

PACS numbers: 71.35.-y, 73.20.Mf, 73.21.La, 78.67.Hc, 81.07.Ta

Взаємодія електромагнетного випромінення з квантововимірними електронними станами в наногетероструктурах з квантовими точками

С. І. Покутній, П. П. Горбик

*Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка НАН України,
вул. Генерала Наумова, 17,
03164 Київ, Україна*

Проведено теоретичні дослідження взаємодії електромагнетного поля з електронними квантововимірними станами, які виникають у квазиульвимірних наногетеросистемах, що містять напівпровідникові квантові точки. Показано, що сили осциляторів переходів, а також дипольні моменти переходів для електронних станів у квазиульвимірних наносистемах набувають гігантських значень, істотно перевищуючих типові значення відповідних величин для об'ємних матеріалів. У рамках дипольного наближення встановлено, що гігантські значення перерізів поглинання електромагнетної хвилі в досліджуваних квазиульвимірних наносистемах уможливають використовувати такі наносистеми в якості нових сильно поглинальних наноматеріалів в широкому діапазоні довжин хвиль (від радіо- до видимого діапазону спектру).

The interaction of electromagnetic field with size-quantization electron states arising from quasi-zero-semiconductor nanoheterosystems containing quantum dots are theoretically studied. As shown, the transition oscillator strengths and transition dipole moments for the electron states in the quasi-zero-nanosystems take giant values significantly exceeding the typical values of the corresponding values for bulk materials. Within the dipole approximation, it is found that the giant values of electromagnetic-wave absorption cross sections in quasi-zero-nanosystems allow use them as new strongly absorbing nanomaterials in a wide wavelength range (from-radio-to-visible spectrum).

Проведены теоретические исследования взаимодействия электромагнетного поля с электронными квантоворазмерными состояниями, возникающими в квазиульвимірних наногетеросистемах, содержащих полупроводниковые квантовые точки. Показано, что силы осциляторов переходов, а также дипольные моменты переходов для электронных состояний в квазиульвимірних наносистемах принимают гигантские

значення, суттєво перевищують типові значення відповідних величин для об'ємних матеріалів. В рамках дипольного наближення встановлено, що гігантські значення сеченій поглинання електромагнітної хвилі в досліджуваних квазиульмерних наносистемах дають можливість використовувати такі наносистеми в якості нових сильно поглинаючих наноматеріалів в широкому діапазоні довжин хвиль (від радіо- до видимого діапазону спектра).

Ключові слова: взаємодія електромагнетного поля, квантововимірні електронні стани, напівпровідникові квантові точки.

Key words: interaction of electromagnetic field, size-quantization electron states, semiconductor quantum dots.

Ключевые слова: взаимодействие электромагнитного поля, квантово-размерные электронные состояния, полупроводниковые квантовые точки.

(Отримано 14 червня 2016 р.)

1. ВСТУП

В теперішній час інтенсивно проводяться дослідження, які присвячено пошуку наногетероструктур, що можуть виступати в якості сильно поглинаючих наносистем. Тому в даній роботі проводяться теоретичні дослідження взаємодії електромагнетного поля з електронними квантововимірними станами, виникаючими в квазиульмерних наногетеросистемах [1], що містять напівпровідникові квантові точки. В рамках дипольного наближення показано, що гігантські значення перерізів поглинання електромагнетної хвилі в досліджуваних квазиульмерних наносистемах дають можливість використовувати такі наносистеми в якості нових сильно поглинаючих матеріалів в широкому діапазоні довжин хвиль (від радіо- до видимого діапазону спектра).

2. КВАНТОВОВИМІРНІ ЕЛЕКТРОННІ СТАНИ В НАНОСИСТЕМАХ

В [1] вивчалася модель квазиульмерної наносистеми: сферична КТ радіуса a , в об'ємі якої міститься напівпровідниковий матеріал з діелектричною проникністю (ДП) ε_2 , оточена діелектричною матрицею з ДП ε_1 . В об'ємі КТ знаходяться електрон e і дірка h з ефективними масами m_e і m_h (r_e і r_h — відстань електрона і дірки від центра КТ), причому ДП КТ і матриці сильно відрізнялися ($\varepsilon_2 \gg \varepsilon_1$). Припускалося також, що зони електронів і дірок в КТ мають параболічну форму.

