

УДК 621.315.5.001:53

## Квантовохимический анализ системы, состоящей из двух квантовых точек CdS

С. И. Покутний

Институт химии поверхности им. А. А. Чуйко НАН Украины  
ул. Генерала Наумова, 17, Киев 03164, Украина. E-mail: pokutnyi\_servey@inbox.ru

*На основании полученных вариационным методом зависимостей полной энергии и энергии связи основного синглетного состояния квазимолекулы, состоящей из двух квантовых точек (КТ) CdS, от расстояния между КТ, а также радиуса КТ показано увеличение энергии связи в такой квазимолекуле, значение которой почти на два порядка больше в сравнении с энергией связи двух экситонов в монокристалле CdS.*

**Ключевые слова:** экситонная квазимолекула, квантовые точки, энергии связи.

Для развития нанofизики и нанохимии плодотворной является идея суператома [1]. Суператом (квазиатомная наногетероструктура) состоит из ядра (сферической квантовой точки (КТ)) радиуса  $a$ , в объеме которого содержится полупроводниковый (или диэлектрический) материал; ядро окружено диэлектрической (полупроводниковой) матрицей [2]. В объеме КТ находится дырка, а электрон локализован над сферической поверхностью раздела КТ — матрица. В такой наносистеме самый нижний электронный уровень расположен в матрице, а самый нижний дырочный уровень находится в объеме КТ. Большой сдвиг валентной зоны (порядка 700 мэВ) вызывает локализацию дырок в объеме КТ. Значительный сдвиг зоны проводимости (порядка 400 мэВ) является потенциальным барьером для электронов (электроны движутся в матрице и не проникают в объем КТ) [2]. Энергия кулоновского взаимодействия электрона с дыркой, а также энергия поляризационного взаимодействия электрона с поверхностью раздела (КТ-матрица) образуют потенциальную яму, в которой локализуется электрон над поверхностью КТ [2]. Электронам в суператоме соответствуют определенные орбитали, локализованные в окрестности ядра (КТ).

При исследовании оптических свойств наносистем с КТ CdS, ZnSe, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> в экспериментальных работах [3—6] обнаружено, что электрон может локализоваться над поверхностью КТ, а дырка при этом движется в объеме КТ. В работах [3—6], по-видимому, впервые экспериментально установлено возникновение помещенных в диэлектрические матрицы суператомов в качестве ядер, содержащих КТ CdS,

ZnSe и Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. В работе [7] обнаружен эффект существенного увеличения энергии связи основного состояния электрона в суператоме по сравнению с энергией связи экситона в монокристаллах CdS, ZnSe, Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. В работах [3, 4] исследовали оптические свойства образцов боросиликатных стекол, легированных CdS с концентрациями от  $x \approx 0,003$  до 1 %. Средние радиусы  $\bar{a}$  КТ CdS находились в диапазоне  $\bar{a} \approx 2,0$ —20 нм. При больших концентрациях КТ CdS (от  $x \approx 0,6$  % до  $x \approx 1$  %) в образцах в низкотемпературных спектрах поглощения обнаружен максимум, который интерпретировали возникновением связанных состояний КТ. Для пояснения оптических свойств таких наносистем нами была предложена модель квазимолекулы, представляющая собой две КТ, которые в результате взаимодействия электронов и дырок образуют экситонную квазимолекулу [8]. В работах [3, 4] предполагалось, что в результате взаимодействий электронов и дырок КТ связывались между собой и образовывали кластеры КТ. Проводимость наносистемы пояснялась протеканием электронов по таким кластерам КТ [3, 4]. Нами в настоящей работе, представляющей собой первую попытку исследования нового класса квазиатомных наносистем, изучается возможность возникновения экситонной квазимолекулы, состоящей из двух КТ CdS. В дальнейшем на основе такой модели экситонной квазимолекулы будет построена теория «молекулярного» квазикристалла.

