ISSN 1024-588X. Вісник Львівського університету. Серія фізична. 2024. Випуск 61. С. 113–125
Visnyk of the Lviv University. Series Physics. 2024. Issue 61. P. 113–125

УДК 535.5, 535.3
PACS 61.46.+w

DOI: https://doi.org/10.30970/vph.61.2024.113

Розсіяння світла на однорідних сферичних наночастинках CdSe поміщених в різні матриці

Г. Ільчук[1], Е. Височанська[1], І. Семків[1], М. Рудиш[2], А. Кашуба[1]

[1] *Національний університет "Львівська політехніка", вул. С. Бандери, 12, 79013, Львів, Україна*
e-mail: andrii.i.kashuba@lpnu.ua
[2] *Львівський національний університет імені Івана Франка, вул. Кирила і Мефодія, 8, 79005, Львів, Україна*

Проведено дослідження оптичних властивостей сферичних наночастинок CdSe з радіусом (R) від 1 до 100 нм. Усі розрахунки, враховуючи розсіювання та поглинання світла сферичними наночастинками CdSe, проведено за допомогою теорії Мі. Для розрахунку використано взаємодію світла з однорідними сферичними наночастинками CdSe, що перебувають у вакуумі, воді та SiO_2. Проаналізовано коефіцієнти екстинкції, розсіювання та поглинання. Також отримано розподіл амплітуди електричного поля розсіяного світла і коефіцієнт поляризації для сферичних наночастинок CdSe.

Ключові слова: наночастинки CdSe, розсіювання та поглинання світла, теорія квантових точок, II–VI.

Вступ

Одна з головних унікальних властивостей квантових точок, або наночастинок виникає завдяки квантовому обмеженню носіїв заряду [1]. У більшості напівпровідників ефект квантового обмеження виявляється, коли розмір наночастинок менший за 10 нм [1]. Наночастинки селеніду кадмію є важливим напівпровідниковим матеріалом групи II-VI з вузькою шириною забороненої зони та великим радіусом збудження Бора (∼5 нм).

Наночастинки CdSe було синтезовано методом контрольованої колоїдної обробки [2–4]. Розуміння чинників, які контролюють основні енергетичні процеси в наночастинках CdSe [2, 5–8], дало змогу знайти технологічне застосування цих наночастинок як флуоресцентних зондів [8, 9], регульованих поглиначів і випромінювачі у нанорозмірній електроніці [10], а також як лазерів на квантових точках [11]. Тому кластери та наночастинки CdSe є перспективними системами для проведення

теоретичних досліджень, пошуку шляхів модифікації їхніх властивостей. Це насамперед пов'язано з їхніми оптичними та електронними властивостями, які залежать від розміру. Іншою перевагою є можливість синтезу кластерів/наночастинок CdSe з вузьким розподілом розмірів, про що повідомлялося в кількох експериментальних працях [12–15]. Отже, це дало змогу провести порівняльний аналіз експериментальних результатів з теоретичними даними.

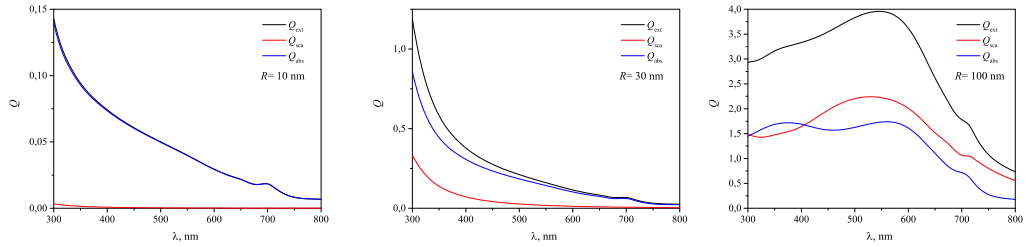

Рис. 1: Коефіцієнт екстинкції (Q_{ext}), розсіювання (Q_{sca}) і поглинання (Q_{abs}) сферичних наночастинок CdSe з $R = 30$, 50 і 100 нм у вакуумі (подробиці на рис.)
Fig. 1: Extinction (Q_{ext}), scattering (Q_{sca}), and absorption (Q_{abs}) efficiencies of spherical CdSe nanoparticles with $R = 30$, 50, and 100 nm (details on legend to figure) in vacuum

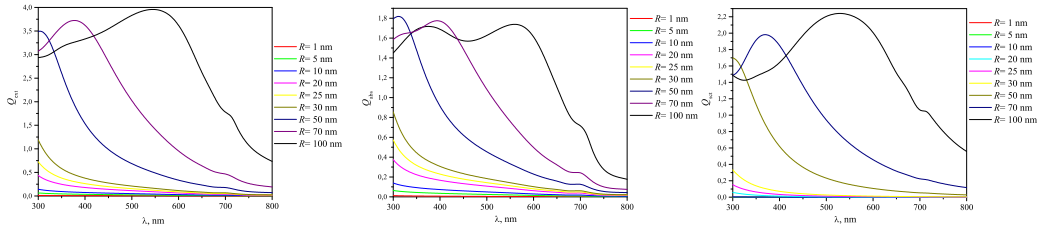

Рис. 2: Спектральна залежність коефіцієнтів екстинкції (Q_{ext}), розсіювання (Q_{sca}) і поглинання (Q_{abs}) сферичних наночастинок CdSe у вакуумі
Fig. 2: Spectral dependence of the extinction (Q_{ext}), scattering (Q_{sca}), and absorption (Q_{abs}) efficiencies for spherical CdSe nanoparticles in vacuum

Матриці для наночастинок CdSe можуть бути твердими або рідкими, органічними або неорганічними. Незалежно від використовуваних матриць (твердих або рідких), одним із основних оптичних параметрів є розсіювання світла. Як відомо, фотони найсильніше розсіюються тими структурами, розмір яких відповідає довжині хвилі фотона [16]. Це підтверджує важливість дослідження коефіцієнтів екстинкції, розсіювання та поглинання сферичних наночастинок.