В [1] досліджено енергетичний спектр електронно-діркової пари (екситона), що рухається в об'ємі КТ, у випадку, коли радіус a КТ обмежено умовою

$$a_0 \ll a_h \ll a \leq a_e, a_{ex}, \quad (1)$$

(де $a_e = \frac{\varepsilon_2 \hbar^2}{m_e} e^2$, $a_h = \frac{\varepsilon_2 \hbar^2}{m_h} e^2$ и $a_{ex} = \frac{\varepsilon_2 \hbar^2}{\mu} e^2$ — Борові радіуси дір-

ки, електрона й екситона в напівпровіднику з ДП ε_2 , $\mu = \frac{m_e m_h}{m_e + m_h}$

— зведена маса екситона, a_0 — характерний розмір порядку міжатомового), при виконанні якої для опису руху квазічастинок можна використовувати наближення ефективної маси. В рамках адіабатичного наближення вважаємо кінетичну енергію електрона найбільшою величиною, а останні чотири члени в Гамільтоніані екситона в КТ разом з оператором неадіабатичности врахуємо за теорією збурень. Використовуючи тільки перший порядок теорії збурень, запишемо спектр екситона $E_{n_e, l_e, m_e}^{n_h, l_h, m_h}(a)$ в стані $(n_e, l_e, m_e; n_h, l_h, m_h)$ (де n_e, l_e, m_e й n_h, l_h, m_h — головне, орбітальне і магнетне квантові числа електрона та дірки відповідно) в КТ радіуса a в такому вигляді [1]:

$$E_{n_e, l_e, m_e}^{n_h, l_h, m_h}(a) = T_{n_e, l_e}^e(a) + \bar{V}_{ee'}(a) + \lambda_{n_e, l_e, m_e}^{n_h, l_h, m_h}(a) + E_g, \quad (2)$$

де $T_{n_e, l_e}^e(a)$ — кінетична енергія електрона в сферичній потенціалній ямі нескінченної глибини КТ; $\bar{V}_{ee'}(a)$ — середнє значення енергії взаємодії електрона з власним зображенням на хвильових функціях сферичної ями нескінченної глибини. В формулі (2) енергія $\lambda_{n_e, l_e, m_e}^{n_h, l_h, m_h}(a)$ є власним значенням Гамільтоніяна важкої дірки:

$$H_h = -\frac{\hbar^2}{2m_h} \Delta_h + V_{hh'}(r_h, a) + \bar{V}_{n_e, l_e, m_e}(r_h, a), \quad (3)$$

$$\bar{V}_{n_e, l_e, m_e}(r_h, a) = \bar{V}_{eh'}(r_h, a) + \bar{V}_{eh'}(r_h, a) + \bar{V}_{he'}(r_h, a), \quad (4)$$

де \bar{V}_{eh} і $\bar{V}_{eh'}$, $\bar{V}_{he'}$ — середні значення енергії Кулонової взаємодії електрона з діркою, а також енергії взаємодії електрона та дірки з «чужими» зображеннями на хвильових функціях сферичної ями нескінченної глибини.

Запишемо середню енергію взаємодії електрона з власним зо-

браженням [1]:

$$\bar{V}_{ee',0,0}^{n_e}(S) = S^{-1} \left(Z_{n_e,0} + \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} \right), \quad (5)$$

а також потенціальну енергію

$$\begin{aligned} \bar{U}_{n_e,0,0}(x, S) &= V_{hh'}(x, S) + \bar{V}_{n_e,0,0}(x, S) = \\ &= S^{-1} \left[\frac{1}{1-x^2} + 2Ci(2\pi n_e) - 2Ci(2\pi n_e x) + \frac{\sin(2\pi n_e x)}{\pi n_e x} + 2 \ln x + \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} - 4 \right] \end{aligned} \quad (6)$$

в Гамільтоніані важкої дірки (3) у випадку, коли електрон знаходиться у стані $(n_e, l_e = 0, m_e = 0)$ ($Ci(y)$ — інтегральний косинус). Енергія вимірюється в одиницях $Ry_h = \frac{\hbar^2}{2m_h a_h^2}$ і використовуються безрозмірні величини довжини $X = r_h/a$ і $S = a/a_h$. В формулі (5)

$$Z_{n_e,0} = 2 \int_0^1 dx \sin^2(\pi n_e x) / (1-x^2). \quad (7)$$

Мінімум потенціальної енергії $\bar{U}_{n_e,0,0}(x, S)$ (6) досягається в точці $x = 0$; при цьому

$$\begin{aligned} \bar{U}_{n_e,0}^{\min}(x = 0, S) &= P_{n_e,0} / S, \\ P_{n_e,0} &= 2Ci(2\pi n_e) - 2 \ln(2\pi n_e) - 2\gamma + \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} - 1, \end{aligned} \quad (8)$$