Сближение двух (и более) КТ вплоть до некоторого критического значения  $D_c$  между поверхностями КТ приведет к перекрытию электронных орби-

талей суператомов (при этом интеграл перекрытия электронных волновых функций принимает существенное значение) и возникновению обменных взаимодействий [2, 8]. В результате могут создаваться условия для возникновения из КТ новых квантовых наносистем — квазимолекул [2, 8]. Можно предположить также, что указанные выше условия образования квазимолекул могут быть обеспечены воздействием внешних физических полей. В пользу этого предположения свидетельствуют результаты работ [9, 10], в которых возникновение эффективного взаимодействия между КТ на значительных расстояниях в условиях воздействия электромагнитного поля наблюдалось экспериментально. В работе [11] определены энергии основного состояния «вертикально» и «горизонтально» расположенной пары взаимодействующих КТ («молекулы» из двух КТ). Проанализирована эволюция спектра наносистемы с ростом крутизны удерживающего потенциала и напряженности магнитного поля, а также расстояния между центрами КТ от «молекулы» из двух КТ к двум отдельным КТ. Квантовую часть наноконピューтера составляют  $n$  кубитов, которые реализовывались на паре КТ («молекулы» из двух КТ) с зарядовыми состояниями [12]. Первый бесперебойно работающий квантовый компьютер был на КТ с двумя электронными орбитальными состояниями в качестве кубитов, описываемых с помощью псевдоспина (1/2). В качестве отдельной ячейки брали несимметричную пару КТ разного размера с существенно отличающимися собственными энергиями. Эти пары КТ расположены в туннельных структурах с несимметричными барьерами в области между каналом и затвором гетероструктуры. Между собой КТ разделялись достаточно прозрачным потенциальным барьером, благодаря чему осуществлялась определенная связь между КТ. Инжектируемый в структуру со стороны канала электрон занимал нижележащий уровень, т. е. он оказывался локализованным в КТ большего размера.

В настоящей работе вариационным методом получены зависимости полной энергии, а также энергии связи основного синглетного состояния квазимолекулы, состоящей из двух КТ CdS, как функции расстояния между поверхностями КТ, а также радиуса КТ. Обнаружен эффект существенного увеличения энергии связи основного синглетного состояния экситонной квазимолекулы (почти на два порядка) по сравнению с энергией связи биэкситона в монокристалле CdS. Показано, что наблюдаемый в спектрах поглощения наносистемы максимум обусловлен возникновением экситонной квазимолекулы.

Рассмотрим модель наносистемы, содержащей два суператома. В такой модели суператомы состоят из сферических КТ(A) и КТ(B) сульфида кадмия (с

диэлектрической проницаемостью (ДП)  $\varepsilon_2$ ) с радиусами  $a$ , выращенных в матрице боросиликатного стекла с ДП  $\varepsilon_1$  ( $D$  — расстояние между поверхностями КТ) [10]. Для простоты будем считать, что дырки  $h(A)$  и  $h(B)$  с эффективными массами  $m_h$  расположены в центрах КТ(A) и КТ(B), а электроны  $e(1)$  и  $e(2)$  с эффективными массами  $m_e^{(1)}$  локализованы вблизи сферических поверхностей КТ(A) и КТ(B) соответственно. Такое предположение является оправданным, поскольку отношение эффективных масс электрона и дырки в наносистеме  $m_e^{(1)}/m_h \ll 1$ . Предположим, что на сферической поверхности раздела КТ — матрица существует бесконечно высокий потенциальный барьер. Поэтому в наносистеме дырки не выходят из объема КТ, а электроны не проникают в КТ. В такой модели наносистемы изучим возможность возникновения экситонной квазимолекулы из пространственно разделенных электронов и дырок (дырки расположены в центрах КТ(A) и КТ(B), а электроны локализованы вблизи сферических поверхностей КТ(A) и КТ(B)). В рамках адиабатического приближения, а также в приближении эффективной массы гамильтониан такой квазимолекулы запишем в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_{A(1)} + \hat{H}_{B(2)} + \hat{H}_{\text{int}}. \quad (1)$$