У цьому дослідженні оптичні властивості сферичних наночастинок CdSe з радіусом (R) від 1 до 100 нм вивчали за допомогою теорії Мі [17–19]. Проаналізовано взаємодію світла з однорідними сферичними наночастинками CdSe в різних матрицях.

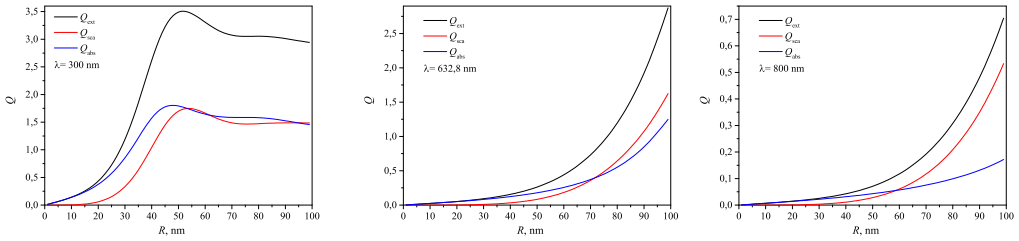

Рис. 3: Залежність коефіцієнтів екстинкції (Q_{ext}), розсіювання (Q_{sca}) і поглинання (Q_{abs}) від розміру сферичних наночастинок CdSe у вакуумі
Fig. 3: Extinction (Q_{ext}), scattering (Q_{sca}), and absorption (Q_{abs}) efficiencies dependence on the size of spherical CdSe nanoparticles in vacuum

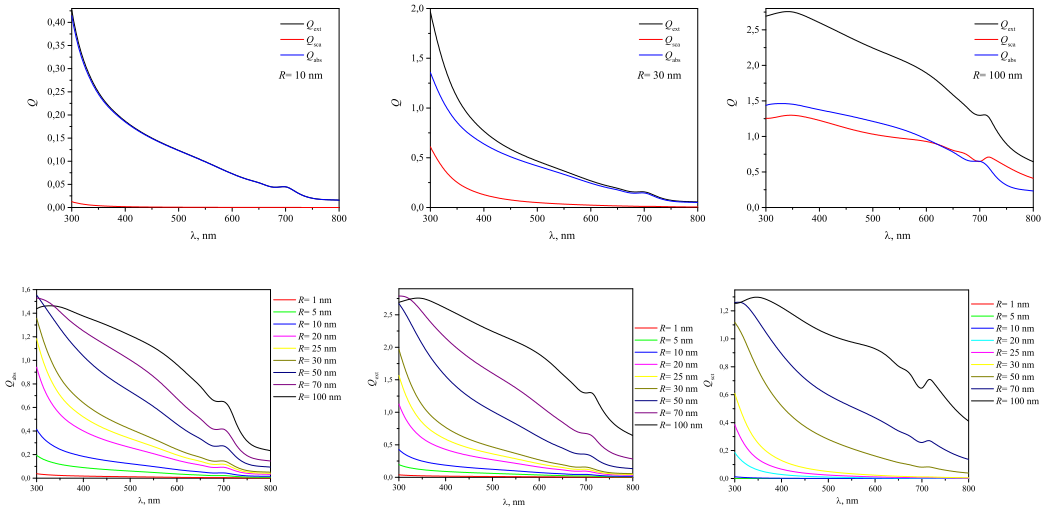

Рис. 4: Спектральна залежність коефіцієнтів екстинкції (Q_{ext}), розсіювання (Q_{sca}) і поглинання (Q_{abs}) сферичних наночастинок CdSe у SiO_2
Fig. 4: Extinction (Q_{ext}), scattering (Q_{sca}), and absorption (Q_{abs}) efficiencies of spherical CdSe nanoparticles in SiO_2

1. Метод розрахунку

Для розрахунку взаємодії світла зі сферичними наночастинками CdSe використали теорію Мі [17–19]. Для моделювання використовували спектральний діапазон від 300 до 800 нм. Радіус (R) сферичних наночастинок CdSe змінювався від 1 до 100 нм. Як матрицю (середовища) для наночастинок CdSe використовували вакуум, воду та SiO_2.

Коефіцієнти екстинкції (Q_{ext}), розсіювання (Q_{sca}) та поглинання (Q_{abs}) сфери-

чної наночастинки можуть бути розраховані за допомогою рівнянь 1–3 [20]:

$$Q_{ext} = \frac{2}{x^2}\Sigma_{n=1}^{\infty}(2n+1)Re(a_n + b_n), x = \frac{2\pi R n_m}{\lambda} \tag{1}$$

$$Q_{sct} = \frac{2}{x^2}\Sigma_{n=1}^{\infty}(2n+1)(\mid a_n \mid^2 + \mid b_n \mid^2) \tag{2}$$

$$Q_{abs} = Q_{ext} - Q_{sct} \tag{3}$$

У рівняннях 1 та 2, a_n і b_n – це коефіцієнти розсіювання [19], n_m – показник заломлення середовища

$$a_n = \frac{\mu m^2 j_n(mx)[xj_n(x)] - \mu_1 m^2 j_n(x)[mxj_n(mx)]}{\mu m^2 j_n(mx)[xh_n^{(1)}(x)] - \mu_1 h_n^{(1)}(x)[mxj_n(mx)]} \tag{4}$$

$$b_n = \frac{\mu_1 j_n(mx)[xj_n(x)] - \mu j_n(x)[mxj_n(mx)]}{\mu_1 j_n(mx)[xh_n^{(1)}(x)] - \mu h_n^{(1)}(x)[mxj_n(mx)].} \tag{5}$$

