.

Метою поданої роботи є дослідження впливу форми КТ на енергетичний спектр електрона і оптичні властивості (сила осцилятора переходу, коефіцієнт міжзонного поглинання світла) напівпровідникових наногетеросистем. Для цього розглянуто КТ широкозонного напівпровідника і використано точні розв'язки рівняння Шредінгера для електрона сферичної КТ в наближенні ефективної маси. Квантові точки для інших форм (кубічної, еліпсоїдальної, циліндричної, тетраедричної) вибрано такого ж об'єму і такими, щоб потенціальна енергія заряду в КТ розглядуваної форми була близькою до його потенціальної енергії у сферичній КТ. Конкретні обчислення проведено для КТ GaAs, що поміщена у матриці AlAs.

## I. Енергії та хвильові функції зв'язаних станів електрона в КТ

Розглядається квантова напівпровідникова точка, що поміщена у напівпровідникову чи діелектричну матрицю. У випадку широкозонних напівпровідників можна скористатися однозонним наближенням для електронів. Нехай наногетеросистема є закритою, тобто потенціальна енергія електрона в КТ є меншою, ніж у матриці. У наближенні ефективної

маси рівняння Шредінгера для електрона буде мати вигляд:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2} \tilde{\nabla}^2 \frac{1}{m^*(\mathbf{r})} \tilde{\nabla}^2 + U(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}), \quad (1)$$

де  $m^*(\mathbf{r})$  - ефективна маса електрона.

Потенціальна енергія  $U = U(\mathbf{r})$  визначається як типами кристалів, для КТ та матриці, так і формою квантової точки. Найпростіший вигляд функції  $U = U(\mathbf{r})$  буде для сферичної квантової точки. Нехай тоді

$$U(\mathbf{r}) = U_{sf}(r) = \begin{cases} 0, & r < R \\ U_0, & r \geq R \end{cases}, \quad (2)$$

де  $U_0$  - розрив зон провідності кристалів, що утворюють гетероструктуру. Підставивши (2) в (1), одержимо рівняння Шредінгера, яке має точні розв'язки:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \tilde{\nabla}^2 \frac{1}{m^*} \tilde{\nabla}^2 + U(\mathbf{r}) \right\} j_{nlm}(r, J, j) = e_{nl} j_{nlm}(r, J, j), \quad (3)$$

де  $j_{nlm}(r, J, j) = R_{nl}(r) Y_{lm}(J, j)$ ,  $Y_{lm}(J, j)$  - сферичні функції,  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm l$  - азимутальне (магнітне) квантове число,  $l = 0, 1, 2, 3, \dots$  - орбітальне квантове число,  $n = 1, 2, 3, \dots$  - номер кореня дисперсійного рівняння:

$$\left( -k m_2 r J_{\frac{3}{2}+l}(kr) K_{\frac{1}{2}+l}(xr) + J_{\frac{1}{2}+l}(kr) \left( l(m_2 - m_1) K_{\frac{1}{2}+l}(xr) + m_1 r x K_{\frac{3}{2}+l}(xr) \right) \right),$$

де  $k$  і  $x$  визначаємо з умов  $\frac{2m |E_e^{(0)}|}{\hbar^2} = k^2$ ,  $\frac{2m(V_0 - |E_e^{(0)}|)}{\hbar^2} = x^2$ .

Будемо розглядати квантові точки кубічної, еліпсоїдальної, циліндричної та пірамідальної форм, які мають такий же об'єм, як і КТ сферичної форми. У цьому випадку, як показують проведені обчислення, через симетрію розглядуваних КТ,  $U(\mathbf{r})$

не буде сильно відрізнятися від  $U_{sf}(r)$ . Тоді рівняння Шредінгера (1) перепишемо у вигляді:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2} \tilde{\nabla}^2 \frac{1}{m^*(\mathbf{r})} \tilde{\nabla}^2 + U_{sf}(r) + W(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}), \quad (4)$$

де  $W(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r}) - U_{sf}(r)$ ,

$$\hat{H}^0 = -\frac{\hbar^2}{2} \tilde{\nabla}^2 \frac{1}{m^*(\mathbf{r})} \tilde{\nabla}^2 + U_{sf}(r).$$

Потенціал  $W(\mathbf{r})$  має симетрію розглядуваної

квантової точки, яка є нижчою, ніж симетрія сферичної КТ, і його можна вважати невеликим збуренням. Дослідимо генезис квантових станів при переході від сферичної до КТ іншої форми. З цією метою запишемо рівняння (4) в енергетичному представленні і знайдемо енергетичний спектр електрона в конкретних квантових точках.