Здесь  $\hat{H}_{A(1)}$  и  $\hat{H}_{B(2)}$  являются гамильтонианами суператомов (дырка  $h(A)$  находится в центре КТ(A), а электрон  $e(1)$  локализован над поверхностью КТ(A); дырка  $h(B)$  расположена в центре КТ(B), а электрон  $e(2)$  локализован над поверхностью КТ(B) соответственно). Вкладом энергии поляризационного взаимодействия электронов и дырок с поверхностью КТ в гамильтонианы суператомов  $\hat{H}_{A(1)}$  и  $\hat{H}_{B(2)}$  в первом приближении можно пренебречь [7]. Поэтому гамильтониан сверхатома  $\hat{H}_{A(1)}$  принимает такой вид [7]:

$$\hat{H}_{A(1)} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_{(1)} + V_{e(1)h(A)}(r_{A(1)}, r_{h(A)}) + E_g, \quad (2)$$

$$V_{e(1)h(A)} = -\frac{1}{2} \left( \frac{1}{\varepsilon_1} + \frac{1}{\varepsilon_2} \right) \frac{e^2}{r_{A(1)}},$$

где первый член является оператором кинетической энергии электрона и дырки ( $\mu = m_e^{(1)} m_h / (m_e^{(1)} + m_h)$ ) — приведенная масса электрона и дырки);  $V_{e(1)h(A)}$  — энергия кулоновского взаимодействия между электроном  $e(1)$  и дыркой  $h(A)$ ;  $r_{A(1)}$  — расстояние электрона  $e(1)$  от центра КТ(A);  $E_g$  — ширина запрещенной

Таблица 1

Зависимость энергии связи  $E_b(D, \bar{a}_1)$ , а также полной энергии  $E_0(D, \bar{a}_1)$  основного синглетного состояния экситонной квазимолекулы, состоящей из двух КТ CdS со средними радиусами  $\bar{a}_1 = 4$  нм, от расстояния  $D$  между поверхностями КТ ( $E_{\text{ex}}(\bar{a}_1) = -320$  мэВ)

$D$ , нм	$E_b(\bar{D}_1, \bar{a}_1)$ , мэВ	$E_0(\bar{D}_1, \bar{a}_1)$ , мэВ
1,8	0	-640
2,2	-27	-667
2,6	-28,1	-668,1
3	-27,8	-667,8
4	-23,2	-663,2
6	-9,5	-649,5
8,4	0	-640

Таблица 2

Зависимость энергии связи  $E_b(D, \bar{a}_2)$ , а также полной энергии  $E_0(D, \bar{a}_2)$  основного синглетного состояния экситонной квазимолекулы, состоящей из двух КТ CdS со средними радиусами  $\bar{a}_2 = 4,4$  нм, от расстояния  $D$  между поверхностями КТ ( $E_{\text{ex}}(\bar{a}_2) = -344$  мэВ)

$D$ , нм	$E_b(D, \bar{a}_2)$ , мэВ	$E_0(D, \bar{a}_2)$ , мэВ
1,6	0	-688
2,2	-29,4	-717,4
2,48	-32,8	-720,8
2,6	-31,9	-719,9
3	-28,9	-716,9
4	-24,4	-712,4
6	-13,2	-701,2
8	-3,4	-691,4
9,8	0	-688

зоны в объемном CdS. Гамильтониан  $\hat{H}_{B(2)}$  имеет вид, аналогичный гамильтониану  $\hat{H}_{A(1)}$  (уравнение (2)). В первом приближении можно пренебречь вкладами энергий взаимодействия электронов  $e(1)$  и  $e(2)$ , а также дырок  $h(A)$  и  $h(B)$  с полями поляризации, наведенными этими носителями заряда на поверхностях КТ(A) и КТ(B), в гамильтониан  $\hat{H}_{\text{int}}$ . Поэтому в гамильтониан  $\hat{H}_{\text{int}}$  входят только энергии кулоновского взаимодействия электрона  $e(1)$  с дыркой  $h(B)$ , электрона  $e(2)$  с дыркой  $h(A)$ , между электронами  $e(1)$  и  $e(2)$ , а также между дырками  $h(A)$  и  $h(B)$ .