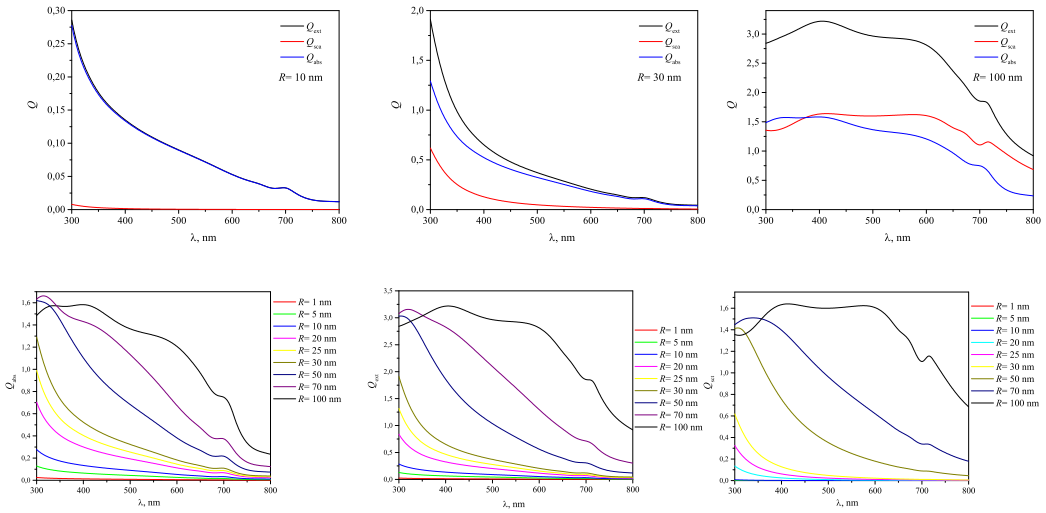

Рис. 5: Спектральна залежність коефіцієнтів екстинкції (Q_{ext}), розсіювання (Q_{sca}) і поглинання (Q_{abs}) сферичних наночастинок CdSe у воді
Fig. 5: Extinction (Q_{ext}), scattering (Q_{sca}), and absorption (Q_{abs}) efficiencies of spherical CdSe nanoparticles in water

У рівняннях 4 і 5: x — параметр розміру (див. рівняння 1); m — відносний показник заломлення; μ_1 та μ — магнітні властивості частинки та середовища, відповідно; $j_n(\rho)$ та $h_n^{(1)}(\rho)$ — сферичні функції Бесселя першого та третього типів, відповідно (сферичні функції Ханкеля першого типу). Показник заломлення для CdSe було взято з [21].

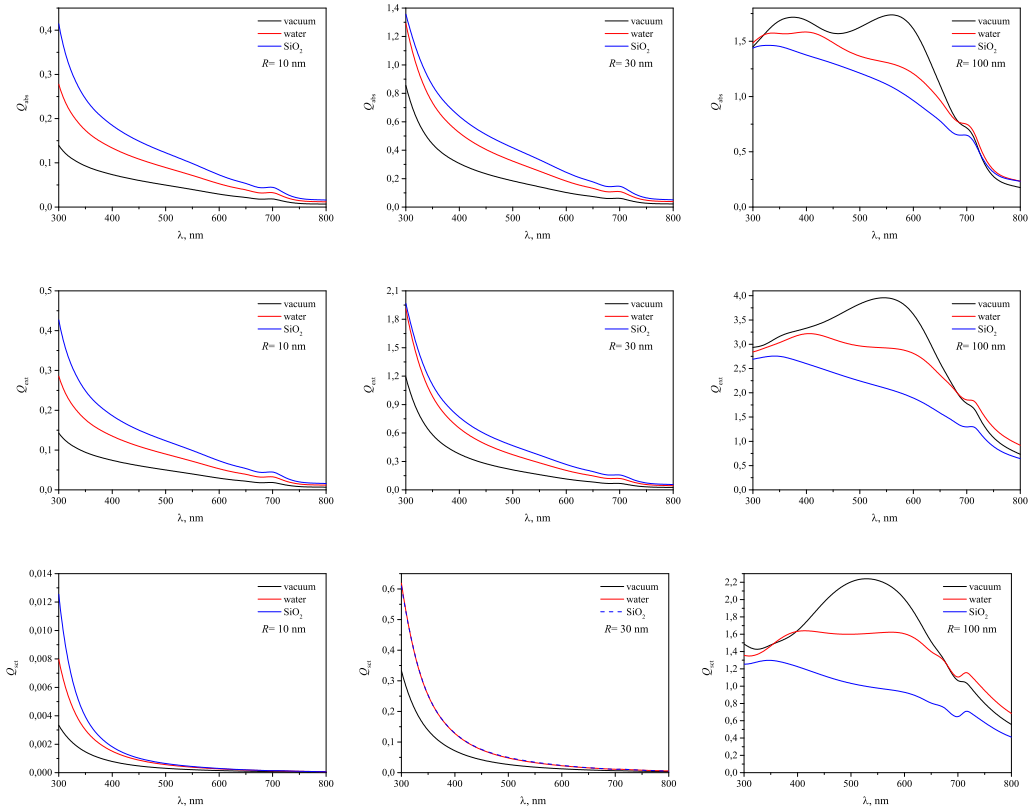

Рис. 6: Спектральна залежність коефіцієнтів екстинкції (Q_{ext}), розсіювання (Q_{sca}) і поглинання (Q_{abs}) сферичних наночастинок CdSe у різних матрицях (деталі на рис.)
Fig. 6: Extinction (Q_{ext}), scattering (Q_{sca}), and absorption (Q_{abs}) efficiencies of spherical CdSe nanoparticles (details on legend to figure) in different matrices

2. Результати розрахунків та обговорення

На рис. 1 показано спектральну залежність коефіцієнта екстинкції (Q_{ext}), розсіювання (Q_{sca}) та поглинання (Q_{abs}) сферичних наночастинок CdSe з радіусами R = 10, 30 та 100 нм. Поглинання є основним процесом взаємодії світла з наночастинками CdSe, розмір яких менший за 30 нм ($R<$ 30 нм). Зі збільшенням розміру наночастинок CdSe ($R \longrightarrow$ 100 нм), коефіцієнти екстинкції (Q_{ext}) та розсіювання (Q_{sca}) стають переважальними.