Представимо хвильову функцію  $\psi$  у вигляді лінійної комбінації  $j_n$ :

$$\psi = \sum_{nlm} C_{nlm} j_{nlm}. \quad (5)$$

Величина  $C_{nlm}$  є хвильовою функцією стану  $n, l, m$  в енергетичному представленні, тому якщо  $\psi$  є нормованою, виконується умова

$$\sum_{nlm} |C_{nlm}|^2 = 1.$$

Рівняння (4) представиться системою лінійних алгебраїчних рівнянь:

$$\sum_{n'l'm'} \langle nlm | \hat{H} | n'l'm' \rangle C_{n'l'm'} = E C_{nlm}, \quad (6)$$

Для знаходження спектру електрона необхідно діагоналізувати матрицю  $\langle nlm | \hat{H} | n'l'm' \rangle$ , здійснивши унітарне перетворення:

де

$$\langle nlm | \hat{H} | n'l'm' \rangle = X_{nl} d_{n,n'}^{n'l'm'} d_{l,l'} d_{m,m'} + W_{nlm,n'l'm'}$$

$$\sum_{n'l'm'} \langle nlm | U \hat{H} U^{-1} | n''l''m'' \rangle U_{n''l''m'',n'l'm'} C_{n'l'm'} = E \sum_{n'l'm'} U_{nlm,n'l'm'} C_{n'l'm'}. \quad (7)$$

$n''l''m''$

Отримаємо, що

$$\sum_{nlm} \left( \hat{H}_{nlm,nlm} d_{n,n'} d_{l,l'} d_{m,m'} - E \right) \mathcal{C}_{nlm} = 0, \quad (8)$$

де  $\hat{H} = U \hat{H} U^{-1}$ , а  $\mathcal{C}_{nlm} = \sum_{n'l'm'} U_{nlm,n'l'm'} C_{n'l'm'}$  - власна функція гамільтоніана  $\hat{H}$ .

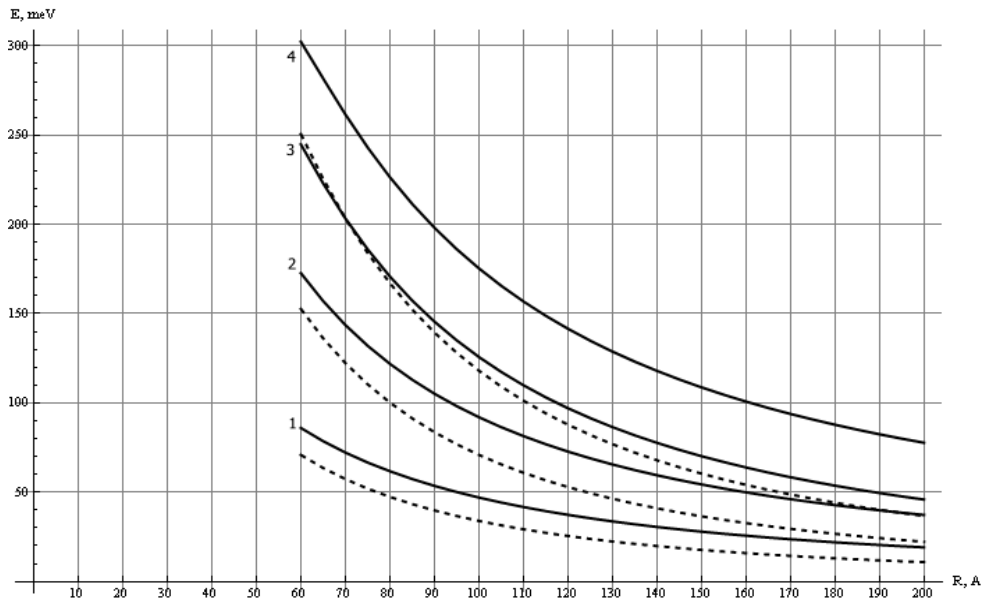


Рис. 1. Енергетичний спектр електрона кубічної КТ.

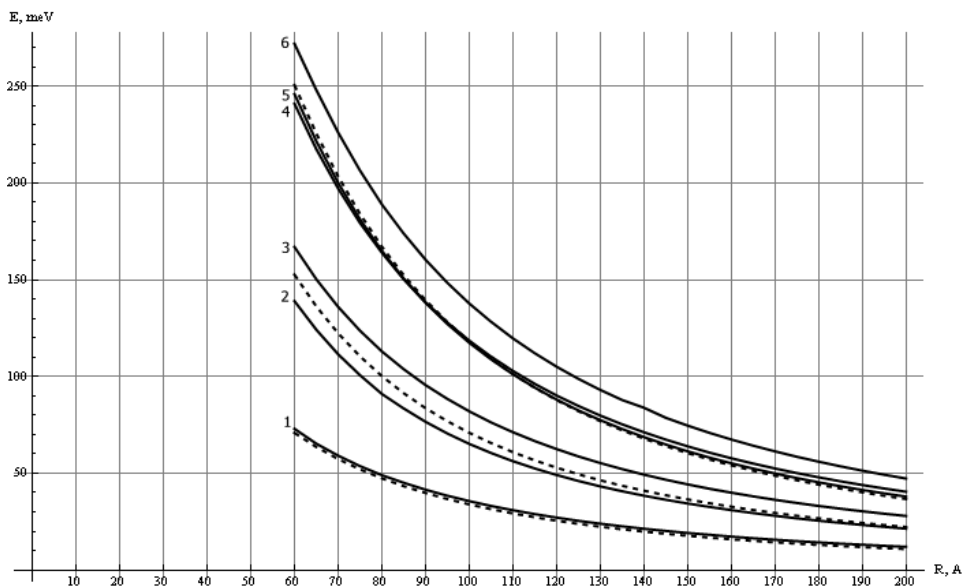


Рис. 2. Енергетичний спектр електрона еліпсоїдальної КТ.