В предположении, что спины электронов  $e(1)$  и  $e(2)$  антипараллельны, запишем нормированную волновую функцию основного синглетного состояния

экситонной квазимолекулы в виде симметричной линейной комбинации волновых функций  $\Psi_1(r_{A(1)}, r_{B(2)})$  и  $\Psi_2(r_{A(2)}, r_{B(1)})$  [8]:

$$\Psi_s(r_{A(1)}, r_{A(2)}, r_{B(1)}, r_{B(2)}) = [2(1 + S^2(D, a))]^{-1/2} \times [\Psi_1(r_{A(1)}, r_{B(2)}) + \Psi_2(r_{A(2)}, r_{B(1)})], \quad (3)$$

где  $S(D, a)$  — интеграл перекрытия одноэлектронных волновых функций. Считая, что электроны  $e(1)$  и  $e(2)$  движутся независимо друг от друга, волновые функции  $\Psi_1(r_{A(1)}, r_{B(2)})$  и  $\Psi_2(r_{A(2)}, r_{B(1)})$  (уравнение (3)) представим как произведение одноэлектронных вариационных волновых функций  $\varphi_{A(1)}(r_{A(1)})$  и  $\varphi_{B(2)}(r_{B(2)})$ , а также  $\varphi_{A(2)}(r_{A(2)})$  и  $\varphi_{B(1)}(r_{B(1)})$  соответственно [8].

В случае, в котором спины электронов  $e(1)$  и  $e(2)$  параллельны, по аналогии с теорией химической связи молекулы водорода [13], экситонная квазимолекула, состоящая из двух КТ, не образуется. Поэтому такой случай нами не рассмотрен.

В рамках вариационного метода полная энергия основного синглетного состояния экситонной квазимолекулы в первом приближении определяется средним значением гамильтониана  $\hat{H}$  (уравнение (1)) на состояниях, которые описываются волновыми функциями нулевого приближения  $\Psi_s$  (уравнение (3)):

$$E_0(\bar{D}, \bar{a}) = 2E_{\text{ex}}(\bar{a}) + E_b(\bar{D}, \bar{a}), \quad (4)$$

где  $E_b(\bar{D}, \bar{a})$  — энергия связи основного синглетного состояния экситонной квазимолекулы;  $E_{\text{ex}}(\bar{a})$  — энергия связи основного состояния электрона в суператоме [7];  $\bar{a} = a/a_{\text{ex}}^0$ , где  $a_{\text{ex}}^0 = 2,5$  нм — борковский радиус экситона в монокристалле CdS;  $\bar{D} = D/a_{\text{ex}}^0$ .

Результаты вариационного расчета энергии связи  $E_b(\bar{D}, \bar{a})$  основного синглетного состояния экситонной квазимолекулы, содержащей две КТ CdS со средними радиусами  $\bar{a}_1 = 4$  нм и  $\bar{a}_2 = 4,4$  нм (ДП  $\epsilon_2 = 9,3$ , эффективная масса дырки в КТ  $m_h/m_0 = 5$ ), выращенные в матрице боросиликатного стекла (ДП  $\epsilon_1 = 2$ , эффективная масса электрона в матрице  $m_e^{(1)}/m_0 = 0,537$  [7]), которая исследовалась в экспериментальных работах [3, 4], показаны в табл. 1 и 2. В работах [3, 4] исследовали оптические свойства образцов боросиликатных стекол, легированных CdS с концентрациями от  $x \approx 0,003$  % до  $x \approx 1$  %. Средние радиусы  $\bar{a}$  КТ CdS находились в диапазоне  $\bar{a} \approx 2,0$ —20 нм. При концентрациях КТ CdS от  $x \approx 0,6$  % до  $x \approx 1$  % в спектрах поглощения образцов (при низкой температуре (4 К)) обнаружен максимум,