Спектральна поведінка коефіцієнтів екстинкції (Q_{ext}), розсіювання (Q_{sca}) та поглинання (Q_{abs}) для сферичних наночастинок CdSe з різними радіусами зображена на рис. 2. Спектральні залежності коефіцієнтів Q_{ext}, Q_{sca} та Q_{abst} для наночастинок CdSe з радіусом $R \leq 30$ нм мають аналогічну поведінку. Середня інтенсивність Q_{ext}, Q_{sca} та Q_{abs} збільшується зі збільшенням розміру наночастинок (радіусу). Аб-

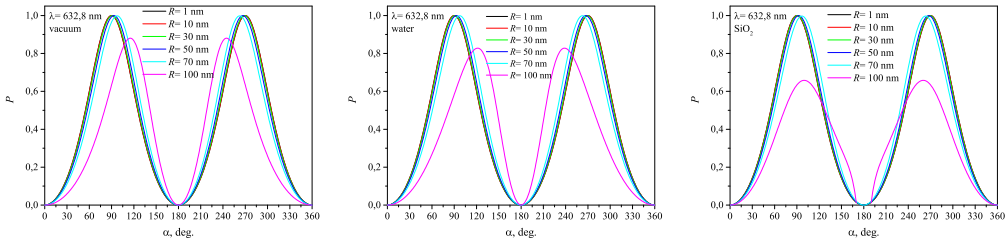

Рис. 7: Коефіцієнт поляризації сферичних наночастинок CdSe в різних матрицях (деталі на рис.)
Fig. 7: The polarization ratio of spherical CdSe nanoparticles in different matrices (details on legend to figure)

солютні значення Q_{ext}, Q_{sca} та Q_{abs} виявляють різну поведінку в цих спектральних діапазонах (приклад, на рис. 3 зображена залежність Q_{ext}, Q_{sca} та Q_{abst} від радіусу наночастинок CdSe для λ= 300, 632,8 та 800 нм). Абсолютні значення Q_{ext}, Q_{sca} та Q_{abst} для λ= 632,8 та 800 нм підтверджують аналогічну поведінку, а саме зростають зі збільшенням розміру наночастинок. Однак для λ= 300 нм спостерігається складніша поведінка, а саме, абсолютні значення Q_{ext}, Q_{sca} та Q_{abst} збільшуються зі збільшенням розміру наночастинок для $R < 45$ нм і зменшуються для $R > 45$ нм.

Наступний етап дослідження – з'ясування впливу середовища (рідкі та тверді матриці) на процеси розсіювання та поглинання світла на однорідних сферичних наночастинках CdSe. Як рідку та тверду матриці для наночастинок CdSe використовували воду та SiO_2, відповідно. На рис. 4 і 5 зображено коефіцієнти екстинкції (Q_{ext}), розсіювання (Q_{sca}) та поглинання (Q_{abs}) сферичних наночастинок CdSe (R = 10, 30 та 100 нм) у воді та SiO_2, відповідно.

Однорідні сферичні наночастинки CdSe, поміщені в рідкі та тверді матриці (в нашому випадку у воду та SiO_2, відповідно), демонструють подібну спектральну поведінку, як і у вакуумі (див. рис. 6). Однак спостерігаємо зміни в абсолютній інтенсивності коефіцієнтів екстинкції (Q_{ext}), розсіювання (Q_{sca}) та поглинання (Q_{abs}), коли наночастинки CdSe перебувають у воді або SiO_2 (див. рис. 6). Виявлено, що для наночастинок CdSe, з радіусом менше 45 нм, коефіцієнти Q_{sca}, Q_{ext} та Q_{abs} демонструють аналогічну поведінку. А саме, вони зростають із збільшенням показника заломлення матриці ($n_{water} \simeq 1{,}39_{\lambda=200\text{нм}} \simeq 1{,}33_{\lambda=1000\text{нм}}$ [22], $n_{SiO2} \simeq 1{,}54_{\lambda=210\text{нм}} \simeq 1{,}45_{\lambda=1000\text{нм}}$ [23]), в яку поміщено наночастинки. Натомість для наночастинок великих розмірів ($R \longrightarrow 100$ нм) спостерігається зворотна закономірність (зменшення коефіцієнтів Q_{sca}, Q_{ext} та Q_{abs} зі зростанням показника заломлення матриці).

Коефіцієнт поляризації розраховували за допомогою рівняння 6. Відносну інтенсивність розсіяного світла можна розрахувати за допомогою рівнянь 7 і 8, якщо падаюче світло повністю поляризоване паралельно до площини розсіювання (I_{par}) та перпендикулярно до площини розсіювання (I_{per}), відповідно. В рівнянні 7 та 8, π_n і τ_n — це функції, що залежать від кута