Надалі розглянемо детальніше, як зміниться енергія та хвильові функції (1s, 1p, 1d) електрона сферичної КТ у квантових точках з нижчою симетрією форми. У цьому випадку маємо 9 різних коефіцієнтів  $C_{nlm}^0$ , а матриця  $\langle nlm | \hat{H} | n'l'm' \rangle$  буде містити 81 елемент.

Конкретні обчислення проведено для гетеросистеми GaAs/AlAs. Знайдено енергію

основного і перших збуджених станів електрона КТ кристалу GaAs для кубічної, еліпсоїдальної, циліндричної та пірамідальної КТ як функцію параметра R, який визначено з умови, що об'єм сферичної КТ  $(\frac{4}{3}\pi R^3)$  дорівнює об'єму КТ іншої форми, подано на рис. 1 - 4.

На рис. 1 кривою 1 зображено енергію основного

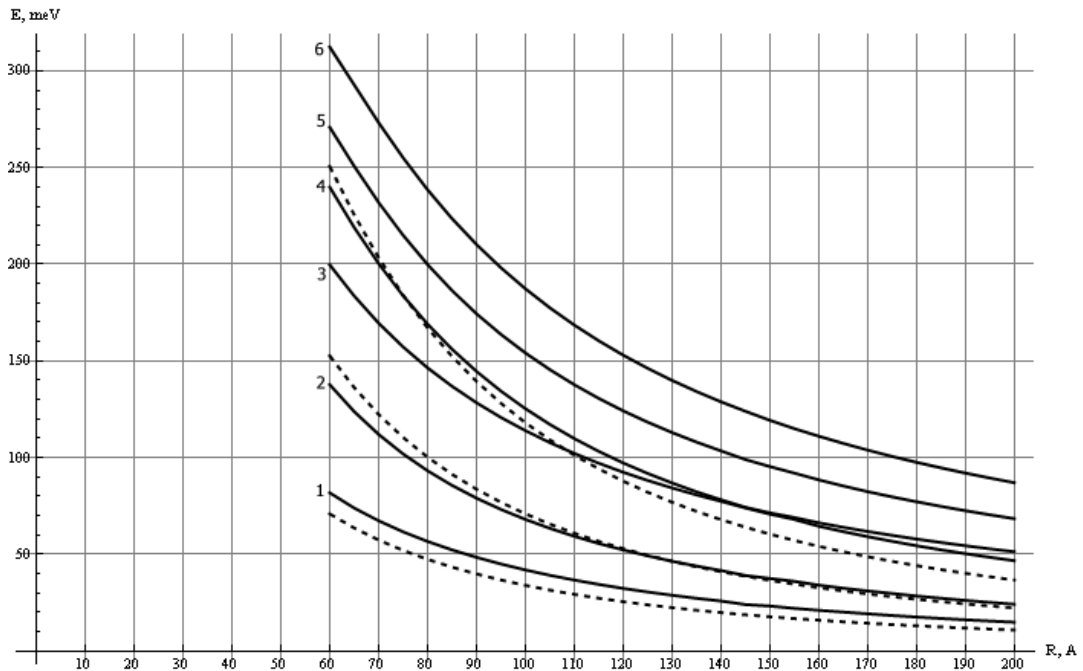


Рис. 3. Енергетичний спектр електрона циліндричної КТ.

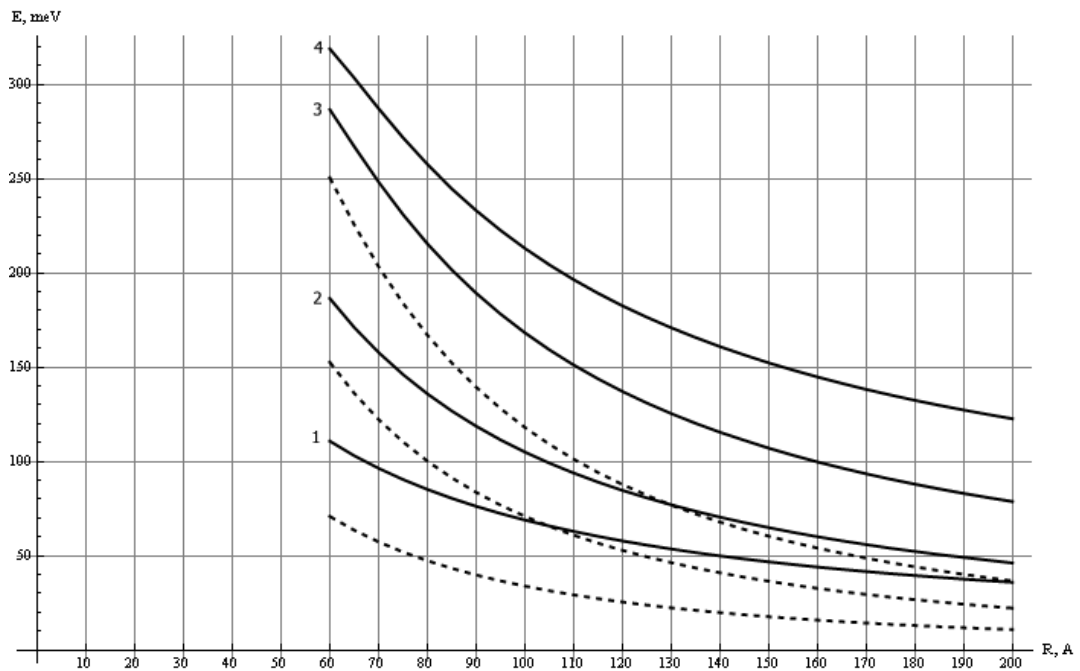


Рис. 4. Енергетичний спектр електрона пірамідальної КТ.

