НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ
сентябрь–октябрь 2026 Том 26 № 5 http://ntv.ifmo.ru/
SCIENTIFIC AND TECHNICAL JOURNAL OF INFORMATION TECHNOLOGIES, MECHANICS AND OPTICS
September–October 2026 Vol. 26 No 5 http://ntv.ifmo.ru/en/
ISSN 2226-1494 (print) ISSN 2500-0373 (online)

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ВЕСТНИК
ИНФОРМАЦИОННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ, МЕХАНИКИ И ОПТИКИ

doi: 10.17586/2226-1494-2026-26-5-926-934
УДК 538.958

Моделирование электронных состояний и угловой анизотропии поглощения нанокристаллов теллурида кадмия с различным соотношением геометрических размеров

Даниил Саюзович Дайбаге✉

Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, 119991, Российская Федерация
daibagya@mail.ru✉, https://orcid.org/0000-0003-1944-1546

Аннотация

Введение. Управление электронными и оптическими свойствами полупроводниковых нанокристаллов зачастую рассматривается через изменение их размера. Однако форма частиц и отношение продольного и поперечного размеров также могут влиять на их оптические свойства. В работе проведено численное моделирование электронных состояний, спектров оптической плотности, а также исследована угловая анизотропия поглощения нанокристаллов теллурида кадмия различной формы при варьировании отношения продольного и поперечного размеров частиц. **Метод.** Численное моделирование выполнено для сфероидальных, цилиндрических и конических нанокристаллов теллурида кадмия при фиксированном объеме 422 нм^3. Расчеты электронных состояний и спектров оптической плотности проводились в рамках приближения эффективной массы при температуре 300 K. Анализ угловой зависимости спектров оптической плотности выполнялся для углов 0°, 30°, 45°, 60° и 90°. **Основные результаты.** Показано, что варьирование отношения продольного и поперечного размеров приводит к изменению энергии основного электронного состояния E_0 и энергии первого возбужденного электронного состояния E_1. Наиболее высокие значения E_0 = 1,7618 эВ и E_1 = 1,9528 эВ получены для конических частиц, что обусловлено более сильным пространственным ограничением движения электрона вследствие неоднородного поперечного сечения конуса и наличия вершины. Обнаружено, что изменение отношения продольного и поперечного размеров нанокристаллов при фиксированном объеме приводит к перестройке спектров оптической плотности. Установлена выраженная угловая анизотропия поглощения нанокристаллов теллурида кадмия. Максимальное положительное значение коэффициента угловой анизотропии составило 16,12 % для сфероидальных нанокристаллов и наибольшее по модулю отрицательное значение –10,59 % для цилиндрических частиц. **Обсуждение.** В отличие от традиционного подхода, основанного на изменении общего размера нанокристаллов, предложенный подход позволяет управлять электронными и оптическими свойствами за счет изменения отношения продольного и поперечного размеров при фиксированном объеме. Полученные результаты могут быть полезны для настройки энергетических уровней, спектров поглощения и угловой чувствительности нанокристаллов теллурида кадмия при разработке оптоэлектронных и фотонных устройств на их основе.

Ключевые слова

нанокристаллы, теллурид кадмия, оптическая плотность, численное моделирование, электронные состояния

Ссылка для цитирования: Дайбаге Д.С. Моделирование электронных состояний и угловой анизотропии поглощения нанокристаллов теллурида кадмия с различным соотношением геометрических размеров // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2026. Т. 26, № 5. С. 926–934. doi: 10.17586/2226-1494-2026-26-5-926-934

© Дайбаге Д.С., 2026

Modeling of electronic states and angular absorption anisotropy in cadmium telluride nanocrystals with different geometric dimension ratios

Daniil S. Daibagya✉

Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, 119991, Russian Federation

daibagya@mail.ru✉, https://orcid.org/0000-0003-1944-1546

Abstract

Control over the electronic and optical properties of semiconductor nanocrystals is often considered primarily in terms of changes in their size. However, particle shape and the ratio of longitudinal to transverse dimensions may also influence their optical properties. In this work, numerical modeling of electronic states and optical density spectra was performed, and the angular anisotropy of absorption was investigated for cadmium telluride nanocrystals of different shapes by varying the ratio of their longitudinal to transverse dimensions. The calculations were carried out for spheroidal, cylindrical, and conical cadmium telluride nanocrystals with a fixed volume of 422 nm^3. Electronic states and optical density spectra were calculated within the effective-mass approximation at a temperature of 300 K. The angular dependence of the optical density spectra was analyzed for incident angles of 0°, 30°, 45°, 60°, and 90°. It was shown that variation in the ratio of longitudinal to transverse dimensions changes the ground-state energy E_0 and the first excited-state energy E_1. The highest values, E_0 = 1.7618 eV and E_1 = 1.9528 eV, were obtained for conical nanocrystals, which may be associated with stronger spatial confinement of the electronic state due to the nonuniform transverse cross-section of the cone and the presence of an apex. It was also found that changing the ratio of longitudinal to transverse dimensions at a fixed volume leads to a restructuring of the optical density spectra. A pronounced angular anisotropy of absorption was revealed for cadmium telluride nanocrystals. The maximum positive value of the angular anisotropy coefficient was 16.12 % for spheroidal nanocrystals, whereas the most negative value was −10.59 % for cylindrical nanocrystals. In contrast to the conventional approach based on changing the overall size of nanocrystals, the proposed approach enables tuning of their electronic and optical properties by varying the ratio of longitudinal to transverse dimensions at a fixed volume. These results may be useful for tailoring the energy levels, absorption spectra, and angular sensitivity of cadmium telluride nanocrystals for the development of optoelectronic and photonic devices based on this material.

Keywords

nanocrystals, cadmium telluride, optical density, numerical modeling, electronic states

For citation: Daibagya D.S. Modeling of electronic states and angular absorption anisotropy in cadmium telluride nanocrystals with different geometric dimension ratios. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2026, vol. 26, no. 5, pp. 926–934 (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2026-26-5-926-934

Введение

Полупроводниковые коллоидные нанокристаллы, такие как квантовые точки [1, 2], нанопластинки [3] и наносвитки [4, 5], привлекли к себе большое внимание благодаря возможности управления их электронными и оптическими свойствами за счет пространственного ограничения движения носителей заряда (квантово-размерный эффект) [6]. Иными словами, изменяя размер нанокристаллов, можно настраивать энергетические уровни, а также длину волны поглощения и излучения [5, 6]. Полупроводниковые нанокристаллы представляют собой перспективный класс люминесцентных материалов и наряду с органическими соединениями [7, 8] могут использоваться в светодиодах [9] и других оптоэлектронных устройствах [10]. Однако размер нанокристалла не является единственным параметром, задающим оптические свойства полупроводниковых частиц. К таким параметрам можно отнести температуру окружающей среды [11], внешнее электрическое поле [12] и саму форму нанокристаллов [13].