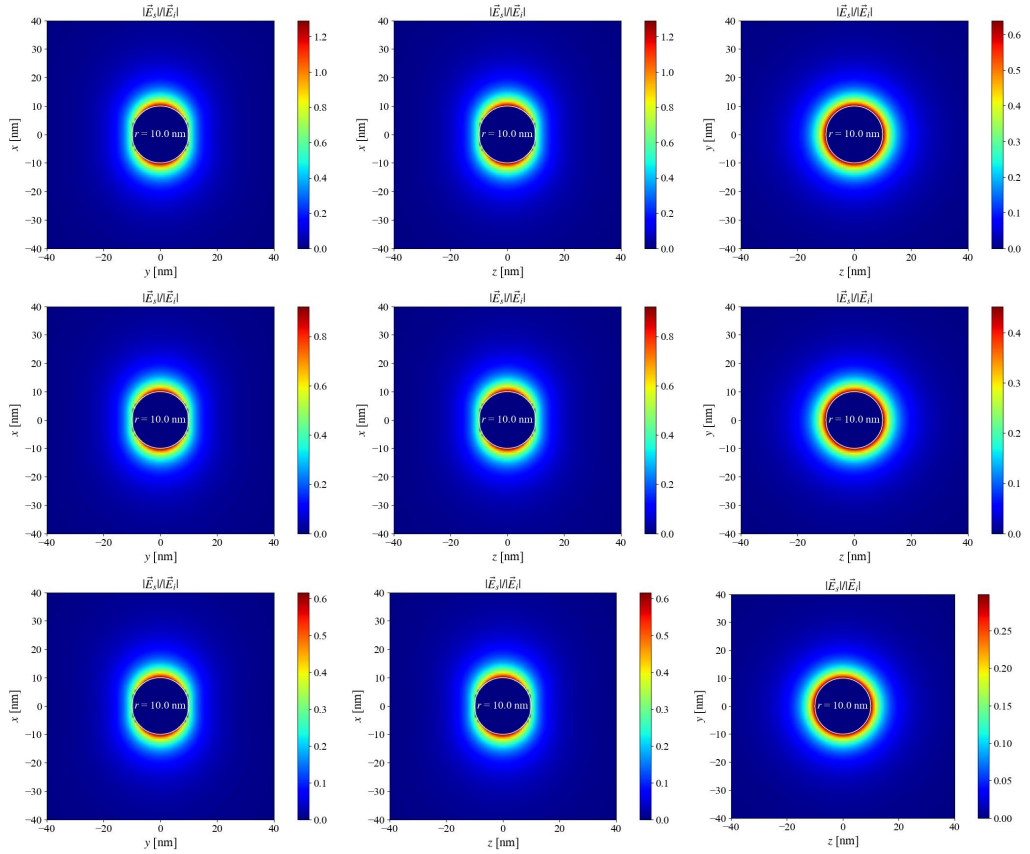

Рис. 8: Розподіл амплітуди розсіяного електричного поля (λ = 632,8 нм) на сферичних наночастинках CdSe з R = 10 нм

Fig. 8: The distribution of the amplitude of scattering electric field (λ = 632.8 nm) of spherical CdSe nanoparticles with R = 10 nm in vacuum (top), water (center), and SiO_2 (bottom)

$$P = \frac{I_{per} - I_{par}}{I_{per} + I_{par}} \tag{6}$$

$$I_{par} = \mid \Sigma_n \frac{2n+1}{n(n+1)} (a_n \tau_n + b_n \pi_n) \mid^2 \tag{7}$$

$$I_{per} = \mid \Sigma_n \frac{2n+1}{n(n+1)} (a_n \pi_n + b_n \tau_n) \mid^2 . \tag{8}$$

Незалежно від розміру та складу сферичної наночастинки, виконується рівність $P(0^o)$=$P(180^o)$= 0 [20].

На рис. 7 зображено коефіцієнт поляризації сферичних наночастинок CdSe в різних матрицях для λ= 632,8 нм. Згідно з критеріями, наведеними в [20], якщо $P > 0$,

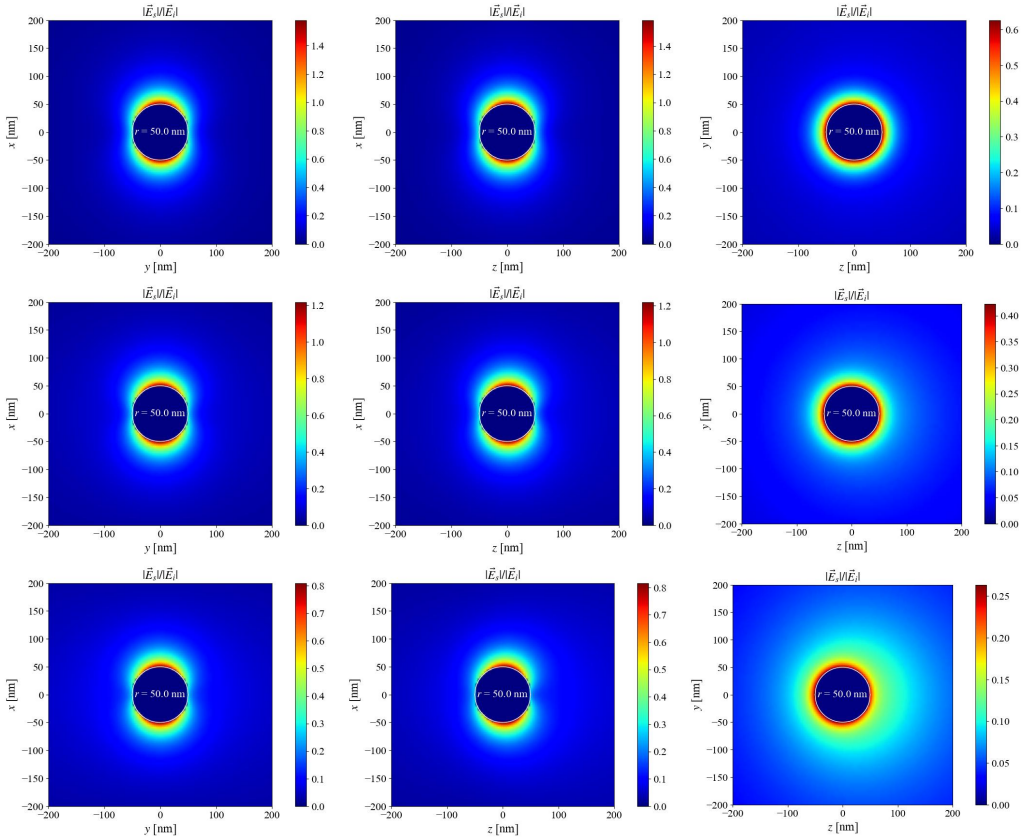

Рис. 9: Розподіл амплітуди розсіяного електричного поля (λ = 632,8 нм) на сферичних наночастинках CdSe з R = 50 нм