стану, 2 – першого збудженого, 3 і 4 – відповідно дво- і трикратно вироджені розщеплення другого збудженого стану. На рис. 2 - 3: 1 – основний стан, 2 і 3 – перший збуджений, 4, 5 і 6 – другий збуджений. Рис. 4: 1 – основний стан, 2 – перший збуджений, 4 і 5 – другий збуджений.

З наведених рисунків видно, що для КТ будь-якої форми енергія всіх рівнів зменшується при збільшенні  $R$  (збільшенні об'єму КТ). Крім того, отримано, що у КТ кубічної та пірамідальної форм, у вибраній області зміни розмірів, відповідні енергетичні рівні мають більшу енергію, ніж це було у КТ сферичної форми. Такий результат можна пояснити, виходячи з того, що у КТ тетраедричної форми отримуємо сильніше обмеження руху заряду, ніж у сферичній КТ. Природно, що обмеження руху у такій точці є більшим у порівнянні з кубічною КТ.

Що стосується хвильових функцій станів у цих

двох типах КТ, то навіть якісно вони суттєво відрізняються. У кубічній КТ, як показали обчислення, основний стан є не виродженим, а перший збуджений стан – трикратно вироджений, як і в КТ сферичної форми. У розглянутому наближенні хвильові функції, що відповідають цим енергетичним рівням, є такими ж, як у сферичній КТ. Тому їх можна називати  $s$ - та  $p$ -рівнями системи. Отже,

$$\Psi_1 = j_{1,0,0}, \Psi_2 = j_{1,1,-1}, \Psi_3 = j_{1,1,0}, \Psi_4 = j_{1,1,1}.$$

П'ятикратно вироджений  $d$ -рівень сферичної КТ у квантовій точці кубічної форми розщепляється на два ( $E_3$  і  $E_4$ ), один з яких є трикратно виродженим ( $E_3$ ), а другий ( $E_4$ ) – двократно виродженим. Відповідні хвильові функції мають вигляд:

$$E_3 - \Psi_5 = j_{1,2,-1}, \Psi_6 = j_{1,2,1}, \Psi_7 = \frac{1}{\sqrt{2}}(j_{1,2,-2} - j_{1,2,2}),$$

$$E_4 - \Psi_8 = \frac{1}{\sqrt{2}}(j_{1,2,-2} + j_{1,2,2}), \Psi_9 = j_{1,2,0}.$$

У КТ тетраедричної форми енергетичні рівні характеризують такими властивостями: рівень з найменшою енергією є не виродженим, наступні рівні є відповідно трикратно, двократно і трикратно виродженими. Зокрема, для  $R = 60 \text{ \AA}$  маємо:

$$E_1 - \Psi_1 = j_{1,0,0},$$

$$E_2 - \Psi_2 = -0,93j_{1,1,-1} + 0,21j_{1,2,-1} + 0,3j_{1,2,2},$$

$$\Psi_3 = 0,93j_{1,1,1} + 0,3j_{1,2,-2} - 0,21j_{1,2,1},$$

$$\Psi_4 = 0,93j_{1,1,0} + 0,36j_{1,2,0},$$

$$E_3 - \Psi_5 = 0,82j_{1,2,-1} - 0,58j_{1,2,2},$$

$$\Psi_6 = 0,58j_{1,2,-2} + 0,82j_{1,2,1},$$

$$E_4 - \Psi_7 = -0,36j_{1,1,0} + 0,93j_{1,2,0},$$

$$\Psi_8 = -0,36j_{1,1,-1} - 0,54j_{1,2,-1} - 0,76j_{1,2,2},$$

$$\Psi_9 = 0,36j_{1,1,1} - 0,76j_{1,2,-2} + 0,54j_{1,2,1}.$$

У циліндричній квантовій точці, яка характеризується аксіальною симетрією, отримуємо шість енергетичних рівнів. Енергія основного рівня є більшою, ніж у сферичній КТ у цій області зміни  $R$ . Енергетичні рівні п'яти збуджених станів, залежно від  $R$ , мають енергію як більшу, так і меншу за енергії збуджених станів сферичної КТ. Обчислення показали, що основний стан є не виродженим, а збуджені стани є як виродженими, так і

