

PACS: 73.21.La

ISSN 1729-4428 (Print)
ISSN 2309-8589 (Online)

Р.Я. Лешко¹, О.В. Лешко¹, І.В. Білінський^{1,2}, Я.Ю. Мельник², А.О. Очеретяний²,
О.І. Чекін², М.В. Квик²

Енергетичний спектр електрона в розділених та злитих сферичних квантових точках

¹Кафедра фізики та інформаційних систем, Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка,
м. Дрогобич, Україна, leshkoroman@dspu.edu.ua;

²Кафедра фізики та методики її викладання, Криворізький державний педагогічний університет, м. Кривий Ріг, Україна

Пропонується ефективний напіваналітичний підхід для моделювання електронних станів у злитих сферичних квантових точках, заснований на виведенні точного аналітичного перетворення Фур'є їх тривимірної функції форми за допомогою циліндричних функцій Бесселя. Цей математичний підхід дозволяє безпосередньо застосовувати метод розкладання за плоскими хвилями до систем зі складною, несепарабельною геометрією. Для гетероструктури GaAs/AlGaAs показано, що зменшення міжцентрової відстані D спричиняє монотонне зниження енергій електрона, тоді як у режимі сильного геометричного перекриття ($D < 2a$) квантово-механічна гібридизація розщеплює рівні енергії на симетричні та антисиметричні стани. Графіки просторового розподілу густини ймовірності наочно демонструють перехід від режиму слабого тунелювання (молекулярноподібні стани) до сильно зв'язаної наноструктури у формі гантелі.

Ключові слова: злиті та зв'язані квантові точки, енергетичний спектр електрона, гібридизація хвильових функцій.

Подано до редакції 12.03.2026 р.; прийнято до друку 02.09.2026 р.; опубліковано 18.09.2026 р.

Вступ

Напівпровідникові нанокристали, або квантові точки (КТ), належать до найінтенсивніше досліджуваних об'єктів сучасної фізики твердого тіла та нанотехнологій [1-3]. Завдяки тривимірному просторовому обмеженню носіїв заряду їхні електронні та оптичні властивості суттєво відрізняються від властивостей об'ємних матеріалів і можуть гнучко контролюватися зміною розмірів наночастинок. Це робить КТ ідеальними кандидатами для застосування у широкому спектрі сучасних приладів, включаючи лазери нового покоління, світлодіоди, сонячні елементи, біосенсори та як будівельні блоки для квантових інформаційних технологій [4-7].

Стрімкий розвиток технологій синтезу уможливив створення наноструктур з

безпрецедентним рівнем контролю над їх параметрами. На сьогодні існують різноманітні методи отримання КТ, серед яких молекулярно-пучкова епітаксія та колоїдний хімічний синтез займають провідні позиції [8-9]. Завдяки вдосконаленню цих методик вдається вирощувати нанокристали різних геометричних форм: сферичні, кубічні, пірамідальні, конічні, а також структури зі складною топологією, такі як квантові кільця або нанозірки [10-14]. Таке різноманіття форм і розмірів відкриває широкі можливості для точної інженерії енергетичного спектра та хвильових функцій носіїв заряду.

Особливий практичний інтерес становить метод колоїдного синтезу, який є технологічно доступним і дозволяє отримувати великі масиви наночастинок у розчинах. Проте при формуванні щільноупакованих плівок або надґраток, особливо після видалення стабілізуючих поверхневих лігандів, колоїдні КТ

часто зазнають агломерації та злиття [2, 3, 15-18]. Експериментальні дослідження та атомістичне моделювання свідчать, що дві окремі КТ можуть ефективно зливатися шляхом прямого поверхневого приєднання (орієнтованого прикріплення), формуючи єдину структуру — так звану зливу КТ або штучну молекулу [3, 17]. Цей процес супроводжується перебудовою кристалічної ґратки в контактній зоні та виникненням спільної електронної системи. Подібно до утворення ковалентних зв'язків у справжніх молекулах, злиття нанокристалів призводить до сильного квантового зв'язку, гібридизації хвильових функцій та розщеплення енергетичних рівнів на зв'язуючі та антизв'язуючі стани [2]. Крім того, впорядковане епітаксійне злиття нанокристалів сьогодні розглядається як один із найперспективніших шляхів створення двовимірних і тривимірних надґраток з унікальними властивостями перенесення заряду [15].