Влияние формы нанокристаллов на их электронные и оптические свойства ранее изучалось для квантовых точек CdSe [6, 13], ZnCdSe/ZnS [14], InGaAs [15], CdSe/ZnSe и ZnSe/CdSe типа ядро/оболочка [16], а также для InAs [17]. Для полупроводника теллурида кадмия (CdTe) и частиц, содержащих CdTe, также известны исследования, в которых анализируются электронные и оптические свойства нанокристалла сложной формы, включая тетраподы, сфероиды, усеченные конусы и системы типа ядро/оболочка [18–22]. Однако такие работы, как правило, сосредоточены на конкретных формах или влиянии внешних полей. В связи с этим сравнение нескольких форм нанокристаллов CdTe при фиксированном объеме остается актуальной задачей, поскольку такой подход позволяет отделить влияние формы и отношения продольного и поперечного размеров от обычного квантово-размерного эффекта. Кроме того, совместный анализ электронных состояний, спектров оптической плотности и их зависимости от угла падающего излучения позволяет более полно охарактеризовать влияние угловой анизотропии поглощения и формы на оптический отклик нанокристаллов.

Цель работы — исследование электронных состояний, спектров оптической плотности и угловой анизотропии поглощения сфероидальных, цилиндрических и конических нанокристаллов CdTe при варьировании отношения продольного и поперечного размеров и фиксированном объеме. Полученные результаты в дальнейшем позволят добиться более полного понимания особенностей оптического отклика нанокристаллов CdTe, что может быть использовано при разработке устройств оптоэлектроники на их основе.

Материалы и методы

В работе исследовались нанокристаллы CdTe с осевой симметрией трех форм: сфероид, цилиндр, конус.

Ориентация нанокристалла в декартовой системе координат задавалась таким образом, чтобы ось z совпадала с осью симметрии частиц CdTe, а оси x и y задавали горизонтальную плоскость (рис. 1). Геометрические размеры L_x и L_y соответствовали полным поперечным размерам нанокристалла, а L_z — продольному размеру. Во всех расчетах принималось $L_x = L_y$. В качестве параметра, который отвечал за различное отношение геометрических размеров, использовалась безразмерная величина

$$r = \frac{L_z}{L_x}. \qquad (1)$$

В работе были рассмотрены следующие значения параметра r = 0,50, 0,75, 1,00, 1,50 и 2,00. Объем всех рассмотренных форм нанокристаллов был фиксирован и составлял $V \approx 422$ нм^3. Выбранный объем (422 нм^3) соответствует объему куба со стороной 7,5 нм, которая численно равна радиусу экситона Бора для CdTe [23]. Геометрические параметры нанокристаллов CdTe представлены в табл. 1.

Моделирование электронных состояний и оптических свойств выполнялось с использованием программы Quantum Dot Lab на платформе nanoHUB [24]. Расчеты в программе проводились с использованием вычислительного пакета NEMO5. Уравнение Шредингера в используемой модели сводилось к задаче на собственные значения, для решения которой применялся метод Ланцоша [24]. Задача рассматривалась в трехмерной постановке с заданием полных размеров нанокристалла вдоль координатных осей (рис. 1). Вычисления проводились в рамках приближения эффективной массы для электрона, чье движение было ограничено внутри нанокристалла CdTe. В расчетах использовались следующие параметры материала CdTe: ширина запрещенной зоны E_g = 1,475 эВ, эффективная масса электрона $m_e = 0{,}11m_0$ и параметр решетки a = 0,648 нм [25, 26]. Моделирование спектров оптической плотности выполнялось при температуре T = 300 К. В выбранной модели оптический отклик рассматривался через переходы между дискретными электронными состояниями внутри нанокристалла. Исходя из этого, спектры оптической плотности в настоящей работе характеризуют относительную интенсивность таких электронных переходов. Направление падающего излучения задавалось углами θ и φ относительно осей координат (рис. 1). Поскольку все рассмотренные формы обладают осевой симметрией относительно оси z, угол φ во всех расчетах принимался равным 0°. Для анализа влияния формы и параметра r на оптические свойства нанокристалла CdTe сначала рассматривались спектры оптической плотности при промежуточном значении θ = 45°. Анализ угловой зависимости спектров оптической плотности выполнялся для углов θ = 0°, 30°, 45°, 60° и 90°. Спектры оптической плотности рассчитывались в диапазоне энергий от 0 до 0,9 эВ.

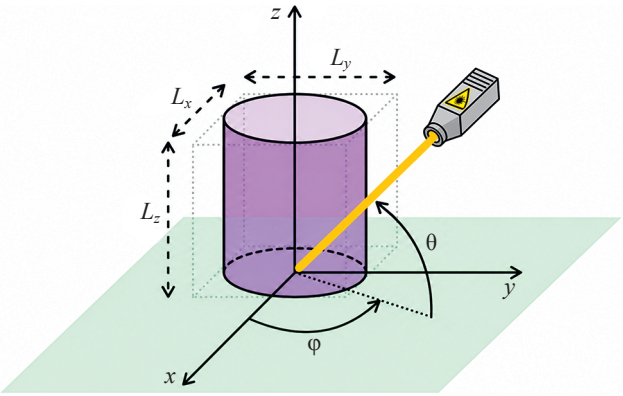


Рис. 1. Схема расположения осей координат и углов θ, φ при моделировании электронных и оптических свойств нанокристаллов CdTe

Fig. 1. Coordinate axes and angles θ and φ used in the modeling of the electronic and optical properties of CdTe nanocrystals

Результаты и обсуждение

Получены зависимости (рис. 2) энергии основного электронного состояния E_0, энергии первого возбуж-

Таблица 1. Геометрические параметры нанокристаллов CdTe при различных значениях параметра r и фиксированном объеме $V \approx 422$ нм^3

Table 1. Geometrical parameters of CdTe nanocrystals at different values of the parameter r and a fixed volume of $V \approx 422$ nm^3

r	Геометрические параметры, нм	Форма		
		сфероид	цилиндр	конус
0,50	$L_x = L_y$	11,72	10,24	14,77
	L_z	5,86	5,12	7,39
0,75	$L_x = L_y$	10,24	8,95	12,90
	L_z	7,68	6,71	9,68
1,00	$L_x = L_y$	9,31	8,13	11,72
	L_z	9,31	8,13	11,72
1,50	$L_x = L_y$	8,13	7,10	10,24
	L_z	12,19	10,65	15,36
2,00	$L_x = L_y$	7,39	6,45	9,31
	L_z	14,77	12,90	18,61

денного электронного состояния E_1, а также энергетического интервала $\Delta E_{01} = E_1 - E_0$ от параметра r для сфероидальных, цилиндрических и конических нанокристаллов CdTe. Отметим, что приведенные значения E_0 и E_1 включают заданную ширину запрещенной зоны CdTe E_g = 1,475 эВ и дополнительную энергию, возникающую вследствие пространственного ограничения движения электрона в нанокристалле. Поскольку объем всех рассмотренных форм нанокристаллов был фиксирован, наблюдаемые изменения энергетических уровней обусловлены не изменением общего объема частиц, а перераспределением пространственного квантового ограничения между продольным и поперечным направлениями.