Fig. 9: The distribution of the amplitude of scattering electric field (λ = 632.8 nm) of spherical CdSe nanoparticles with R = 50 nm in vacuum (top), water (center), and SiO_2 (bottom)

то розсіяне світло частково поляризоване перпендикулярно до площини розсіювання, а якщо $P < 0$ — частково поляризоване паралельно до площини розсіювання. Можна припустити, що розсіяне світло частково поляризоване перпендикулярно до площини розсіювання для наночастинок CdSe. Також було помічено зменшення максимального значення коефіцієнта поляризації зі збільшенням розміру наночастинок CdSe.

З метою підтвердження отриманих результатів, було проведено розрахунок розподілу амплітуди розсіяного електричного поля (λ= 632,8 нм) для сферичних наночастинок CdSe різних розмірів у вакуумі, воді та SiO_2 (див. рис. 8 і 9). Цей розрахунок було виконано з використанням програмного пакета PyMieLab-V1.0 [20]. Як зазначалось раніше, амплітуда розсіяного електричного поля зростає зі збільшенням розміру частинок. Також було підтверджено, що розсіювання світла збільшується зі зміною матриці. Як видно з рис. 8 і 9, амплітуда розсіяного електрично-

го поля збільшується зі збільшенням показника заломлення матриці ($n_{vacuum} = 1$, n_{water} ∼1,33 [22], n_{SiO2} ∼1,46 ($\lambda = 632{,}8$ нм) [23]).

Висновки

Оптичні властивості сферичних наночастинок CdSe з розміром (R) від 1 до 100 нм вивчали в рамках теорії Мі. Досліджено взаємодію світла з однорідними сферичними наночастинками CdSe, поміщеними в різні матриці (вакуум, вода та SiO_2).

Розраховано спектральну поведінку (300–800 нм) коефіцієнтів екстинкції (Q_{ext}), розсіювання (Q_{sca}) та поглинання (Q_{abs}) для однорідних сферичних наночастинок CdSe. Підтверджено, що поглинання є основним процесом, який відповідає за взаємодію світла з наночастинками CdSe, розмір яких менше 30 нм ($R < 30$ нм).

Досліджено взаємодію світла з однорідними сферичними наночастинками CdSe, поміщеними в рідкі та тверді матриці (вода та SiO_2, відповідно). Коефіцієнти екстинкції (Q_{ext}), розсіювання (Q_{sca}) та поглинання (Q_{abs}) демонструють подібну спектральну поведінку для усіх досліджуваних матриць (вакуум, вода та SiO_2). З'ясовано, що інтенсивність коефіцієнтів екстинкції (Q_{ext}), розсіювання (Q_{sca}) та поглинання (Q_{abs}) залежить від показника заломлення матриці і зростає з його збільшенням.

Розраховано коефіцієнт поляризації сферичних наночастинок CdSe в різних матрицях для $\lambda = 632{,}8$ нм. Підтверджено визначені результати, використовуючи розподіл амплітуди розсіяного електричного поля ($\lambda = 632{,}8$ нм) для сферичних наночастинок CdSe різних розмірів у різних матрицях (вакуум, вода та SiO_2).

Подяка

Дослідження виконано в межах проєкту молодих вчених Міністерства освіти і науки України (No 0124U000760).

---

1. Wageh S. Optical properties and activation energy of a novel system of Cdte nanoparticles embedded in phosphate glass matrix / S. Wageh, A. Higazy, M. A. Algradee// Journal of Modern Physics. – 2011. – Vol. 2, No. 8. – P. 913–921. doi: 10.4236/jmp.2011.28108.
2. Jose. S. Structure-property rorrelation of CdSe clusters using experimental results and first-principles DFT calculations / R. Jose, N. U. Zhanpeisov, H. Fukumura, Y. Baba, M. Ishikawa // J. AM. CHEM. SOC. – 2006. – Vol. 128. – P. 629–636. doi: 10.1021/ja0565018.
3. Murray C. B. Synthesis and characterization of monodisperse nanocrystals and close-packed nanocrystal assemblies / C. B. Murray, C. R. Kagan, M. G. Bawendi // Annu. Rev. Mater. Sci. – 2000. – Vol. 30. – P. 545–610. doi: 10.1146/annurev.matsci.30.1.545.
4. Qu L. Alternative routes toward high quality CdSe nanocrystals / L. Qu, Z. A. Peng, X. Peng // Nano Lett. – 2001. – Vol. 1. – P. 333–337. doi: 10.1021/nl0155532.