Теоретичне дослідження енергетичного спектра наноструктур складної форми та зв'язаних наноструктур є важливим для розуміння та передбачення їх фізичних властивостей. Електронні стани в ізольованих КТ різної симетрії детально вивчені в літературі [19-21]. Значна увага традиційно приділяється також системам з двох або більше КТ [22], які розділені фізичним потенціальним бар'єром (наприклад, шаром матриці) і взаємодіють виключно за рахунок квантовомеханічного тунелювання. Проте системи злитих КТ — у яких геометричний бар'єр між нанокристалом повністю зникає, а носії заряду вільно рухаються в об'єднаній області квантування складної форми — потребують окремого теоретичного підходу. Окремі аспекти електронної структури злитих КТ досліджувалися методами теорії функціонала густини та псевдопотенціалу [18], проте детальна і неперервна еволюція спектра при геометричному переході від двох ізольованих сфер до єдиної об'єднаної структури потребує подальшого систематичного вивчення.

У цій роботі ми досліджуємо енергетичний спектр електрона в системі двох сферичних квантових точок, порівнюючи режими ізольованих нанокристалів та структури, утвореної внаслідок їх злиття. Головна мета — проаналізувати еволюцію енергетичних рівнів та хвильових функцій електрона залежно від ступеня геометричного перекриття (відстані між центрами) КТ, а також побудувати аналітичну теорію для опису таких систем.

I. Модель гетеросистеми

Розглядається КТ, утворена перетином двох однакових сфер радіуса a , розділених міжцентровою відстанню D (рис. 1). Ефективна маса електрона всередині КТ позначається m_0 , тоді як сама КТ занурена в матрицю, що характеризується ефективною масою електрона m_1 .

Для математичного опису цієї складної геометрії зручно помістити початок декартової системи координат рівно посередині між центрами сфер на осі z . Таким чином, координати центрів є $(0, 0, -D/2)$ та

$(0, 0, D/2)$. Тривимірною геометричною меже зливої КТ може бути повністю визначена єдиною аналітичною функцією форми r , яка дорівнює одиниці всередині області квантування і нулю зовні:

$$f(r) = \begin{cases} 1, & \text{in QD} \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (1)$$

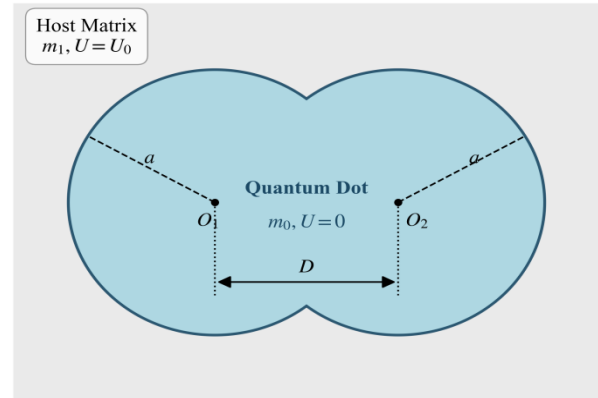


Рис. 1. Схематичний поперечний переріз моделюваної КТ, утвореної двома однаковими сферами радіуса a , які перетинаються. Відстань між центрами сфер (O_1 та O_2) позначена D .

Використовуючи цю функцію форми, просторовий розподіл потенціалу обмеження $U(r)$ та залежну від координат ефективну масу електрона $m(r)$ для всієї гетероструктури можна записати у компактному вигляді:

$$U(r) = U_0[1 - f(r)], \quad (2)$$

$$\frac{1}{m(r)} = \frac{1}{m_1} + \left(\frac{1}{m_0} - \frac{1}{m_1} \right) f(r) \quad (3)$$

де U_0 — висота потенціального бар'єра в матриці.