Как видно из рис. 2, *a*, энергия основного состояния E_0 для всех форм нанокристаллов имеет минимум при $r = 1$. Согласно выражению (1), сфероидальные частицы при $r = 1$ соответствуют идеальной сфере, поэтому наличие минимума основного состояния в этом случае объясняется одинаковым ограничением движения электрона по всем пространственным направлениям. Для цилиндрических и конических частиц при $r = 1$ продольный и полный поперечный размеры становятся равными $L_z = L_x$, что также приводит к уменьшению энергии основного состояния. При отклонении параметра r как в сторону меньших, так и больших значений энергия E_0 возрастает. Это можно связать с тем, что при фиксированном объеме сжатие или растяжение нанокристалла приводит к усилению квантового ограничения в одном или нескольких направлениях. Практически для всех рассмотренных значений параметра r наиболее высокие значения энергии основного состояния E_0 наблюдаются для конической формы нанокристалла, что указывает на более сильное квантовое ограничение по сравнению с другими формами частиц. Такая особенность может быть связана с неоднородным поперечным сечением конуса и наличием вершины, вследствие чего увеличивается квантовое ограничение [27].

Для конических нанокристаллов энергия первого возбужденного состояния E_1 постепенно уменьшается при увеличении параметра r (рис. 2, *b*). Для сфероидальных и цилиндрических частиц наблюдаются локальные увеличения энергии E_1, однако в целом зависимость $E_1(r)$ носит убывающий характер. Такое поведение может быть связано с перестройкой электронного спектра при изменении параметра r. При изменении отношения размеров L_z и L_x состояния, связанные преимущественно с различными направлениями пространственного ограничения движения электрона, могут смещаться по энергии неодинаково, что приводит к немонотонной зависимости $E_1(r)$.

Из рис. 2, *c*, видно, что энергетический интервал ΔE_{01} уменьшается при переходе к более вытянутым формам нанокристаллов. Это означает, что изменение отношения продольного и поперечного размеров позволяет управлять расстоянием между нижними электронными уровнями при фиксированном объеме частицы. При этом, чтобы значительно уменьшить ΔE_{01}, целесообразно растягивать нанокристалл вдоль направления L_z. Уменьшение ΔE_{01} соответствует смещению возможных электронных переходов в область больших длин волн. Такой подход может быть полезен для настройки электронных переходов, представляющих интерес для оптоэлектронных устройств [28, 29].

В табл. 2 представлены энергии электронных состояний E_0 и E_1, а также кратность вырождения при различных значениях параметра r. В случае сферических нанокристаллов ($r = 1$) кратность вырождения первого возбужденного состояния принимает максимальное значение, равное трем, что может быть связано с высокой симметрией сферической формы [30]. Варьирование параметра r приводит к изменению кратности вырождения уровня E_1, что указывает на расщепление близко расположенных уровней вследствие различия пространственного ограничения вдоль продольного и поперечного направлений.

На рис. 3 представлены спектры оптической плотности сфероидальных, цилиндрических и конических нанокристаллов CdTe при различных значениях параметра r. Использование одинаковой ориентации падающего излучения позволяет сопоставить влияние

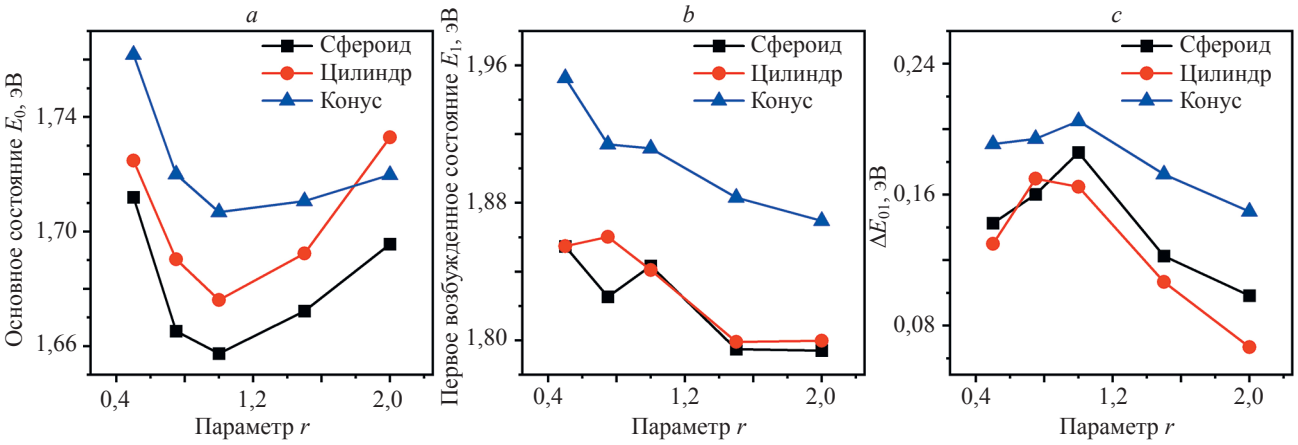


Рис. 2. Зависимости энергий основного E_0 (*a*), первого возбужденного E_1 (*b*) электронных состояний и их разницы ΔE_{01} (*c*) от параметра r

Fig. 2. Dependence of the ground-state energy E_0 (*a*), the first excited-state energy E_1 (*b*), and the energy interval ΔE_{01} (*c*) on the parameter r

Таблица 2. Рассчитанные электронные состояния нанокристаллов CdTe при различных значениях параметра r и фиксированном объеме $V \approx 422$ нм^3

Table 2. Calculated electronic states of CdTe nanocrystals at different values of the parameter r and a fixed volume of $V \approx 422$ nm^3

Форма	r	Электронные состояния, эВ	
		E_0	E_1
Сфероид	0,50	1,7120 (1)	1,8546 (2)
	0,75	1,6652 (1)	1,8254 (2)
	1,00	1,6574 (1)	1,8433 (3)
	1,50	1,6723 (1)	1,7949 (1)
	2,00	1,6956 (1)	1,7940 (1)
Цилиндр	0,50	1,7248 (1)	1,8549 (2)
	0,75	1,6903 (1)	1,8602 (1)
	1,00	1,6761 (1)	1,8410 (1)
	1,50	1,6924 (1)	1,7991 (1)
	2,00	1,7329 (1)	1,7998 (1)
Конус	0,50	1,7618 (1)	1,9528 (2)
	0,75	1,7200 (1)	1,9142 (2)
	1,00	1,7068 (1)	1,9118 (2)
	1,50	1,7107 (1)	1,8832 (1)
	2,00	1,7198 (1)	1,8696 (1)

Примечание. Значения E_0 и E_1 включают заданную ширину запрещенной зоны E_g и энергию, возникающую вследствие пространственного ограничения движения электрона в нанокристалле. В скобках указана кратность вырождения.