не виродженими. Зокрема, для  $R = 60 \text{ \AA}$  відповідність між енергією та хвильовими функціями наступна:

$$E_1 - \Psi_1 = 0,98j_{1,0,0} + 0,22j_{1,2,0},$$

$$E_2 - \Psi_2 = j_{1,1,0},$$

$$E_3 - \Psi_3 = j_{1,1,1}, \Psi_4 = j_{1,1,-1},$$

$$E_4 - \Psi_5 = j_{1,2,-1}, \Psi_6 = j_{1,2,1},$$

$$E_5 - \Psi_7 = -0,22j_{1,0,0} + 0,98j_{1,2,0},$$

$$E_6 - \Psi_8 = j_{1,2,2}, \Psi_9 = j_{1,2,-2}.$$

За структурою енергетичний спектр еліпсоїдальної КТ аналогічний спектру циліндричної КТ. Три енергетичні рівні сферичної КТ розщеплюються у циліндричній КТ на шість рівнів. Це пояснюється однаковими симетричними властивостями форм зазначених КТ. Маємо таку відповідність між енергією та хвильовими функціями

станів ( $R = 60 \text{ \AA}$ ):

$$E_1 - \Psi_1 = 0,99j_{1,0,0} + 0,11j_{1,2,0},$$

$$E_2 - \Psi_2 = j_{1,1,0},$$

$$E_3 - \Psi_3 = j_{1,1,1}, \Psi_4 = j_{1,1,-1},$$

$$E_4 - \Psi_5 = -0,11j_{1,0,0} + 0,99j_{1,2,0},$$

$$E_5 - \Psi_6 = j_{1,2,-1}, \Psi_7 = j_{1,2,1},$$

$$E_6 - \Psi_8 = j_{1,2,2}, \Psi_9 = j_{1,2,-2}.$$

## II. Коефіцієнт міжрівневого поглинання

Для кожної геометричної форми КТ

$$M_{ia,jb} = \langle jb | ez | ia \rangle = \int \Psi_{jb}^*(x, y, z) \cdot ez \cdot \Psi_{ia}(x, y, z) dV, \quad (9)$$

$$a = 1, 2, \dots, s_a, \quad b = 1, 2, \dots, s_b,$$

де  $s_a$  - кратність виродження рівня  $i$ ,  $s_b$  - кратність виродження рівня  $j$ , а силу осцилятора міжрівневого переходу записати так:

$$f_{ia,jb} = \frac{2m_0}{e^2 \hbar^2} (E_j - E_i) |M_{ia,jb}|^2. \quad (10)$$

Коефіцієнт поглинання світла, що зумовлений міжрівневим переходом з одного стану з енергією  $E_i$