Оскільки ефективна маса електрона всередині зливої КТ відрізняється від маси в навколишній матриці, необхідно застосовувати ермітовий оператор кінетичної енергії у формі Бен-Денієла-Дюка. Стаціонарне рівняння Шредінґера для електрона має вигляд:

$$\hat{H}\psi(r) = \left[\frac{-\hbar^2}{2} \nabla \cdot \left(\frac{1}{m(r)} \nabla \right) + U(r) \right] \psi(r) = E\psi(r). \quad (4)$$

Для застосування методу розкладання за плоскими хвилями (МРПХ) наноструктура поміщається у штучну прямокутну суперкомірку об'єму $V = L_x L_y L_z = L^3$. Розміри суперкомірки обираються достатньо великими, щоб хвильова функція спадала до нуля на її межах, усуваючи тим самим взаємодію між сусідніми суперкомірками. Значення L використовувалося таким самим, як у роботах [23-25]. Розкладаємо хвильову функцію електрона в ряд за ортонормованим базисом плоских хвиль:

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_k c_k e^{ik \cdot r}. \quad (5)$$

де k — хвильовий вектор, компоненти якого набувають

дискретних значень $k_i = 2\pi n_i/L$ ($i = x, y, z$; $n_i \in \mathbb{Z}$), а c_k – невідомі коефіцієнти розкладання.

Підставляючи цей розклад у рівняння Шредінгера (4) та множачи зліва на $1/\sqrt{V} e^{-ik' \cdot r}$, після інтегрування по об'єму суперкомірки отримуємо стандартну алгебраїчну задачу на власні значення:

$$\sum_k H_{k',k} c_k = E c_{k'}. \quad (6)$$

Матричні елементи гамільтоніана можна обчислити аналітично. Позначимо різницевий вектор як $q = k' - k$. Застосовуючи теорему про дивергенцію до оператора кінетичної енергії, матричний елемент набуває вигляду:

$$H_{k',k} = \frac{\hbar^2}{2} (k' \cdot k) M(q) + U(q), \quad (7)$$

де $M(q)$ and $U(q)$ – перетворення Фур'є оберненої ефективної маси та потенціалу відповідно:

$$M(q) = \frac{1}{V} \int_V \frac{1}{m(r)} e^{-iq \cdot r} d^3r = \frac{1}{m_1} \delta_{q,0} + \left(\frac{1}{m_0} - \frac{1}{m_1} \right) f(q), \quad (8)$$

$$U(q) = \frac{1}{V} \int U(r) e^{-iq \cdot r} d^3r = U_0 \delta_{q,0} - U_0 f(q). \quad (9)$$

Тут $\delta_{q,0}$ – символ Кронекера, а $f(q)$ – перетворення Фур'є функції форми зливої КТ. Підстановка цих виразів дає остаточну компактну формулу для матричних елементів гамільтоніана:

$$H_{k',k} = \left[\frac{\hbar^2 |k|^2}{2m_1} + U_0 \right] \delta_{k',k} + \left[\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_0} - \frac{1}{m_1} \right) (k' \cdot k) - U_0 \right] f(k' - k). \quad (10)$$

Наступний крок полягає у визначенні функції $f(q)$. Оскільки область квантування є об'єднанням двох сфер, які перетинаються, об'ємний інтеграл не можна просто звести до суми двох незалежних сфер через подвійне врахування області перетину («лінзи»). Застосовуємо принцип включення-виключення:

$$f(r) = f_1(r) + f_2(r) - f_{inter}(r), \quad (11)$$

де f_1 та f_2 – функції форми ізольованих сфер із центрами в точках $(0, 0, -D/2)$ та $(0, 0, D/2)$, а f_{inter} – функція форми області їх перетину. Завдяки

лінійності перетворення Фур'є маємо:

$$f(q) = f_1(q) + f_2(q) - f_{inter}(q), \quad (12)$$

Перетворення Фур'є для одиночної сфери радіуса a , зміщеної на вектор r_0 , відоме аналітично (як у [23-26]):

$$S(q, r_0) = e^{-iq \cdot r_0} \frac{4\pi}{Vq^3} (\sin(qa) - qa \cos(qa)). \quad (13)$$

Таким чином, сума двох сфер дає:

$$f_1(q) + f_2(q) = S(q, 0) (e^{iq_z D/2} + e^{-iq_z D/2}) = 2 \cos\left(\frac{q_z D}{2}\right) \cdot \frac{4\pi}{Vq^3} (\sin(qa) - qa \cos(qa)) \quad (14)$$

Для обчислення $f_{inter}(q)$ перейдемо до циліндричної системи координат (ρ, ϕ, z) . Область перетину обмежена вздовж осі z від $-h$ до h , де $h = a - D/2$. Радіус поперечного перерізу на висоті z визначається як $\rho_{max}(z) = \sqrt{a^2 - (|z| + D/2)^2}$.