параметра r на спектральный отклик частиц различной формы. Для сфероидальных нанокристаллов при $r = 1$ в спектре оптической плотности наблюдается одна интенсивная полоса в низкоэнергетической области спектра (рис. 3, *a*, черная кривая), в то время как у цилиндрических частиц основной максимум разделяется на две близко расположенные полосы (рис. 3, *b*, черная кривая). Наиболее выраженные отличия наблюдаются для конической формы нанокристалла. Помимо интенсивной полосы в низкоэнергетической области, в их спектре оптической плотности присутствуют дополнительные максимумы в области более высоких значений энергии (рис. 3, *c*, черная кривая). Это может быть связано с неоднородным поперечным сечением конуса и наличием вершины, которые приводят к более сложной структуре электронных состояний и оптических переходов [27, 31]. Таким образом, форма нанокристаллов вносит существенный вклад в спектры оптической плотности даже при одинаковых значениях параметра r.

Изменение параметра r приводит к перестройке спектров оптической плотности всех рассмотренных форм нанокристаллов CdTe. Основные изменения проявляются в смещении полос поглощения, изменении их интенсивности, а также в появлении дополнительных

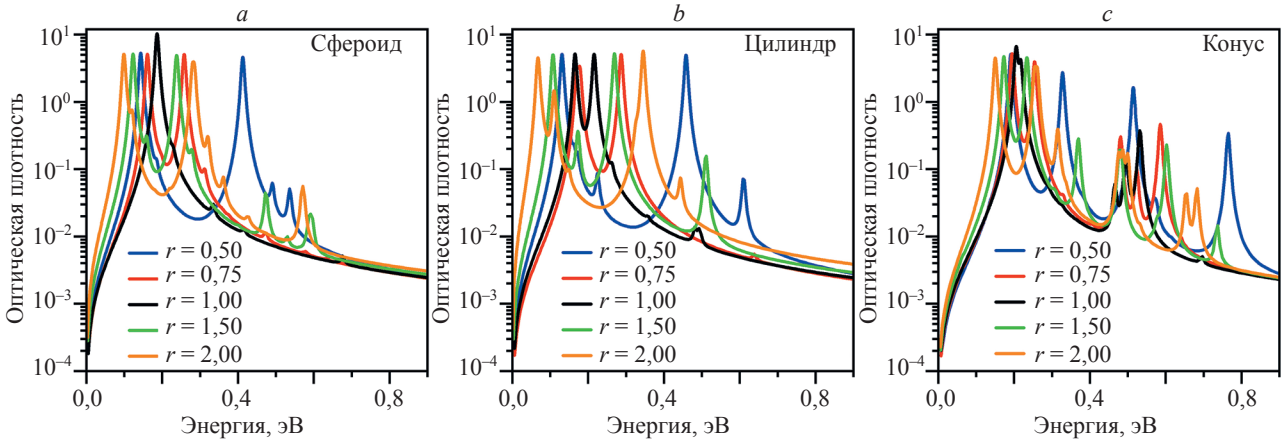


Рис. 3. Спектры оптической плотности сфероидальных (*a*), цилиндрических (*b*) и конических (*c*) нанокристаллов CdTe ($T = 300$ К, $\varphi = 0°$, $\theta = 45°$) при различных значениях параметра r

Fig. 3. Optical density spectra of spheroidal (*a*), cylindrical (*b*), and conical (*c*) CdTe nanocrystals at $T = 300$ K, $\varphi = 0°$, and $\theta = 45°$ for different values of the aspect ratio r

максимумов. Такое поведение спектров оптической плотности может быть связано с тем, что при фиксированном объеме изменение отношения продольного и поперечного размеров нанокристалла приводит к изменению электронных состояний. В связи с этим отдельные переходы могут становиться более или менее выраженными в спектре оптической плотности [27]. Появление дополнительных максимумов может быть связано с тем, что при определенных значениях параметра r становятся заметными переходы с участием более высоких электронных состояний, которые при другой форме или другом соотношении размеров могут быть слабо выражены или перекрываться с соседними полосами. Подобные закономерности ранее были выявлены и для нанокристаллов CdSe. В работах [6, 13] показано, что размер, форма, а также различное отношение сторон нанокристалла влияют на электронные уровни и оптические переходы. Полученные результаты показали, что спектрами оптической плотности можно управлять не только за счет квантово-размерного эффекта, но и за счет изменения отношения продольного и поперечного размеров при постоянном объеме.

На рис. 4 показаны спектры оптической плотности нанокристаллов CdTe при различных значениях угла падающего излучения (для случая $r = 1$). Видно, что характер зависимости спектров оптической плотности от угла θ существенно различается для трех рассмотренных форм нанокристалла. Для сфероидальных частиц спектры оптической плотности полностью совпадают при всех значениях угла θ (рис. 4, *a*). Это связано с тем, что при $r = 1$ нанокристаллы имеют форму идеальной сферы, для которой отсутствует выделенное направление пространственного ограничения движения электрона. Поэтому изменение направления падающего излучения относительно оси z не влияет на спектр оптической плотности. Для цилиндрических нанокристаллов зависимость спектров оптической плотности от угла θ выражена сильнее (рис. 4, *b*). При изменении угла θ меняется интенсивность основных полос поглощения. Это связано с тем, что цилиндр не является сферически симметричным объектом: наличие плоских оснований и боковой поверхности приводит к различному оптическому отклику вдоль радиального и осевого направлений. Для конических нанокристаллов также наблюдается заметная зависимость спектров оптической плотности от угла падающего излучения, особенно в высокоэнергетической области (рис. 4, *c*). При увеличении угла θ заметно изменение интенсивности полос поглощения, что может быть связано с неоднородным поперечным сечением конуса и наличием вершины. Таким образом, угловая анизотропия спектров оптической плотности определяется не только значением параметра r, но и самой формой нанокристалла.

Для количественного описания зависимости спектров оптической плотности нанокристаллов CdTe от угла θ была рассчитана интегральная интенсивность поглощения:

$$S(\theta) = \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} I(E, \theta) dE,$$

где $I(E, \theta)$ — оптическая плотность; $E_{\min} = 0{,}001$ эВ и $E_{\max} = 0{,}900$ эВ — пределы интегрирования. Для оценки угловой анизотропии был введен коэффициент:

$$K_\theta = \frac{S(90°) - S(0°)}{S(0°)} \cdot 100\ \%. \qquad (2)$$

Согласно формуле (2), положительные значения коэффициента угловой анизотропии K_θ означают, что интегральная интенсивность поглощения выше при $\theta = 90°$, чем при $\theta = 0°$, тогда как отрицательные значения — наоборот. Значения K_θ, близкие к нулю, указывают на слабую угловую анизотропию.