который составлял  $E - E_g \approx -712$  мэВ (где  $E_g$  — ширина запрещенной зоны в КТ CdS). Используемый нами вариационный метод расчета энергии связи  $E_b(\bar{D}, \bar{a})$  основного синглетного состояния экситонной квазимолекулы будет справедливым, если энергия связи  $E_b(\bar{D}, \bar{a})$  квазимолекулы мала по сравнению с энергией связи  $E_{\text{ex}}(\bar{a})$  основного состояния суператома [8]:

$$E_b(\bar{D}, \bar{a})/E_{\text{ex}}(\bar{a}) \ll 1. \quad (5)$$

Энергии связи  $E_b(\bar{D}, \bar{a})$  основного синглетного состояния экситонной квазимолекулы, содержащей две КТ CdS со средними радиусами  $\bar{a}_1 = 4$  нм и  $\bar{a}_2 = 4,4$  нм, имеют минимальные значения  $E_b^{(1)}(D_1, \bar{a}_1) \approx -28,1$  мэВ (при расстоянии  $D_1 \cong 2,6$  нм) и  $E_b^{(2)}(D_2, \bar{a}_2) \approx -32,8$  мэВ (при расстоянии  $D_2 \cong 2,48$  нм) ( $E_b^{(1)}$  и  $E_b^{(2)}$  соответствуют критическим температурам  $T_{c(1)} \approx 326$  К и  $T_{c(2)} \approx 380$  К) (см. табл. 1 и 2). Значения энергий связи основного состояния электрона в суператомах составляют  $E_{\text{ex}}(\bar{a}_1) \cong -320$  мэВ и  $E_{\text{ex}}(\bar{a}_2) \cong -344$  мэВ [8]. Энергии основного синглетного состояния (уравнение (4)) экситонной квазимолекулы при этом принимают значения  $E_0(\bar{D}_1, \bar{a}_1) \approx -668,1$  мэВ и  $E_0(\bar{D}_2, \bar{a}_2) \approx -720,8$  мэВ (см. табл. 1 и 2). Из сравнения полной энергии  $E_0(D, \bar{a}_2)$  квазимолекулы с максимумом  $E - E_g \approx -712$  мэВ получим значение расстояния  $D_3 \approx 4,0$  нм между КТ. Критерий (уравнение (5)) применимости использованного вариационного расчета энергии связи  $E_b(\bar{D}, \bar{a})$  квазимолекулы при этом выполняется (отношения  $E_b^{(1)}(D_1, \bar{a}_1)/E_{\text{ex}}(\bar{a}_1)$ ,  $E_b^{(2)}(D_2, \bar{a}_2)/E_{\text{ex}}(\bar{a}_2) \cong 0,09$ ).

С ростом радиуса  $a$  КТ энергия связи  $E_{\text{ex}}(a)$  основного состояния электрона в суператоме увеличивается [7]. Средний размер состояния электрона в суператоме при этом уменьшается. Следовательно, расстояние, на котором квадрат интеграла перекрытия  $S(D, a)$  одноэлектронных волновых функций принимает максимальное значение, также уменьшается с ростом радиуса  $a$  КТ (а значит, расстояние между поверхностями КТ  $D_2$  меньше  $D_1$ ). В результате с ростом радиуса  $a$  КТ также увеличивается максимальное значение  $|E_b(\bar{D}, \bar{a})|$  энергии связи основного синглетного состояния экситонной квазимолекулы (т. е.  $|E_b^{(2)}|$  больше  $|E_b^{(1)}|$ ).

Таким образом, предложенная нами модель экситонной квазимолекулы позволила пояснить оптические свойства наносистемы, состоящей из КТ CdS, выращенных в матрице боросиликатного стекла [3, 4], в частности возникновение в спектрах погло-

щения образцов (при низкой температуре (4 К)) максимума  $E - E_g \approx -712$  мэВ.