Виражаючи вектор q у циліндричних координатах як $q = (q_{||} \cos \phi_q, q_{||} \sin \phi_q, q_z)$, де $q_{||} = \sqrt{q_x^2 + q_y^2}$, $\phi_q = \arctan(q_y, q_x)$ інтеграл набуває вигляду:

$$f_{inter}(q) = \frac{1}{V} \int_{-h}^h dz e^{-iq_z z} \int_0^{\rho_{max}(z)} \rho d\rho \int_0^{2\pi} d\phi e^{-iq_{||} \rho \cos(\phi - \phi_q)}. \quad (15)$$

Інтегрування за кутом ϕ дає функцію Бесселя першого роду нульового порядку $2\pi J_0(q_{||} \rho)$. Подальше інтегрування за ρ використовує стандартну

властивість функцій Бесселя $\int x J_0(x) dx = x J_1(x)$. У результаті отримуємо одновимірний інтеграл:

$$f_{inter}(q) = \frac{2\pi}{Vq_{||}} \int_{-(a-D/2)}^{a-D/2} \rho_{max}(z) J_1(q_{||} \rho_{max}(z)) e^{-iq_z z} dz. \quad (16)$$

Цей інтеграл $f_{inter}(q)$ кількісно описує поправку на геометричне перекриття. Для випадку розділених квантових точок ($D > 2a$) область перетину зникає, $h = 0$, і, відповідно, $f_{inter}(q) = 0$.

Використовуючи отримані аналітичні вирази, ми дослідили залежність енергетичного спектра електрона в злитій КТ від її геометричних параметрів.

II. Аналіз отриманих результатів

Чисельні розрахунки проводилися для модельної системи на основі гетероструктури GaAs/Al_xGa_{1-x}As. Ця матеріальна система є гарним фізичним прототипом для наших розрахунків, оскільки вона дозволяє формувати складні квантові наноструктури, включаючи зрощені та злиті квантові точки, які часто синтезуються методом крапельної епітаксії [27, 28]. Для розрахунків ми обрали стандартні параметри при концентрації Al $x = 0.3$ [3]. Ефективна маса електрона всередині КТ GaAs становить $m_0 = 0.067 m_e$, тоді як у матриці Al_xGa_{1-x}As вона дорівнює $m_1 = 0.092 m_e$. Скінченний потенціальний бар'єр для електронів на гетеросистемній межі, визначений розривом зони провідності, є відносно невеликим ($U_0 = 0.26$ eВ). Ця відносно невелика висота бар'єра фізично обґрунтовує застосування методу розкладання за плоскими хвилями та забезпечує його швидку обчислювальну збіжність.

На рисунку 2 представлені розраховані залежності енергій основного E_0 та першого збудженого E_1 електронних станів від міжцентрової відстані D для чотирьох різних радіусів сфер. Аналіз цих кривих виявляє кілька фізичних особливостей еволюції енергетичного спектра в процесі злиття. По-перше, спостерігається загальна тенденція до зниження енергії для всіх рівнів зі зменшенням відстані D . Це є прямим наслідком ефекту квантового обмеження: коли сфери зближуються і перетинаються, ефективний об'єм області квантування розширюється, що призводить до зменшення кінетичної енергії локалізованого електрона. Природно, що для менших КТ (панель А, $a = 3$ нм) просторове обмеження сильніше, що призводить до значно вищих абсолютних значень енергії порівняно з більшими точками (панель D, $a = 6$ нм). По-друге, у режимі сильного геометричного перекриття ($D < 2a$) стає вираженим ефект квантовомеханічного зв'язку,

аналогічний утворенню ковалентного зв'язку в двоатомних молекулах. Внаслідок гібридизації хвильових функцій електрона двох складових сфер початково вироджені енергетичні рівні розщеплюються на симетричний основний стан (зв'язуючий стан, E_0) та антисиметричний перший збуджений стан (антизв'язуючий стан, E_1). Величина цього енергетичного розщеплення, $\Delta E = E_1 - E_0$, монотонно зростає зі зменшенням D . Це посилення пояснюється збільшенням площі поперечного перерізу «шийки», що з'єднує дві сфери, що сприяє сильній делокалізації хвильових функцій та електронному зв'язку між точками.