На рис. 5 приведены зависимости коэффициента угловой анизотропии K_θ от параметра r для всех рассмотренных форм нанокристаллов. При растяжении нанокристалла в поперечном направлении L_x ($r < 1$) коэффициент K_θ принимает положительные значения. Для сфероидальных нанокристаллов он изменяется от 16,12 % при $r = 0{,}50$ до 4,73 % при $r = 0{,}75$, для цилиндрических — от 9,96 % до 3,07 %, а для конических —

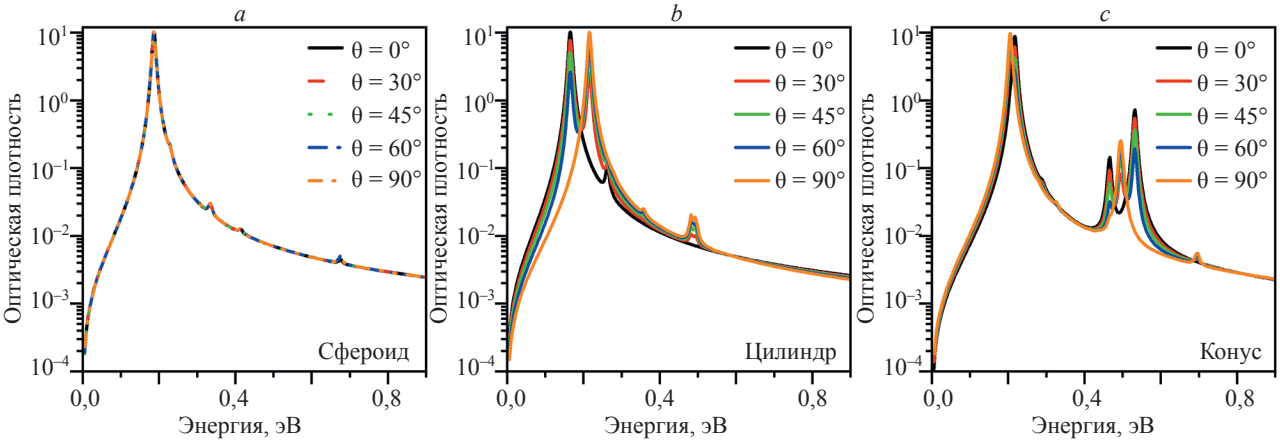


Рис. 4. Спектры оптической плотности сфероидальных (*a*), цилиндрических (*b*) и конических (*c*) нанокристаллов CdTe ($T = 300$ K, $\varphi = 0°$, $r = 1$) при различных значениях угла θ

Fig. 4. Optical density spectra of spheroidal (*a*), cylindrical (*b*), and conical (*c*) CdTe nanocrystals at $T = 300$ K, $\varphi = 0°$, and $r = 1$ for different values of θ

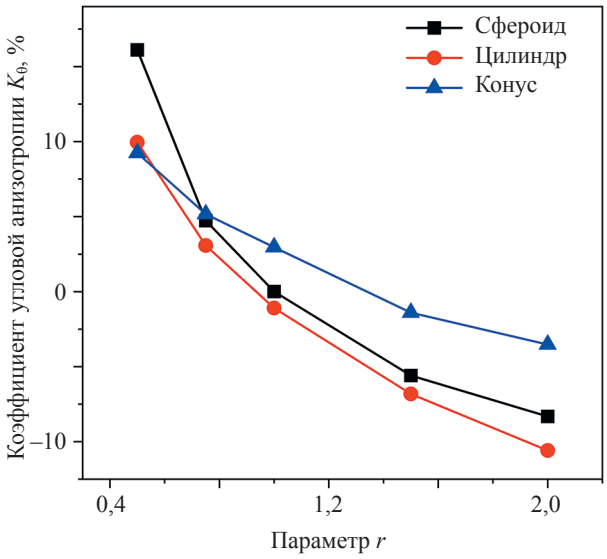


Рис. 5. Зависимости коэффициента угловой анизотропии интегральной интенсивности поглощения K_θ нанокристаллов CdTe от параметра r

Fig. 5. Dependence of the angular anisotropy coefficient K_θ of the integrated absorption intensity on the parameter r for CdTe nanocrystals

от 9,24 % до 5,17 %. Это означает, что интегральная интенсивность поглощения больше при облучении под углом θ = 90° по сравнению с θ = 0°. В области $r > 1$ (нанокристаллы вытянуты вдоль продольного направления L_z) коэффициент K_θ становится отрицательным. При $r = 2$ его значения составляют –8,32 %, –10,59 % и –3,52 % для сфероидальных, цилиндрических и конических нанокристаллов соответственно. В этом случае интегральная интенсивность поглощения выше при облучении под углом θ = 0°, чем под θ = 90°. Для сфероидальных нанокристаллов значение коэффициента K_θ близко к нулю (0,002 %) при $r = 1$, что обусловлено высокой симметрией сферы и согласуется с практически изотропным спектральным откликом, показанным на рис. 4, *а*. Для цилиндрических нанокристаллов при $r = 1$ сохраняется небольшая угловая анизотропия с отрицательным значением коэффициента K_θ. Для конических частиц при $r = 1$ коэффициент K_θ принимает положительное значение (2,96 %) и большее по модулю, чем для цилиндрических нанокристаллов (–1,09 %). Это также может быть связано с неоднородным поперечным сечением конуса и наличием вершины. Таким образом, выбор направления облучения может использоваться для усиления оптического отклика исследуемых полупроводниковых нанокристаллов CdTe: для частиц с $r < 1$ более эффективна ориентация θ = 90°, а для частиц с $r > 1$ – θ = 0°.

Заключение

В работе выполнено численное моделирование электронных состояний и спектров оптической плотности нанокристаллов теллурида кадмия различной формы при фиксированном объеме. Рассматривались сфероидальные, цилиндрические и конические нанокристаллы с различными значениями параметра r, характеризующего отношение продольного и поперечного размеров. Показано, что энергии основного состояния E_0 и первого возбужденного состояния E_1 зависят от параметра r. Наиболее высокие значения E_0 = 1,7618 эВ и E_1 = 1,9528 эВ получены для конических частиц, что обусловлено более сильным пространственным ограничением движения электрона вследствие наличия неоднородного поперечного сечения конуса и вершины. Исследованы спектры оптической плотности нанокристаллов теллурида кадмия как при изменении параметра r, так и при изменении угла θ падающего излучения. Варьирование параметра r при фиксированном объеме приводит к изменению спектров оптической плотности нанокристалла. Наблюдаются смещение и появление дополнительных полос поглощения, а также изменение их интенсивности, что может быть обусловлено изменением электронных состояний при варьировании отношения продольного и поперечного размеров нанокристалла. Установлено, что спектры оптической плотности зависят от ориентации падающего излучения относительно оси симметрии нанокристалла вследствие особенностей формы. Максимальное положительное значение коэффициента угловой анизотропии K_θ = 16,12 % получено для сфероидальных нанокристаллов при r = 0,5, тогда как наибольшее по модулю отрицательное значение K_θ = −10,59 % наблюдается для цилиндрических нанокристаллов при $r = 2$. Выявлено, что выбор направления облучения может использоваться для усиления оптического отклика: для частиц с $r < 1$ более эффективна ориентация θ = 90°, а для частиц с $r > 1$ – θ = 0°. Полученные результаты могут быть использованы для настройки электронных состояний, спектров оптической плотности и угловой чувствительности оптического отклика нанокристаллов теллурида кадмия при разработке оптоэлектронных и фотонных устройств на их основе.