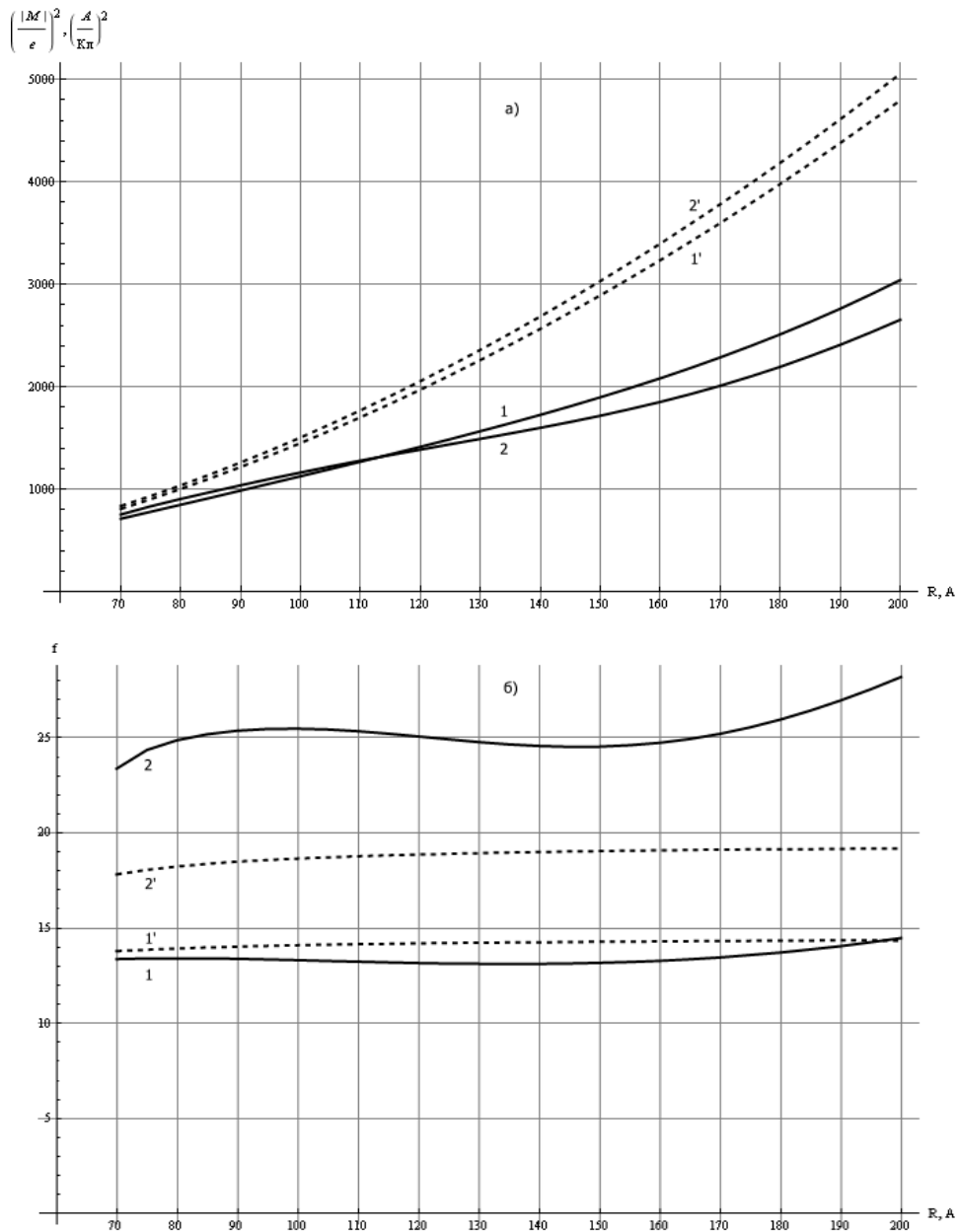


Рис. 5. Дипольні моменти оптичних переходів (а) та сила осцилятора переходів (б) для КТ сферичної та кубічної форм.

в інший стан з енергією  $E_j$ , визначимо як

$$a(w) = w \sqrt{\frac{m_0}{e_0 e}} \sum_{i,j} \sum_{a,b} \frac{s |M_{ia,jb}|^2 \hbar \Gamma_{ia,jb}}{(E_j - E_i - \hbar w)^2 + (\hbar \Gamma_{ia,jb})^2} \quad (11)$$

де  $W$  – частота падаючої хвилі,  $e_0$  – електрична стала,  $m_0$  – магнітна стала,  $e$  – діелектрична проникність КТ,  $\hbar \Gamma_{ia,jb}$  – енергія релаксації, що зумовлена електрон-фононою взаємодією та іншими факторами розсіяння. Густина зарядів у КТ  $S$  вибрано на основі припущення, що у КТ може знаходитись лише 1 електрон, тому  $S = 3/(4\pi a^3)$ .

Згідно з наведеними вище формулами, обчислюємо ймовірність оптичних переходів, силу осцилятора переходу та коефіцієнт поглинання світла для різних геометричних форм КТ. Зазначені фізичні величини порівнюємо з відповідними параметрами для КТ сферичної симетрії, для яких переходи дозволені лише між тими рівнями, коли справедливі умови:

$$\Delta l = \pm 1, \quad \Delta m = 0, \pm 1,$$

тобто переходи між s- і p-рівнями та p- і d-рівнями і т.д.

На рис. 5 подано залежність від  $R$  квадрату дипольного моменту переходу (рис. 5, а) і сили осцилятора переходу (рис. 5, б) для КТ кубічної

форми. Відмінними від нуля є матричні елементи між рівнями з енергією  $E_1$  та  $E_2$  (крива 1), а також  $E_2$  і  $E_4$  (крива 4). Інші переходи в дипольному наближенні заборонені. Для КТ сферичної форми відповідні матричні елементи представлені кривими 1' та 2'. Видно, що збільшення розміру КТ супроводжується збільшенням дипольних моментів переходів як для КТ сферичної форми, так і для КТ кубічної форми. Сила осцилятора переходів у сферичній КТ для розглядуваної області  $R$  слабо залежить від розміру.

Причому, для всієї області зміни  $R$  маємо, що  $f_{2,4} > f_{1,2}$  ( $f_{2,4} / f_{1,2} \approx 1,3$ ). Для кубічної КТ різниця між значеннями сил осциляторів переходів є більшою. Зокрема,  $f_{1,2}$  та  $f_{2,4}$  немонотонно змінюються при зміні розміру квантової точки. Зазначені особливості будуть впливати на залежність максимуму коефіцієнта поглинання від розміру КТ.

На основі отриманих формул для хвильових функцій квантових станів електрона можна обчислити сили осциляторів переходу між рівнями і