Следует отметить, что энергия связи  $E_{\text{ex}}(\bar{a})$  основного состояния электрона в суператоме применима только для тех значений, для которых выполняется неравенство  $E_{\text{ex}}(\bar{a}) - E_g \ll \Delta V$ , где  $\Delta V$  — глубина потенциальной ямы для носителей заряда в КТ (для КТ CdS в области радиусов  $a \leq 20$  нм  $\Delta V = 2,5$  эВ [3]). Выполнение этого условия дает возможность рассматривать движение электрона и дырки в суператоме, используя модель КТ в виде бесконечно глубокой потенциальной ямы [7]. В гамильтониане (уравнение (1)) квазимолекулы не были учтены члены, вызывающие колебания КТ в квазимолекуле. Полученные нами энергии связи квазимолекулы (см. табл. 1 и 2) существенно превосходят характерные энергии колебаний КТ. Поэтому учет колебаний КТ в настоящей модели квазимолекулы является оправданным.

Из табл. 1 и 2 следует, что экситонная квазимолекула, состоящая из двух КТ, возникает, начиная с расстояний между поверхностями КТ  $D \geq D_c^{(1)} \cong 1,8$  нм (для КТ с радиусом  $\bar{a}_1 = 4$  нм) и  $D \geq D_c^{(1)} \cong 1,6$  нм (для КТ с радиусом  $\bar{a}_2 = 4,4$  нм). Образование такой квазимолекулы носит пороговый характер и возможно лишь в наносистеме, содержащей КТ со средними радиусами  $\bar{a}_1$  и  $\bar{a}_2$ , в которой расстояние  $D$  между поверхностями КТ превышает значение некоторого критического расстояния  $D_c^{(1)}$ . Существование такого критического расстояния связано с размерными квантовыми эффектами, при которых с уменьшением расстояния  $D$  между поверхностями КТ уменьшение энергий взаимодействия электронов и дырок, входящих в гамильтониан (уравнение (1)) квазимолекулы, не может компенсировать увеличение кинетической энергии электронов и дырок. С увеличением расстояния  $D$  между поверхностями КТ, начиная со значений  $D \geq D_c^{(2)} \cong 8,4$  нм (для КТ с радиусом  $\bar{a}_1 = 4$  нм) и  $D \geq D_c^{(2)} \cong 9,8$  нм (для КТ с радиусом  $\bar{a}_2 = 4,4$  нм), экситонная квазимолекула распадается на два суператома. Таким образом, экситонная квазимолекула в наносистеме может возникнуть при выполнении условия  $D_c^{(1)} \leq D \leq D_c^{(2)}$  (см. табл. 1 и 2). Кроме того, квазимолекула может существовать только при температурах, ниже некоторых критических температур  $T_{c(1)} \approx 326$  К и  $T_{c(2)} \approx 380$  К. Биэкситон возникает в монокристалле CdS с энергией связи  $E_b = 0,59$  мэВ [14]. Энергии связи  $E_b^{(1)}$  и  $E_b^{(2)}$  экситонной квазимолекулы имеют anomalно высокие значения, превышающие  $E_b$  почти на два порядка. Последнее обстоятельство открывает, по-ви-

димому, возможность наблюдения таких экситонных квазимолекул при комнатных температурах.

В энергию связи экситонной квазимолекулы основной вклад вносит энергия обменного взаимодействия электронов с дырками, который существенно больше вклада от энергии кулоновского взаимодействия электронов с дырками (т. е. отношение  $\leq 0,11$ ). Выполненные расчеты энергии связи  $|E_b(\bar{D}, \bar{a})|$  основного синглетного состояния квазимолекулы являются вариационными, поэтому могут давать заниженные значения энергии связи  $|E_b(\bar{D}, \bar{a})|$  и  $|E_b^{(1)}|$ .