Литература

1. Sakr M.E.M., Kandel H.M., Abou Kana M.T., Elwahy A.H.M., Khalil A.A.A. Enhancement of optical and photo-physical properties of fluorescein dye by CdS quantum dots // Journal of Materials Science: Materials in Electronics. 2026. V. 37. N 3. P. 185. doi: 10.1007/s10854-025-16347-w
2. Андрюшкин В.В., Драгунова А.С., Комаров С.Д., Надточий А.М., Гладышев А.Г., Бабичев А.В. [и др.] Влияние низких температур и термического отжига на оптические свойства квантовых точек InGaPAs // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2022. Т. 22. № 5. С. 921–928. doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-921-928

References

1. Sakr M.E.M., Kandel H.M., Abou Kana M.T., Elwahy A.H.M., Khalil A.A.A. Enhancement of optical and photo-physical properties of fluorescein dye by CdS quantum dots. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 2026, vol. 37, no. 3, pp. 185. doi: 10.1007/s10854-025-16347-w
2. Andryushkin V.V., Dragunova A.S., Komarov S.D., Nadtochiy A.M., Gladyshev A.G., Babichev A.V., et al. Influence of low temperatures and thermal annealing on the optical properties of InGaPAs quantum dots. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2022, vol. 22, no. 5, pp. 921–928. (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2022-22-5-921-928

3. Czajkowski G. Electro-optical properties of excitons in CdSe nanoplatelets // Symmetry. 2026. V. 18. N 2. P. 386. doi: 10.3390/sym18020386
4. Дайбаге Д.С. Спектральные и кинетические характеристики свернутых в виде свитков ультратонких нанопластин селенида кадмия // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2023. Т. 23. № 5. С. 920–926. doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-5-920-926
5. Koshkinbayev Y., Ospanova A., Akhmetova A., Nurakhmetov T., Kainarbay A., Zhangylyssov K., et al. The influence of temperature and stoichiometry on the optical properties of CdSe nanoplatelets // Nanomaterials. 2024. V. 14. N 22. P. 1794. doi: 10.3390/nano14221794
6. Kim S.H., Man M.T., Lee J.W., Park K.-D., Lee H.S. Influence of size and shape anisotropy on optical properties of CdSe quantum dots // Nanomaterials. 2020. V. 10. N 8. P. 1589. doi: 10.3390/nano10081589
7. Осадченко А.В., Амброзевич С.А., Захарчук И.А., Ващенко А.А., Дайбаге Д.С., Кармазин Л.И. [и др.] Фотофизические, оптические и люминесцентные характеристики гетероциклически замещенных кумаринов и их применение в OLED-устройствах // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2025. Т. 25. № 6. С. 1047–1057. doi: 10.17586/2226-1494-2025-25-6-1047-1057
8. Xu Q., Fu J., Gu T., Xia X., Sun T., Wang K., et al. Photophysical and chiroptical properties of a pair of chiral europium(III) enantiomers with a record external quantum efficiency // Chemical Engineering Journal. 2026. V. 537. P. 176281. doi: 10.1016/j.cej.2026.176281
9. Qiu J., Zhu Y., Bai P., Li Y., Liu Q., Xiao Y., Gao Y. Low efficiency roll-off and high current efficiency light-emitting diode enabled by graded CdSe/ZnSe/ZnS colloidal quantum wells // Advanced Materials. 2026. V. 38. N 13. P. e21504. doi: 10.1002/adma.202521504
10. Phadke V.M., Mazumder N., Patil A. Applications of quantum dots (QDs) in optical imaging // Lecture Notes in Nanoscale Science and Technology. 2026. V. 40. P. 21–39. doi: 10.1007/978-3-031-98219-4_2
11. Zhou Y., Hao X., Yi H., Yang Z., Cheng R., Han K., et al. Temperature-dependent structural and optical tuning of InAs/GaAs submonolayer quantum dots // Journal of Alloys and Compounds. 2026. V. 1071. P. 188861. doi: 10.1016/j.jallcom.2026.188861
12. Дайбаге Д.С., Амброзевич С.А., Захарчук И.А., Осадченко А.В., Селюков А.С. Люминесцентные и колориметрические свойства покрытых оболочкой диоксида кремния сферических нанокристаллов теллурида кадмия во внешнем электрическом поле // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2024. Т. 24. № 3. С. 406–414. doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-3-406-414
13. Liu Y., Bose S., Fan W. Effect of size and shape on electronic and optical properties of CdSe quantum dots // Optik. 2018. V. 155. P. 242–250. doi: 10.1016/j.ijleo.2017.10.165
14. Rathi K., Gupta S.K., Kumar J., Negi C.M.S. Polarization-dependent intervalence band absorption in quantum dots // Physica B: Condensed Matter. 2023. V. 658. P. 414846. doi: 10.1016/j.physb.2023.414846
15. Chua S.J., Xu S.J., Zhang X.H., Wang X.C., Mei T., Fan W.J., et al. Polarization dependence of intraband absorption in self-organized quantum dots // Applied Physics Letters. 1998. V. 73. N 14. P. 1997–1999. doi: 10.1063/1.122347
16. Zeiri N., Yahyaoui N., Althumairi N.A., Alhajri F., Jbeli A., Said M. Optoelectronic properties of CdSe/ZnSe and ZnSe/CdSe core/shell spheroidal prolate quantum dots through the geometrical parameters and dielectric oxide matrix: A theoretical investigation // Results in Physics. 2025. V. 74. P. 108299. doi: 10.1016/j.rinp.2025.108299
17. Dahliah D., Shaer A., Kasapoglu E. Optical properties of anisotropic quantum dots: Effects of shape and magnetic field // Physica B: Condensed Matter. 2026. V. 728. P. 418388. doi: 10.1016/j.physb.2026.418388
18. Hértilli S., Yahyaoui N., Zeiri N., Saadaoui S., Said M. Energy levels and nonlinear optical properties of spheroid-shaped CdTe/ZnTe core/shell quantum dot // Optics & Laser Technology. 2022. V. 155. P. 108425. doi: 10.1016/j.optlastec.2022.108425
19. Tarì D., De Giorgi M., Sala F.D., Carbone L., Krahne R., Manna L., et al. Optical properties of tetrapod-shaped CdTe nanocrystals // Applied Physics Letters. 2005. V. 87. N 22. P. 224101. doi: 10.1063/1.2130727
20. Pulgar-Velásquez L., Sierra-Ortega J., Vinasco J.A., Laroze D., Radu A., Kasapoglu E., et al. Shallow donor impurity states with