(де $\gamma = 0,577$ — Ойлерова стала). Розвинувши потенціал $\bar{U}_{n_e,0,0}(x, S)$ (6) в ряд за параметром $x^2 \ll 1$ з точністю до перших двох членів, одержимо спектр дірки $\lambda_{n_e,0,0}^{n_h, l_h, m_h}(S)$ осциляторного вигляду [1]:

$$\lambda_{n_e,0,0}^{n_h, l_h, m_h}(S) = \frac{P_{n_e,0}}{S} + \omega(S, n_e) \left(t_h + \frac{3}{2} \right), \quad (9)$$

де частота коливань —

$$\omega(S, n_e) = 2 \left[1 + \frac{2}{3} \pi^2 n_e^2 \right]^{1/2} S^{-3/2}. \quad (10)$$

В формулі (9) $n_e = 1, 2, 3, \dots$ — головне квантове число електрона,

$t_h = 2n_{r_h} + l_h = 0, 1, 2, \dots$ — головне квантове число дірки (причому $n_{r_h} = 0, 1, 2, \dots$ і $l_h = 0, 1, 2, \dots$ — радіальне і орбітальне квантові числа дірки відповідно). Справедливість представлення потенціалу $\bar{U}_{n_e, 0, 0}(x, S)$ (6) у вигляді потенціалу тривимірного гармонічного осцилятора зводиться до умови $(a_{os}/a)^2 \ll 1$ (де $a_{os} = \langle r_h^2 \rangle_{t_h}^{1/2} = (t_h + 3/2)^{1/2} (\hbar^2 / (m_h \omega))^{1/2}$ — амплітуда осцилятора), яка виконується для КТ з радіусами:

$$S^{1/2} \gg (t_h + 3/2) \left(1 + (2/3)\pi^2 n_e^2\right)^{1/2}. \quad (11)$$

Враховуючи формули (2), (5) і (9), одержимо енергетичний спектр екситона $E_{n_e, 0, 0}^{t_h}(S)$ для КТ, радіуси S яких задовольняють умови (1) і (11) [1]:

$$E_{n_e, 0, 0}^{t_h}(S) = E_g + T_{n_e, 0}^e(S) + S^{-1} \left(Z_{n_e, 0} + P_{n_e, 0} + \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} + \omega(S, n_e) \left(t_h + \frac{3}{2} \right) \right), \quad (12)$$

де кінетична енергія електрона в сферичній потенціальній ямі нескінченної глибини КТ —

$$T_{n_e, 0}^e(S) = \left(\frac{m_h}{m_e} \right) \frac{\pi^2 n_e^2}{S^2}. \quad (13)$$

2. ВЗАЄМОДІЯ ЕЛЕКТРОМАГНЕТНОГО ВИПРОМІНЕННЯ З КВАНТОВОВИМІРНИМИ ЕЛЕКТРОННИМИ СТАНАМИ В НАНОСИСТЕМАХ

В інтервалі частот $\omega(S, n_e)$ (9), які відповідають осциляторним квантововимірним станам (t_h) дірки в об'ємі КТ, довжина світлової хвилі (λ) набагато більша розмірів цих станів ($\sim a_{os}$). Тому поведінку таких квантововимірних станів (t_h) дірки в електромагнетному полі можна описати дипольним наближенням [2, 3]. При цьому оператор дипольного моменту для об'ємних осциляторних станів у КТ набуває вигляд [2, 3]

$$D(r) = \Lambda D^0(r), \quad D^0(r) = er, \quad \Lambda = \frac{3\varepsilon_1}{2\varepsilon_1 + \varepsilon_2}, \quad (14)$$

Для оцінки величини дипольного моменту достатньо розглянути перехід між найнижчими квантововимірними станами (t_h) ді-