Для верифікації теоретичної моделі енергетичний спектр було досліджено у двох асимптотичних границях. При повному злитті ($D = 0$) система вироджується в одну сферичну КТ радіуса a , а розраховані значення енергії ідеально збігаються зі спектром ізольованої КТ. У протилежному випадку ($D \gg 2a$) геометричне перекриття та ймовірність тунелювання зникають. Енергетичне розщеплення ΔE прямує до нуля, а рівні E_0 та E_1 зливаються у двократно вироджений стан з енергією, рівною енергії ізольованої КТ радіуса a . Такий послідовний асимптотичний перехід до відомих розв'язків підтверджує математичну коректність побудованого гамільтоніана та виведеного перетворення Фур'є функції форми.

Для глибшого розуміння фізичних механізмів, що керують еволюцією енергетичного спектра, було досліджено просторовий розподіл хвильових функцій. На рисунку 3 представлено перерізи густини ймовірності електрона $|\psi(x,0,z)|^2$ у площині $y = 0$ для п'яти найнижчих енергетичних станів. Розрахунки виконано для фіксованого радіуса складових сфер $a = 5$ нм при різних міжцентрових відстанях D .

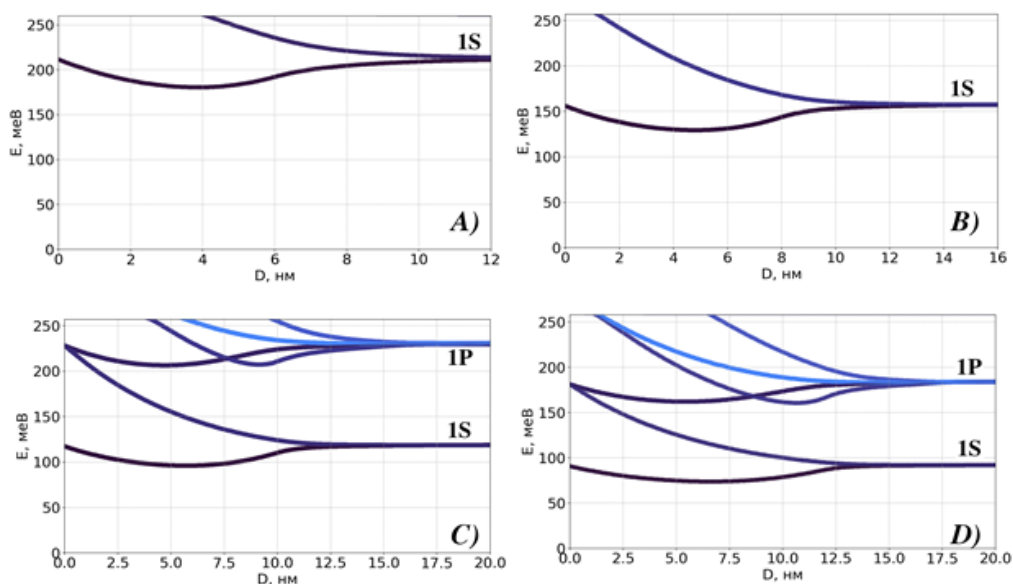


Рис. 2. Залежність нижчих рівнів енергії електрона від міжцентрової відстані D у злитій КТ GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As. Розраховані криві відповідають різним фіксованим значенням радіуса сфер: А – $a = 3$ нм, В – $a = 4$ нм, С – $a = 5$ нм, та D – $a = 6$ нм.