5. Nirmal M. Observation of the "Dark exciton" in CdSe quantum dots / M. Nirmal, D. J. Norris, M. Kuno, M. G. Bawendi, A. L. Efros, M. Rosen // Phys. Rev. Lett. – 1995. – Vol. 75. – P. 3728. doi: 10.1103/PhysRevLett.75.3728.
6. Efros A. L. Band-edge exciton in quantum dots of semiconductors with a degenerate valence band: Dark and bright exciton states / A. L. Efros, M. Rosen, M. Kuno, M. Nirmal, D. J. Norris, M. G. Bawendi // Phys. Rev. B. – 1996. – Vol. 54. – P. 4843. doi: 10.1103/PhysRevB.54.4843.
7. Ebenstein Y. Fluorescence quantum yield of CdSe/ZnS nanocrystals investigated by correlated atomic-force and single-particle fluorescence microscopy / Y. Ebenstein, T. Mokari, U. Banin // Appl. Phys. Lett. – 2002. – Vol. 80. – P. 4033–4035. doi: 10.1063/1.1482785.
8. Bakalova R. Quantum dot anti-CD conjugates: Are they potential photosensitizers or potentiators of classical photosensitizing agents in photodynamic therapy of cancer? / R. Bakalova, H. Ohba, Z. Zhelev, T. Nagase, R. Jose, M. Ishikawa, Y. Baba // Nano Lett. – 2004. – Vol. 4. – P. 1567–1573. doi: 10.1021/nl049627w.
9. Michalet X. Properties of fluorescent semiconductor nanocrystals and their application to biological labeling / X. Michalet, F. Pinaud, T. D. Lacoste, M. Dahan, M. P. Bruchez, A. P. Alivisatos, S. Weiss // Single Mol. – 2001. – Vol. 2. – P. 261–276. doi: 10.1002/1438-5171(200112)2:4<261::AID-SIMO261>3.0.CO;2-P.
10. Schlamp M. C. Improved efficiencies in light emitting diodes made with CdSe(CdS) core/shell type nanocrystals and a semiconducting polymer / M. C. Schlamp, X. Peng, A. P. Alivisatos // J. Appl. Phys. – 1997. – Vol. 82. – P. 5837–5842. doi: 10.1063/1.366452.
11. Klimov V. I. Optical gain and stimulated emission in nanocrystal quantum dots / V. I. Klimov, A. A. Mikhailovsky, S. Xu, A. Malko, J. A. Hollingsworth, C. A. Leatherdale, H.-J. Eisler, M. G. Bawendi // Science. – 2000. – Vol. 290. – P. 314–317. doi: 10.1126/science.290.5490.31.
12. Del Puerto M. L. Ab initio methods for the optical properties of CdSe clusters / M. L. del Puerto, M. L. Tiago, J. R. Chelikowsky // Phys. Rev. B. – 2008. – Vol. 77. – P. 045404. doi: 10.1103/PhysRevB.77.045404.
13. Hines M. Synthesis and characterization of strongly luminescing ZnS-capped CdSe nanocrystals / M. Hines, P. Guyot-Sionnest // J. Phys. Chem. – 1996. – Vol. 100. – P. 468–471. doi: 10.1021/jp9530562.
14. Murray C. Synthesis and characterization of nearly monodisperse CdE (E = sulfur, selenium, tellurium) semiconductor nanocrystallites / C. Murray, D. Norris, M. Bawendi // J. Am. Chem. Soc. – 1993. – Vol. 115. – P. 8706–8715. doi: 10.1021/ja00072a025.
15. Soloviev V. Size-dependent optical spectroscopy of a homologous series of CdSe cluster molecules / V. Soloviev, A. Eichhfer, D. Fenske, U. Banin // J. Am. Chem. Soc. – 2001. – Vol. 123. – P. 2354–2364. doi: 10.1021/ja003598j.
16. Pu Y. 11 - Basic optical scattering parameter of the brain and prostate tissues in the spectral range of 400–2400 nm / Y. Pu, J. Chen, W. Wang, R.R. Alfano // Neurophotonics and Biomedical Spectroscopy. – 2019. – P. 229–252. doi: 10.1016/B978-0-323-48067-3.00011-1.
17. Wriedt T. Mie theory: A review. In the mie theory. Springer Series in Optical Sciences / eds. W. Hergert, T. Wriedt, Berlin, Heidelberg: Springer, 2021. 169

p.doi: 10.1007/978-3-642-28738-1.
18. van de Hulst H. C. Light scattering by small particles. New York: Dover Publications, Inc, 1981.
19. Bohren C. F., Huffman D. R. Absorption and scattering of light by small particles. New York: Wiley, 1983. doi: 10.1002/9783527618156.
20. Ma D. PyMieLab-V1.0: A software for calculating the light scattering and absorption of spherical particles / D. Ma, P. Tuersun, L. Cheng, Y. Zheng, R. Abulaiti // Heliyon. – 2022. – Vol. 8, No. 11. – P. e11469. doi: 10.1016/j.heliyon.2022.e11469.
21. Ninomiya S. Optical properties of cubic and hexagonal CdSe / S. Ninomiya, S. Adachi // J. Appl. Phys. – 1995. – Vol. 78. – P. 4681–4689. doi: 10.1063/1.359815.
22. Hale G. M. Optical constants of water in the 200-nm to 200-μm wavelength region / G. M. Hale, M.R. Querry // Appl. Opt. – 1973. – Vol. 12, No. 3. – P. 555–563. doi: 10.1364/AO.12.000555.
23. Tan C. Z. Determination of refractive index of silica glass for infrared wavelengths by IR spectroscopy / C. Z. Tan // J. Non-Cryst. Solids. – 1998. – Vol. 223, No. 1–2. – P. 158–163. doi: 10.1016/S0022-3093(97)00438-9.