рки (наприклад, між основним $|t_h = 0\rangle = (n_h = 0, l_h = 0)$ і збудженим $|t_h = 1\rangle = (n_h = 0, l_h = 1)$ станами). Для обчислення матричного елемента дипольного моменту переходу $D_{1,0}(a)$ дірки зі стану $|t_h = 0\rangle$ у стан $|t_h = 1\rangle$ в якості збурення, що викликає такий дипольний перехід, візьмемо індукований полем електромагнетної хвилі $E(\omega, t)$ дипольний момент $D(r)$ (14) (де ω — частота електромагнетної хвилі). Запишемо вираз для дипольного моменту переходу $D_{1,0}(a)$ дірки, одержаного на осциляторних хвильових функціях, у такому вигляді:

$$D_{1,0}(a) \cong (L/4, 14)ea_{os}. \quad (15)$$

Вивчимо поведінку квазинульвимірної наносистеми при поглинанні енергії електромагнетного поля в області частот $\omega(S, n_e = 1)$ (10), що відповідають енергіям $E_{1,1,0}(S) = \frac{5}{2}\hbar\omega(S, n_e = 1)$ і $E_{1,0,0}(S) = \frac{3}{2}\hbar\omega(S, n_e = 1)$ осциляторних квантововимірних станів (t_h) дірки в об'ємі КТ. Переріз поглинання енергії електромагнетного поля на КТ радіусом a можна виразити через її поляризованість $A''(\omega, a)$ [2, 3]:

$$\sigma_{abs}(\omega, a) = 4\pi(\omega/c)A''(\omega, a), \quad (16)$$

де c — швидкість світла у вакуумі; ω — частота зовнішнього електромагнетного поля.

Поляризованість $A''(\omega, a)$ КТ може бути знайдена, якщо розглядати сферичну КТ як гігантський атом [2, 3]. У цьому випадку поляризованість КТ $A''(\omega, a)$ можна виразити через матричний елемент дипольного моменту переходу $D_{1,0}(a)$ (15) між осциляторними квантововимірними станами (t_h) дірки в об'ємі КТ:

$$A''(\omega, a) = \frac{e^2}{m_2^*} \sum_{\gamma} \frac{f_{0\gamma}(a)}{\omega_{\gamma}^2(a) - \omega^2 - i\omega\Gamma_{\gamma}(a)} \quad (17)$$

($n_h = 1, l_h = 2, m_h = 0$), де

$$f_{0\gamma}(a) = \frac{2m_2^*}{\hbar^2 e^2} [E_{1,\gamma}(a) - E_{1,0}(a)] |D_{\gamma 0}(a)|^2 \quad (18)$$

— сила осцилятора переходу дірки з ефективною масою $m_2^* = m_h$ з основного стану $|t_h = 0\rangle$ з енергією $E_{1,0,0}(a) = (3/2)\hbar\omega(a, n_e = 1)$ в

1γ -стан з енергією $E_{1\gamma}(a) = \hbar\omega_\gamma(a)$, яку можна виразити через матричний елемент дипольного моменту переходу $D_{\gamma 0}(a)$ дірки з основного стану $|t_h = 0\rangle$ в 1γ -стан; $\Gamma_\gamma(a)$ — ширина збудженого 1γ -рівня. Виділяючи в $A''(\omega, a)$ (16) внесок одного такого резонансного стану, поляризованості КТ надамо вигляду

$$A''(\omega, a) = f_{01}(a)F(\omega_1, \omega), \quad (19)$$

де функція

$$F(\omega_1, \omega) = \frac{e^2}{m_2^*} \frac{1}{\omega_1^2(a) - \omega^2 - i\omega\Gamma_1(a)} \quad (20)$$

має звичайний резонансний вигляд і поблизу резонансу не залежить від радіуса a КТ. Тут виділено резонансний член, що відповідає переходу між основним $|t_h = 0\rangle$ і збудженим $|t_h = 1\rangle$ квантовимірними станами дірки, для яких $f_{01}(a)$ описується формулами (18) і (15). Для об'ємних осциляторних станів в КТ переріз поглинання $\sigma_{abs}(\omega, a)$ визначається так [2, 3]:

$$\sigma_{abs}(\omega, a) \propto \omega F(\omega_1, \omega) a^{3/2}. \quad (21)$$