Энергия связи экситонной квазимолекулы, состоящей из двух КТ CdS, принимает аномально высокое значение, превышающее энергию связи  $E_b$  биэкситона в CdS почти на два порядка. Такой эффект открывает возможность использовать экситонные квазимолекулы в качестве активной среды нанолазеров, излучающих в инфракрасном диапазоне спектра и работающих на экситонных переходах при комнатных температурах, элементной базы квантовых нанокomпьютеров [12]. Приведенные результаты свидетельствуют о принципиальной возможности создания новых квазиатомных наносистем — экситонных квазимолекул, в том числе аналогов природных, с новыми физическими и химическими свойствами. На их основе возможно построение новых квантовых наносистем — квазикристаллов, управление симметрией и периодом решетки которых позволит реализовать уникальные физические и хи-

мические эффекты и явления, создать новые принципы в материаловедении.

### Литература

1. Ashoori R. C. // Nature. — 1996. — **379**. — P. 413—419.
2. Pokutnyi S. I., Gorbyk P. P. // J. Appl. Chem. — 2014. — **2**, N 4. — P. 48—52.
3. Grabovskis V., Dzenis Ya., Ekimov A. // Solid State Phys. — 1989. — **31**. — P. 272—275.
4. Ekimov A., Hache F., Schanne-Klein M. // J. Opt. Soc. Amer. B. — 2013. — **30**. — P. 100—108.
5. Ovchinnikov O. V., Smirnov M. S. et al. // J. Nanopart. Res. — 2014. — **16**. — P. 2286—2292.
6. Kulchin Yu. N., Dzyuba V. P. et al. // Adv. Mater. Res. A. — 2013. — **677**. — P. 42—45.
7. Pokutnyi S. I. // Semiconductors. — 2013. — **47**. — P. 791—798.
8. Pokutnyi S. I. // Ibid. — P. 1626—1635.
9. Lalumiere K., Sanders B., Van Loo F. et al. // Phys. Rev. A. — 2013. — **88**. — P. 43806—43811.
10. Van Loo F., Fedorov A., Lalumiere K. et al. // Science. — 2013. — **342**. — P. 1494—1496.
11. Blanter Y. M., Kaputkina N. E., Lozovik Y. E. // Phys. Scripta. — 2006. — **54**. — P. 539—541.
12. Valiev K. A. // Adv. Phys. Sci. — 2005. — **1**. — P. 1—36.
13. Davydov A. S. Quantum mechanics. — New York : Pergamon press, 1975.
14. Moskalenko S. A., Khadzhy P. I. et al. // Solid State Phys. — 1963. — **5**. — P. 824—829.

Поступила в редакцию 21 сентября 2015 г.  
В окончательном варианте 23 ноября 2015 г.

## Квантовохімічний аналіз системи, що складається з двох квантових точок CdS

С. І. Покутний

Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка НАН України  
вул. Генерала Наумова, 17, Київ 03164, Україна. E-mail: pokutnyi\_servey@inbox.ru

*На підставі одержаних варіаційним методом залежностей повної енергії та енергії зв'язку основного синглетного стану квазимолекули, що складається з двох квантових точок (КТ) CdS, від відстані між КТ, а також радіуса КТ показано збільшення енергії зв'язку в такій квазимолекулі, значення якої майже на два порядки більше у порівнянні з енергією зв'язку двох екситонів у монокристалі CdS.*

**Ключові слова:** екситонна квазимолекула, квантові точки, енергія зв'язку.

## Quantum-Chemical Analysis of System Consisting of Two CdS Quantum Dots

S. I. Pokutnyi

O. O. Chuiko Institute of Surface Chemistry, National Academy of Sciences of Ukraine  
Vul. Generala Naumova, 17, Kyiv 03164, Ukraine. E-mail: pokutnyi\_servey@inbox.ru

*The relationships of the total energy and the binding energy of the singlet ground state of quasi-molecule, consisting of two quantum dots (QD) of CdS, from the distance between the QD and the QD radius was obtained by variational method. It was shown an increase in binding energy of a quasi-molecule that almost two orders of magnitude greater in comparison with the binding energy of two excitons in a single crystal of CdS.*

**Key words:** excitonic quasi-molecule, quantum dots, binding energy.