References

1. S. Wageh, A. Higazy, M. A. Algradee, Journal of Modern Physics. **2**(8), 913 (2011). doi: 10.4236/jmp.2011.28108.
2. R. Jose, N. U. Zhanpeisov, H. Fukumura, Y. Baba, M. Ishikawa, J. AM. CHEM. SOC. **128**, 629 (2006).doi: 10.1021/ja0565018.
3. C. B. Murray, C. R. Kagan, M. G. Bawendi, Annu. Rev. Mater. Sci. **30**, 545 (2000). doi: 10.1146/annurev.matsci.30.1.545.
4. L. Qu, Z. A. Peng, X. Peng, Nano Lett. **1**, 333 (2001). doi: 10.1021/nl0155532.
5. M. Nirmal, D. J. Norris, M. Kuno, M. G. Bawendi, A. L. Efros, M. Rosen, Phys. Rev. Lett. **75**, 3728 (1995). doi: 10.1103/PhysRevLett.75.3728.
6. A. L. Efros, M. Rosen, M. Kuno, M. Nirmal, D. J. Norris, M. G. Bawendi, Phys. Rev. B. **54**, 4843 (1996). doi: 10.1103/PhysRevB.54.4843.
7. Y. Ebenstein, T. Mokari, U. Banin, Appl. Phys. Lett. **80**, 4033 (2002). doi: 10.1063/1.1482785.
8. R. Bakalova, H. Ohba, Z. Zhelev, T. Nagase, R. Jose, M. Ishikawa, Y. Baba, Nano Lett. **4**, 1567 (2004). doi: 10.1021/nl049627w.
9. X. Michalet, F. Pinaud, T. D. Lacoste, M. Dahan, M. P. Bruchez, A. P. Alivisatos, S. Weiss, Single Mol. **2**, 261 (2001). doi: 10.1002/1438-5171(200112)2:4<261::AID-SIMO261>3.0.CO;2-P.
10. M. C. Schlamp, X. Peng, A. P. Alivisatos, J. Appl. Phys. **82**, 5837 (1997). doi: 10.1063/1.366452.
11. V. I. Klimov, A. A. Mikhailovsky, S. Xu, A. Malko, J. A. Hollingsworth, C. A. Leatherdale, H.-J. Eisler, M. G. Bawendi, Science. **290**, 314 (2000). doi: 10.1126/science.290.5490.31.
12. M. L. del Puerto, M. L. Tiago, J. R. Chelikowsky, Phys. Rev. B. **77**, 045404 (2008). doi: 10.1103/PhysRevB.77.045404.

13. M. Hines, P. Guyot-Sionnest, J. Phys. Chem. **100**, 468 (1996). doi: 10.1021/jp9530562.
14. C. Murray, D. Norris, M. Bawendi, J. Am. Chem. Soc. **115**, 8706 (1993). doi: 10.1021/ja00072a025.
15. V. Soloviev, A. Eichhfer, D. Fenske, U. Banin, J. Am. Chem. Soc. **123**, 2354 (2001). doi: 10.1021/ja003598j.
16. Y. Pu, J. Chen, W. Wang, R. R. Alfano, Neurophotonics and Biomedical Spectroscopy. 229 (2019). doi: 10.1016/B978-0-323-48067-3.00011-1.
17. W. Hergert, T. Wriedt (eds), *Mie Theory: A Review* (Springer, Berlin, Heidelberg, 2012). doi: 10.1007/978-3-642-28738-1.
18. H.C. van de Hulst *Light Scattering by Small Particles* (Dover Publications, Inc., New York, 1981).
19. C. F. Bohren, D. R. Huffman *Absorption and Scattering of Light by Small Particles* (Wiley, New York, 1983). doi: 10.1002/9783527618156.
20. D. Ma, P. Tuersun, L. Cheng, Y. Zheng, R. Abulaiti, Heliyon. **8**(11), e11469 (2022). doi: 10.1016/j.heliyon.2022.e11469.
21. S. Ninomiya, S. Adachi, J. Appl. Phys. **78**, 4681 (1995). doi: 10.1063/1.359815.
22. G. M. Hale, M. R. Querry, Appl. Opt. **12**(3), 555 (1973). doi: 10.1364/AO.12.000555.
23. C. Z. Tan, J. Non-Cryst. Solids. **223**(1–2), 158 (1998). doi: 10.1016/S0022-3093(97)00438-9.

Стаття надійшла до редколегії: 24.10.2024
Прийнята до друку: 26.11.2024

Light scattering on homogeneous spherical CdSe nanoparticles placed in different matrices

H. Ilchuk[1], E. Vysochanska[1], I. Semkiv[1], M. Rudysh[2], A. Kashuba[1]

[1]*Lviv Polytechnic National University,*
12, S. Bandera St., 79013, Lviv, Ukraine
e-mail: andrii.i.kashuba@lpnu.ua
[2]*Ivan Franko National University of Lviv,*
8, Kyrylo and Mephodiy St., 79005, Lviv, Ukraine

CdSe nanoparticles are critical II-VI group semiconducting material with a narrow bulk band gap and a high excitation Bohr radius. This parameter makes studying quantum confinement effects on the higher particle size possible. Optical properties of the spherical CdSe nanoparticles with a size (R) between 1 and 100 nm have been studied in the framework of Mie theory. The light interaction with the homogeneous spherical CdSe nanoparticles maintained in different matrices (vacuum, water, and SiO_2) is studied. Regardless of the matrices used (solid or liquid), one of the leading optical parameters is the scattering of light. As known, the photons are most strongly scattered by those structures whose size matches the photon wavelength. This allows pointing out the importance of research extinction, scattering, and absorption efficiencies of spherical nanoparticles. The spectral behavior (200-800 nm) of the extinction (Q_{ext}), scattering (Q_{sca}), and absorption (Q_{abst}) efficiencies for homogeneous spherical CdSe nanoparticles were calculated. It was obtained that absorption is the primary process corresponding to light interaction with the small CdSe nanoparticles ($R<$ 30 nm). The light interaction with the homogeneous spherical CdSe nanoparticles maintained in liquid and solid matrices (water and SiO_2, respectively) was studied. The extinction (Q_{ext}), scattering (Q_{sca}), and absorption (Q_{abst}) efficiencies show similar spectral behavior for CdSe nanoparticles in the water and SiO_2 as in a vacuum. The polarization ratio of spherical CdSe nanoparticles in different matrices for $\lambda=$ 632.8 nm was calculated. The scattered light was obtained as partially polarized perpendicular to the scattering plane for CdSe nanoparticles. Finally, we confirm the above results by using near-field distribution at $\lambda=$ 632.8 nm of spherical CdSe nanoparticles with different sizes and in various matrices (vacuum, water, and SiO_2).

Key words: CdSe nanoparticles, light scattering and absorption, theory of quantum dots, II–VI.