Розглянемо пружне розсіяння електромагнетної хвилі частоти ω на КТ з радіусом a , переріз якого [2, 3]

$$\sigma_{sc}(\omega, a) = 2^7 3^{-3} \pi^3 (\omega/c)^4 |A''(\omega, a)|^2. \quad (22)$$

Для об'ємних осциляторних станів в КТ переріз розсіювання $\sigma_{sc}(\omega, S)$ (18) має залежність від ω і S виду [2, 3]:

$$\sigma_{sc}(\omega, S) \propto (\omega/c)^4 F^2(\omega_1, \omega) \left(m_2^* a_{os}^2 \frac{\omega_1}{\hbar} \right)^2 S^3. \quad (23)$$

3. СИЛЬНО ПОГЛИНАЛЬНІ НАНОГЕТЕРОСТРУКТУРИ

Розглянемо наноструктуру, яка являє собою шар товщиною $d = 2$ нм з поверхневою густиною у 2–3 кг/м², нанесений на алюмінієву поверхню. Шар складається з КТ CdS (з ДП $\varepsilon_2 = 9$, ефективними масами електрона $m_e/m_0 = 0,205$ і дірки $m_h/m_0 = 5$), втілених у діелектричних матрицях (наприклад, SiO₂ або полімер з ДП $\varepsilon_1 = 2$).

В наносистемі рух важкої дірки ($m_h/m_e \cong 24,4$) в електронному потенціалі (6) в КТ CdS з середнім радіусом $\bar{S} = \bar{a} / a_h$ (де

$a_h = 0,098$ нм — Борів радіус дірки в КТ CdS) приводить до появи в енергетичному спектрі дірки еквідистантної серії рівнів, відстань між якими описується формулою (10). Відстань між сусідніми еквідистантними рівнями дірки (згідно з (10)) залежить як від значення головного квантового числа електрона n_e , так і від радіуса a КТ. Із збільшенням n_e відстань між еквідистантною серією ліній $\omega(S, n_e)$ (10) росте ($\omega \propto n_e$), а зі збільшенням радіуса S КТ така відстань зменшується ($\omega \propto S^{-3/2}$). При цьому, змінюючи середній радіус a КТ, можна направлено варіювати частотами осциляторних коливань дірки $\omega(S, n_e)$ (10), що лежать у спектральній області від радіо- до інфрачервоного діапазону [2, 3].

На наногетероструктуру падає електромагнетна хвиля з довжиною $\lambda = 3-7,5$ см, якій відповідає квант енергії, що лежить у радіочастотному діапазоні:

$$\hbar\omega = (1,7-4,14) \cdot 10^{-5} \text{ еВ.} \quad (24)$$

Квант (24) поглинається в результаті переходів електрона між рівнями, що належать еквідистантній серії енергетичних рівнів дірки $(t_h = 0) = (n_{r_h} = 0, l_h = m_h = 0)$, $(t_h = 1) = (n_{r_h} = 0, l_h = 1, m_h = 0)$, $(t_h = 2) = (n_{r_h} = 1, l_h = m_h = 0)$, $(t_h = 3) = (n_{r_h} = 0, l_h = m_h = 0)$ та $(t_h = 4) = (n_{r_h} = 2, l_h = 0, m_h = 0)$ (або $(t_h = 4) = (n_{r_h} = 1, l_h = 2, m_h = 0)$), що знаходяться в валентній зоні КТ CdS.

У таблиці наведено оцінки сил осциляторів переходів $f_{0,1}(a)$, дипольних моментів переходів $D_{1,0}(a)$, поляризованостей $A''(a)$, перерізів поглинання $\sigma_{abs}(\omega, a)$ електромагнетної хвилі з частотою ω і з енергією кванта $\hbar\omega$ (24) (частота хвилі ω лежить у радіочастотній області) на квантововимірних об'ємних станах дірки в КТ. Якщо врахувати (див. таблицю), що сили осциляторів переходів $f_{0,1}(a) \approx 0,4$, а разом з ними і дипольні моменти переходів $D_{0,1} \approx 10$ Д (де Д = e·Å — дебай) у КТ радіусами a (в інтервалі від 374 до 670 нм) набувають гігантських значень (у багато разів перевищуючи типові значення дипольних моментів переходів для напівпровідникових A_3B_5 і діелектричних матеріалів, у яких вони