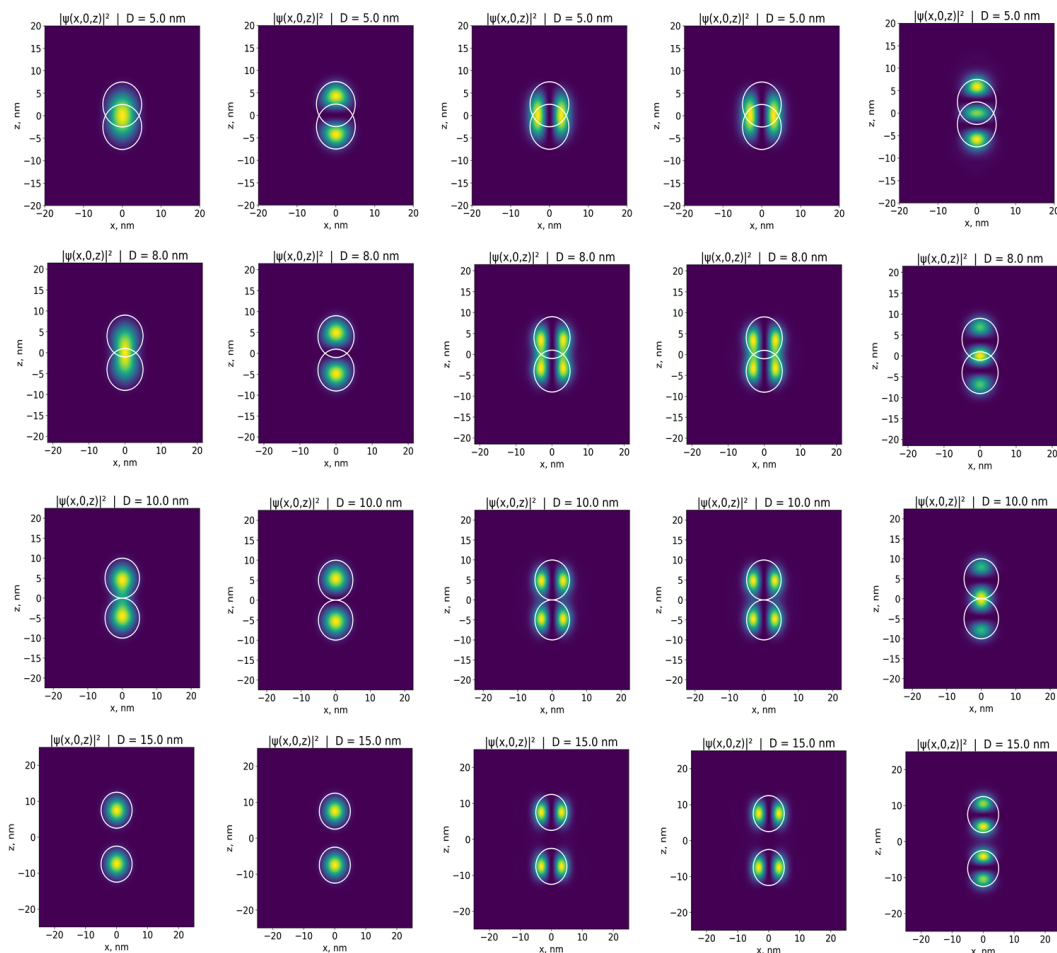


Рис. 3. Просторовий розподіл густини ймовірності електрона для нижчих станів, що ілюструє перехід від злитих КТ складної геометрії до тунельно-зв'язаних. Результати наведено для складових сфер радіуса $a = 5$ нм при різних міжцентрових відстанях D : від єдиної сильно зв'язаної гантелеподібної наноструктури при $D = 5$ нм (перший рядок) до режиму слабого тунелювання при $D = 15$ нм (останній рядок). Зліва направо стовпці відповідають зростанню порядку станів (наприклад, основний стан, перший збуджений стан тощо).