3. Czajkowski G. Electro-optical properties of excitons in CdSe nanoplatelets. *Symmetry*, 2026, vol. 18, no. 2, pp. 386. doi: 10.3390/sym18020386
4. Daibagya D.S. Spectral and kinetic characteristics of ultrathin cadmium selenide nanoscrolls. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2023, vol. 23, no. 5, pp. 920–926. (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2023-23-5-920-926
5. Koshkinbayev Y., Ospanova A., Akhmetova A., Nurakhmetov T., Kainarbay A., Zhangylyssov K., et al. The influence of temperature and stoichiometry on the optical properties of CdSe nanoplatelets. *Nanomaterials*, 2024, vol. 14, no. 22, pp. 1794. doi: 10.3390/nano14221794
6. Kim S.H., Man M.T., Lee J.W., Park K.-D., Lee H.S. Influence of size and shape anisotropy on optical properties of CdSe quantum dots. *Nanomaterials*, 2020, vol. 10, no. 8, pp. 1589. doi: 10.3390/nano10081589
7. Osadchenko A.V., Ambrozevich S.A., Zakharchuk I.A., Vashchenko A.A., Daibagya D.S., Karmazin L.I., et al. Photophysical, optical and luminescent characteristics of heterocyclic-substituted coumarins and their application in OLED-devices. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2025, vol. 25, no. 6, pp. 1047–1057. (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2025-25-6-1047-1057
8. Xu Q., Fu J., Gu T., Xia X., Sun T., Wang K., et al. Photophysical and chiroptical properties of a pair of chiral europium(III) enantiomers with a record external quantum efficiency. *Chemical Engineering Journal*, 2026, vol. 537, pp. 176281. doi: 10.1016/j.cej.2026.176281
9. Qiu J., Zhu Y., Bai P., Li Y., Liu Q., Xiao Y., Gao Y. Low efficiency roll-off and high current efficiency light-emitting diode enabled by graded CdSe/ZnSe/ZnS colloidal quantum wells. *Advanced Materials*, 2026, vol. 38, no. 13, pp. e21504. doi: 10.1002/adma.202521504
10. Phadke V.M., Mazumder N., Patil A. Applications of quantum dots (QDs) in optical imaging. *Lecture Notes in Nanoscale Science and Technology*, 2026, vol. 40, pp. 21–39. doi: 10.1007/978-3-031-98219-4_2
11. Zhou Y., Hao X., Yi H., Yang Z., Cheng R., Han K., et al. Temperature-dependent structural and optical tuning of InAs/GaAs submonolayer quantum dots. *Journal of Alloys and Compounds*, 2026, vol. 1071, pp. 188861. doi: 10.1016/j.jallcom.2026.188861
12. Daibagya D.S., Ambrozevich S.A., Zakharchuk I.A., Osadchenko A.V., Selyukov A.S. Luminescent and colorimetric properties of silica-coated spherical cadmium telluride nanocrystals in an external electric field. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2024, vol. 24, no. 3, pp. 406–414. (in Russian). doi: 10.17586/2226-1494-2024-24-3-406-414
13. Liu Y., Bose S., Fan W. Effect of size and shape on electronic and optical properties of CdSe quantum dots. *Optik*, 2018, vol. 155, pp. 242–250. doi: 10.1016/j.ijleo.2017.10.165
14. Rathi K., Gupta S.K., Kumar J., Negi C.M.S. Polarization-dependent intervalence band absorption in quantum dots. *Physica B: Condensed Matter*, 2023, vol. 658, pp. 414846. doi: 10.1016/j.physb.2023.414846
15. Chua S.J., Xu S.J., Zhang X.H., Wang X.C., Mei T., Fan W.J., et al. Polarization dependence of intraband absorption in self-organized quantum dots. *Applied Physics Letters*, 1998, vol. 73, no. 14, pp. 1997–1999. doi: 10.1063/1.122347
16. Zeiri N., Yahyaoui N., Althumairi N.A., Alhajri F., Jbeli A., Said M. Optoelectronic properties of CdSe/ZnSe and ZnSe/CdSe core/shell spheroidal prolate quantum dots through the geometrical parameters and dielectric oxide matrix: A theoretical investigation. *Results in Physics*, 2025, vol. 74, pp. 108299. doi: 10.1016/j.rinp.2025.108299
17. Dahliah D., Shaer A., Kasapoglu E. Optical properties of anisotropic quantum dots: Effects of shape and magnetic field. *Physica B: Condensed Matter*, 2026, vol. 728, pp. 418388. doi: 10.1016/j.physb.2026.418388
18. Hértilli S., Yahyaoui N., Zeiri N., Saadaoui S., Said M. Energy levels and nonlinear optical properties of spheroid-shaped CdTe/ZnTe core/shell quantum dot. *Optics & Laser Technology*, 2022, vol. 155, pp. 108425. doi: 10.1016/j.optlastec.2022.108425
19. Tarì D., De Giorgi M., Sala F.D., Carbone L., Krahne R., Manna L., et al. Optical properties of tetrapod-shaped CdTe nanocrystals. *Applied Physics Letters*, 2005. V. 87. N 22. P. 224101. doi: 10.1063/1.2130727
20. Pulgar-Velásquez L., Sierra-Ortega J., Vinasco J.A., Laroze D., Radu A., Kasapoglu E., et al. Shallow donor impurity states with