ТАБЛИЦЯ.¹

Матриця		КТ CdS			$(E_{1,1} - E_{1,0})$, меВ	$f_{01}, 10^{-1}$	$D_{1,0}, \text{Д}$	$A'', 10^{24} \text{ см}^3$	$\sigma_{abs} 10^{-24} \text{ см}^2$
ε_1	a , нм	ε_2	m_h/m_0						
2	40	9	5	0,54	3,81	4,1	$4,8 \cdot 10^3$	$1,6 \cdot 10^4$	

$\sim 10^{-1}$ Д [2, 3]), а дипольні переходи в електромагнетному полі між найближчими квантоворозмірними рівнями $E_{1,0}(a)$ і $E_{1,1}(a)$ в КТ дозволені правилами відбору зі зміною орбітального квантового числа l на одиницю [2, 3], то очевидно, що розглянуті квазиульвимірні наносистеми є сильно поглинальними середовищами для електромагнетного випромінення в широкій області спектру (від видимої до радіочастот).

З оцінок, наведених у таблиці, випливає, що величина перерізу поглинання (16) електромагнетної хвилі в КТ CdS радіусами a (в інтервалі від 374 до 670 нм) досягає гігантських значень: $s_{abs}(\omega, a) \approx 10^{-20} \text{ см}^2$. При цьому вона на чотири порядки перевищує типові значення атомних перерізів поглинання [2, 3]. Оскільки значення перерізів розсіяння $\sigma_{sc}(\omega, a)$ (23) у порівнянні з відповідними значеннями перерізів поглинання $\sigma_{abs}(\omega, a)$ (16) у наноструктурі дуже малі ($\sigma_{sc}/\sigma_{abs} = 10^{-1}$), то значення $\sigma_{sc}(\omega, a)$ не внесено в таблицю.

Таким чином, в результаті електромагнетна хвиля з довжиною $\lambda = 3-7,5$ см, розсіяна на КТ з радіусами a (в інтервалі від 374 до 670 нм), має переріз розсіяння $\sigma_{sc}(\omega, S)$ (23) істотно менший (на шість порядків), ніж переріз поглинання $\sigma_{abs}(\omega, a)$ (16). Тому можна вважати, що електромагнетна хвиля з довжиною $\lambda = 3-7,5$ см практично повністю поглинається такою наногетероструктурою.

Коефіцієнт поглинання електромагнетної хвилі наногетероструктурою визначається формулою

$$K(\omega, a) = N\sigma_{abs}(\omega, a), \quad (25)$$

де N — концентрація КТ, яка пропорційна a^{-3} . В діапазоні радіусів a (від 374 до 670 нм) концентрація КТ становить (за порядком величини) $N = 10^{11} \text{ см}^{-3}$, а коефіцієнт поглинання K (25) набуває істотне значення порядку $10^{-1}-1 \text{ см}^{-1}$.

Таким чином, гігантські значення перерізів поглинання електромагнетного випромінення в досліджуваних наносистемах дають можливість використовувати такі наногетероструктури в якості нових сильно поглинальних наноматеріалів в широкій області довжин хвиль (від видимої до радіочастот), яка може широко варіюватися залежно від природи матеріалів, що контактують.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА—REFERENCES

1. S. I. Pokutnyi, *Physics Letters A*, **168**, No. 5: 433 (1992).
2. S. I. Pokutnyi, *Phys. Solid State*, **39**, No. 4: 528 (1997).
3. S. I. Pokutnyi, *Phys. Solid State*, **39**, No. 4: 634 (1997).

*O. O. Chuiko Institute of Surface Chemistry, NAS of Ukraine,
17, General Naumov Str.,
03164 Kyiv, Ukraine*

¹ **TABLE.** The parameters of the bound states of holes localized in the CdS QDs with a dielectric constant $\varepsilon_2 = 9$ in a dielectric medium with $\varepsilon_1 = 2$; a —the radius of QD, (m_h/m_0) —hole effective mass in the CdS QD; $(E_{1,1} - E_{1,0})$ —the difference between the energies of holes localized in the $(t_h = 0)$ and $(t_h = 1)$ states; f_{01} —oscillator strength of transition; $D_{1,0}$ —transition dipole moments (in units of Debye ($D = e \cdot \text{\AA}$)); A'' —polarizability of QD; σ_{abs} —absorption cross-section of QD.