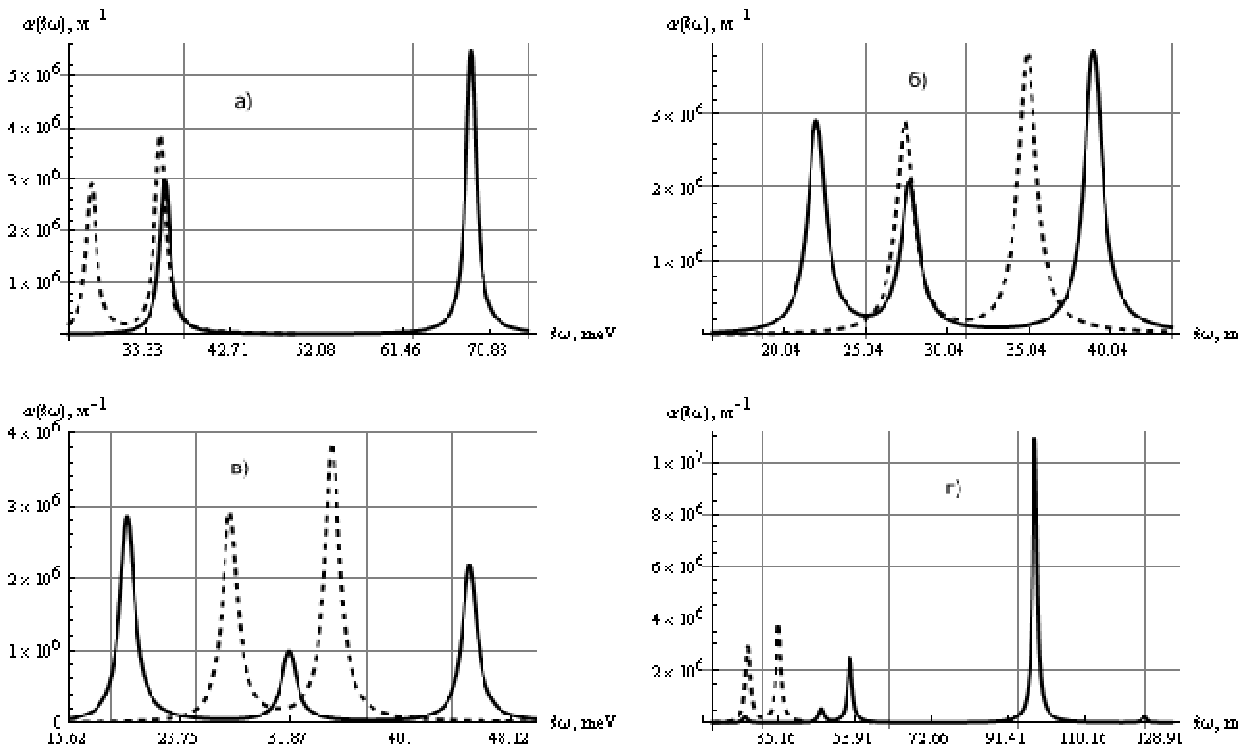


Рис. 6. Коефіцієнти поглинання для міжрівневих оптичних переходів у КТ різної форми: а) кубічна, б) еліпсоїдальна, в) циліндрична, г) пірамідальна.

для квантових точок інших форм. Встановлено, що для еліпсоїдальної та циліндричної КТ дозволеними є переходи  $E_1 \leftrightarrow E_2$ ,  $E_2 \leftrightarrow E_4$  та  $E_3 \leftrightarrow E_5$ ; для пірамідальної -  $E_1 \leftrightarrow E_2$ ,  $E_1 \leftrightarrow E_4$ ,  $E_2 \leftrightarrow E_3$ ,  $E_2 \leftrightarrow E_4$  і  $E_3 \leftrightarrow E_4$  (рис. 1 - 4).

Формула (11) дає можливість визначити залежність коефіцієнта поглинання від частоти зовнішньої електромагнітної хвилі в області переходів заряду між найнижчими рівнями для всіх форм КТ. На рис.6 подано залежність  $a = a(\omega)$  при

$R = 120 \text{ \AA}$ . Штрихові криві відповідають функції  $a(\omega)$  для сферичної КТ. Видно, що у кубічній КТ залежність  $a = a(\omega)$  якісно найближча до відповідної функції сферичної квантової точки, хоч і енергії піків поглинання та відстань між ними значно відрізняються. У КТ еліпсоїдальної та циліндричної форм при тому ж об'ємі КТ внаслідок розщеплення рівнів виникає три максимуми коефіцієнта поглинання. Ще більша різниця спостерігається між коефіцієнтами поглинання зазначених форм та пірамідальної КТ. У цьому випадку отримано для  $a = a(\omega)$  один яскраво виражений максимум та три

додаткові. Найменш інтенсивний пік поглинання реалізується практично при тій же енергії, що і для сферичної КТ.

## Висновки

1. У роботі за допомогою теорії збурень досліджено вплив форми квантової точки (КТ) на енергетичний спектр електрона. Зокрема, детально проаналізовано генезис енергетичних рівнів для КТ кубічної, еліпсоїдальної, циліндричної та тетраедричної форми при зміні об'єму квантової точки.

2. Розраховано вплив гібридизації станів на вигляд хвильових функцій станів електрона у КТ різної форми.

3. Обчислено сили осциляторів та коефіцієнти поглинання, що зумовлені оптичними переходами у КТ під впливом лінійно-поляризованого світла.

**Бойчук В.І.** - доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри теоретичної фізики;  
**Білинський І.В.** - кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри теоретичної фізики;  
**Сокольник О.А.** - аспірант.