excitonic contribution in GaAs/AlGaAs and CdTe/CdSe truncated conical quantum dots under applied magnetic field // Nanomaterials. 2021. V. 11. N 11. P. 2832. doi: 10.3390/nano11112832
21. Donado F.A., Almanza F.G., Viña C.F., Vinasco J.A., Sierra-Ortega J., Escorcia-Salas G.E., et al. Impact of nonresonant intense laser and electric fields on a low-dimensional CdTe/CdSe type-II cone // Nanomaterials. 2025. V. 15. N 15. P. 1208. doi: 10.3390/nano15151208
22. Hahn R.V.H., Mora-Rey F., Restrepo R.L., Morales A.L., Montoya-Sánchez J., Eramo G., et al. Electronic and optical properties of tetrapod quantum dots under applied electric and magnetic fields // The European Physical Journal Plus. 2024. V. 139. N 4. P. 311. doi: 10.1140/epjp/s13360-024-05089-z
23. Dos Santos C.H.D., Ferreira D.L., Cocca L.H.Z., Mourão R.S., Schiavon M.A., Mendonça C.R., et al. Size-dependent photoinduced transparency in colloidal CdTe quantum dots in the strong confinement regime: An inverse linear relationship // Physical Chemistry Chemical Physics. 2023. V. 25. N 1. P. 359–365. doi: 10.1039/d2cp05006d
24. Klimeck G., Korkusinski M., Xu H., Lee S., Goasguen S., Saied F. Building and deploying community nanotechnology software tools on nanoHUB.org – atomistic simulations of multimillion-atom quantum dot nanostructures // Proc. of the 5th IEEE Conference on Nanotechnology. 2005. V. 2. P. 807. doi: 10.1109/NANO.2005.1500654
25. Daibagya D.S., Ambrozevich S.A., Smirnov M.S., Ovchinnikov O.V., Osadchenko A.V., Zakharchuk I.A., et al. Enhanced photoluminescence of CdTe/SiO_2 quantum dots: Impact of ambient conditions and laser excitation regime on surface trap passivation // Materials Letters. 2025. V. 398. P. 138968. doi: 10.1016/j.matlet.2025.138968
26. Miracle J., Nichols A., Cantrell S., Myers T., Theodoropoulou N. Epitaxial growth and structural characterization of PbTe thin films on CdTe (211) B: Evidence of a 180° twisted interface // Crystal Growth & Design. 2026. V. 26. N 9. P. 3267–3275. doi: 10.1021/acs.cgd.5c01542
27. Ngo C.Y., Yoon S.F., Fan W.J., Chua S.J. Effects of size and shape on electronic states of quantum dots // Physical Review B. 2006. V. 74. N 24. P. 245331. doi: 10.1103/PhysRevB.74.245331
28. Zhang Y., Wu G. Quantum dot materials and optoelectronic devices // Nanomaterials. 2025. V. 15. N 23. P. 1812. doi: 10.3390/nano15231812
29. Zhang C., Niu Y., Zhang Z., Wu B., Zhen H., Huang G., et al. Recent progress in infrared detection from material advances to integrated intelligent systems // Advanced Materials. 2026. V. 38. N 20. P. e21432. doi: 10.1002/adma.202521432
30. Mantashian G.A., Mantashyan P.A., Hayrapetyan D.B. Modeling of quantum dots with the finite element method // Computation. 2023. V. 11. N 1. P. 5. doi: 10.3390/computation11010005
31. Imran A., Jiang J., Eric D., Yousaf M. Size and shape dependent optical properties of InAs quantum dots // Proceedings of SPIE. 2017. V. 10622. P. 1062209. doi: 10.1117/12.2286297

excitonic contribution in GaAs/AlGaAs and CdTe/CdSe truncated conical quantum dots under applied magnetic field. *Nanomaterials*, 2021, vol. 11, no. 11, pp. 2832. doi: 10.3390/nano11112832
21. Donado F.A., Almanza F.G., Viña C.F., Vinasco J.A., Sierra-Ortega J., Escorcia-Salas G.E., et al. Impact of nonresonant intense laser and electric fields on a low-dimensional CdTe/CdSe type-II cone. *Nanomaterials*, 2025, vol. 15, no. 15, pp. 1208. doi: 10.3390/nano15151208
22. Hahn R.V.H., Mora-Rey F., Restrepo R.L., Morales A.L., Montoya-Sánchez J., Eramo G., et al. Electronic and optical properties of tetrapod quantum dots under applied electric and magnetic fields. *The European Physical Journal Plus*, 2024, vol. 139, no. 4, pp. 311. doi: 10.1140/epjp/s13360-024-05089-z
23. Dos Santos C.H.D., Ferreira D.L., Cocca L.H.Z., Mourão R.S., Schiavon M.A., Mendonça C.R., et al. Size-dependent photoinduced transparency in colloidal CdTe quantum dots in the strong confinement regime: An inverse linear relationship. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2023, vol. 25, no. 1, pp. 359–365. doi: 10.1039/d2cp05006d
24. Klimeck G., Korkusinski M., Xu H., Lee S., Goasguen S., Saied F. Building and deploying community nanotechnology software tools on nanoHUB.org — atomistic simulations of multimillion-atom quantum dot nanostructures. *Proc. of the 5th IEEE Conference on Nanotechnology*, 2005, vol. 2, pp. 807. doi: 10.1109/NANO.2005.1500654
25. Daibagya D.S., Ambrozevich S.A., Smirnov M.S., Ovchinnikov O.V., Osadchenko A.V., Zakharchuk I.A., et al. Enhanced photoluminescence of CdTe/SiO_2 quantum dots: Impact of ambient conditions and laser excitation regime on surface trap passivation. *Materials Letters*, 2025, vol. 398, pp. 138968. doi: 10.1016/j.matlet.2025.138968
26. Miracle J., Nichols A., Cantrell S., Myers T., Theodoropoulou N. Epitaxial growth and structural characterization of PbTe thin films on CdTe (211) B: Evidence of a 180° twisted interface. *Crystal Growth & Design*, 2026, vol. 26, no. 9, pp. 3267–3275. doi: 10.1021/acs.cgd.5c01542
27. Ngo C.Y., Yoon S.F., Fan W.J., Chua S.J. Effects of size and shape on electronic states of quantum dots. *Physical Review B*, 2006, vol. 74, no. 24, pp. 245331. doi: 10.1103/PhysRevB.74.245331
28. Zhang Y., Wu G. Quantum dot materials and optoelectronic devices. *Nanomaterials*, 2025, vol. 15, no. 23, pp. 1812. doi: 10.3390/nano15231812
29. Zhang C., Niu Y., Zhang Z., Wu B., Zhen H., Huang G., et al. Recent progress in infrared detection from material advances to integrated intelligent systems. *Advanced Materials*, 2026, vol. 38, no. 20, pp. e21432. doi: 10.1002/adma.202521432
30. Mantashian G.A., Mantashyan P.A., Hayrapetyan D.B. Modeling of quantum dots with the finite element method. *Computation*, 2023, vol. 11, no. 1, pp. 5. doi: 10.3390/computation11010005
31. Imran A., Jiang J., Eric D., Yousaf M. Size and shape dependent optical properties of InAs quantum dots. *Proceedings of SPIE*, 2017, vol. 10622, pp. 1062209. doi: 10.1117/12.2286297

Автор

Дайбаге Даниил Саюзович — младший научный сотрудник, Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Москва, 119991, Российская Федерация, SC 57673090900, https://orcid.org/0000-0003-1944-1546, daibagya@mail.ru

Author

Daniil S. Daibagya — Junior Researcher, Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences, Moscow, 119991, Russian Federation, SC 57673090900, https://orcid.org/0000-0003-1944-1546, daibagya@mail.ru

Статья поступила в редакцию 10.07.2026
Одобрена после рецензирования 23.08.2026
Принята к печати 21.09.2026

Received 10.07.2026
Approved after reviewing 23.08.2026
Accepted 21.09.2026

Работа доступна по лицензии
Creative Commons
«Attribution-NonCommercial»