- [1] V.I. Klimov, A.A. Mikhailovsky, Su Xu, A. Malko, J.A. Hollingsworth, C.A. Leathdate, H.-J. Eisler, and M.G. Bawendi. Optical Gain and Stimulated Emission in Nanocrystal Quantum Dots // *Science*, **290**, p. 314 (2000).
- [2] C.J. Wang, M. Shim, P. Guyst-Sinonnest. Intraband relaxation in CdSe nanocrystals and the strong influence of the surface ligands // *Science*, **291**, p. 2390 (2001).
- [3] D.H. Feng, Z.Z. Xu, T.Q. Jia, X.X. Li, S.Q. Gong Quantum size effects an exciton states in indirect-gap quantum dots // *Phys. Rev. B.*, **68**, pp. 035334-035341 (2003).
- [4] R. Remestain, G. Fishman. Excitonic wave function, correction energy, exchange energy, and oscillator strength in a cubic quantum dot // *Phys. Rev. B.*, **49**(3), pp. 1774-781 (1994).
- [5] D.O. Demchenko, Lin Wang Wang. Optical transitions and nature of stokes shift in spherical CdS quantum dots // *Phys. Rev. B.*, **73**, pp. 155326-155331 (2006).
- [6] V.I. Boichuk, I.V. Bilynsky, I.O. Shakleina and I.Kogotiouk.. Dialectic Mismatch at Finite Barrier Cubic Quantum Dots // *Physica E.*, **43**, pp. 161-166 (2010).
- [7] V.I. Boichuk, I.V. Bilynsky, I.O. Shakleina. Energy spectrum of a change of quantum dots with different shapes // *Ukr. J. Phys.*, **53**(9), pp. 894-899 (2008).
- [8] В.І. Бойчук, І.В. Білинський, І.О. Шаклеїна. Вплив симетрії форми квантової точки на енергетичний спектр електрона // *Журн. фіз. досл.*, **12**(3), pp. 3704-3710 (2008).
- [9] S. Ruvimov, P. Werner, K. Scheerschmidt [and al.] Structural characterization of (In,Ga)As quantum dots in a GaAs matrix // *Phys. Rev. B*, **51**(20), pp. 14766-14769 (1995).
- [10] M. Miyamura, K. Tachiboma, and Y. Arakama. // *Appl. Phys. Lett.*, **80**, p. 3937 (2002).
- [11] T. Tawara, S. Tanaka, H. Kumana, and I. Suemune // *Appl. Phys. Lett.*, **75**, p. 235 (1999).
- [12] M. Lu, X.J. Yang, S.S. Perry, and J.W. Rabalais // *Appl. Phys. Lett.*, **80**, p. 2096 (2002).
- [13] D.J. Norris and M.G. Bawendi // *Phys. Rev. B.*, **53**, p. 16338 (1996).
- [14] N. Preda, L. Minut, I. Baltog, T. Velula, V. Teodorescu. Optical properties of low-dimensional PbI<sub>2</sub> particles embedded in polyacrylamide matrix // *Journal of Optoelectronics and Advanced Materials*, **8**(3), pp. 909-913 (2006).
- [15] G. Cantele, G. Piacente, D. Ninno [and al.]. Optical anisotropy of ellipsoidal quantum dots. // *Phys. Rev. B.*, **66** (11), pp. 113308-113311 (2002).
- [16] Г.Г. Зегря, О.В. Константинов, А.В. Матвеевцев. Структура энергетических квантовых уровней в квантовой точке, имеющей форму сплюснутого тела вращения. // *Физика и техника полупроводников*, **37**(3), pp. 334-338 (2003).
- [17] V.I. Boichuk, V.B. Hol'skyi, R.Yu. Kubay. The electron energy spectrum in an ellipsoidal quantum dot with regard for finite band gap at the interface // *Ukr. J. Phys.*, **53**(6), pp. 574-578 (2008).



- [18] V.I. Boichuk, I.V. Bilynskyi, I.O. Shakleina. Interband optical transitions in spherical nanoheterostructures. // *Quantum Electronics & Optoelectronics*, **8**(4), pp. 26-32 (2005).
- [19] L. Zhang. Polar optical phonon states and Frönlisch electron-phonon interaction Hamiltonians in a wurtzite nitride quantum dot. // *Phys. Lett. A.*, **373**, pp. 2087-2090 (2009).
- [20] E.P. Pokotilov and V.A. Fonoberov, V.M. Fomin and J.T. Devreese. Development of an eight-band theory for quantum-dot heterostructures. // *Phys. Rev. B.*, **64**, pp. 245328-245344 (2001).
- [21] V.A. Fonoberov, E.P. Pokotilov, V.M. Fomin and J.T. Devreese. Photoluminescence of tetrahedral quantum-dot quantum wells // *Phys. Rev. Lett.*, **92**, pp. 127402-127406 (2004).

V.I. Boichuk, I.V. Bilynskyi, O.A. Sokolnyk

## Effect of a Quantum dot Shape on the Optical Absorption Coefficient Due to Intersubband Transitions

*Ivan Franko Drohobych State Pedagogical University, 82100, Lviv Region,  
Drohobych, Stryiska St., app.3, e-mail: [sokolnik@gmail.com](mailto:sokolnik@gmail.com)*

We have studied the influence of a quantum dot shape on the energy spectrum of an electron by perturbation theory. In particular, the genesis of the energy levels in cubic, ellipsoidal, cylindrical, and tetrahedral quantum dots by changing the volume of a quantum dot is analysed in detail. A spherically symmetric quantum dot is assumed to be basic. For a spherical quantum dot, the exact solution is obtained from the Schrödinger equation, which yields the energy of an electron. For the ground state and first excited state, we have found the energies and their wave functions. Using the calculated energies and the wave functions of the states, we have determined the selection rules and the dependence of the optical absorption coefficient due to intersubband transitions of an electron in quantum dots of the involved shapes. The specific calculations are performed for GaAs QDs embedded in AlAs semiconductor matrices.

**Key words:** quantum dot, the shape of quantum dots, energy spectrum, optical transitions, oscillator strength, the absorption coefficient.