У режимі слабого тунельного зв'язку, коли КТ фізично розділені потенціальним бар'єром матриці ($D = 15$ нм, нижній рядок, рис. 3), хвильові функції демонструють чітко виражений молекулярний характер, типовий для квантово-розмірних молекул. Основний (перший стовпець, рис. 3) та перший збуджений (другий стовпець, рис. 3) стани формуються як симетрична та антисиметрична лінійні комбінації $1s$ -подібних станів ізолюваних КТ. В обох випадках електронна густина залишається сильно локалізованою всередині наносфер, а ймовірність виявлення електрона у просторі між ними надзвичайно мала. Третій, четвертий і п'ятий стовпці відповідають вищим просторовим гармонікам (аналогам p -станів), які також демонструють строгу локалізацію у своїх сферичних областях.

Зменшення відстані до точки фізичного контакту ($D = 10$ нм) та подальше злиття нанокристалів ($D = 8$ нм) призводить до формування єдиної гантелеподібної квантової молекули з вираженою «шийкою». У цьому режимі просторовий розподіл зазнає кардинальних змін. Симетричний основний стан з енергією E_0 стає сильно делокалізованим. Бар'єр зникає, і значна частина електронної густини

перетікає в область перетину сфер (шийку), що фізично еквівалентно утворенню міцного ковалентного зв'язку. Натомість перший збуджений стан, будучи антисиметричним, має строгу вузлову площину при $z = 0$ (точно в центрі шийки), де ймовірність знаходження електрона дорівнює нулю. Саме це просторове перекриття хвильових функцій в області геометричного злиття спричиняє експоненційне зростання енергетичного розщеплення, що спостерігається в енергетичних спектрах.

У границі сильного злиття ($D = 5$ нм, верхній рядок, рис. 3), коли центр однієї сфери лежить на поверхні іншої, система повністю втрачає свою двоточковості індивідуальність і поводить як єдина видовжена КТ складної форми. Хвильова функція основного стану набуває форми майже ідеального еліпсоїда з центром у центрі мас загальної структури. Вищі збуджені стани (стовпці 3–5, рис. 3) еволюціонують за своєю симетрією від набору ізолюваних p -подібних орбіталей до відповідних поздовжніх і поперечних просторових гармонік єдиної неперервної наноструктури.

Висновки

У цій роботі ми теоретично дослідили енергетичний спектр електрона та хвильові функції злитих КТ. Ми успішно застосували метод розкладання за плоскими хвилями завдяки виведенню точного аналітичного перетворення Фур'є складної функції форми за допомогою циліндричних функцій Бесселя, що уможливило швидку діагоналізацію гамільтоніана без використання тривимірних сіток. Для системи GaAs/AlGaAs ми продемонстрували, що енергії станів зменшуються зі зменшенням міжцентрової відстані D . У режимі сильного перекриття ($D < 2a$) квантовомеханічна гібридизація призводить до розщеплення рівнів енергії на симетричні та антисиметричні стани, причому величина енергетичного розщеплення зростає експоненційно. Просторовий розподіл густини ймовірності чітко ілюструє перехід від режиму слабого тунелювання до сильно зв'язаної

гантелеподібної наноструктури. Нарешті, валідність моделі підтверджено її точним збігом із відомими розв'язками для ізольованих сферичних квантових точок в асимптотичних границях, коли $D = 0$ та $D \gg 2a$.

Лешко Р.Я. – кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри фізики та інформаційних систем;
Лешко О.В. – доктор філософії, молодший науковий співробітник;
Білінський І.В. – доктор фізико-математичних наук, професор кафедри фізики та інформаційних систем;
Мельник Я.Ю. – аспірант кафедри фізики методики її викладання;
Очеретяний А.О. – аспірант кафедри фізики методики її викладання;
Чекін О.І. – аспірант кафедри фізики методики її викладання;
Квик М.В. – аспірант кафедри фізики методики її викладання.

- [1] F. Pelayo García de Arquer et al., *Semiconductor quantum dots: Technological progress and future challenges*, Science, 373, eaaz8541 (2021); <https://doi.org/10.1126/science.aaz8541>.
- [2] S. Koley, J. Cui, Y. E. Panfil, and U. Banin, *Coupled Colloidal Quantum Dot Molecules*, Acc. Chem. Res, 54, 1178 (2021); <https://doi.org/10.1021/acs.accounts.0c00691>.
- [3] J. Cui, Y.E. Panfil, S. Koley, et al., *Colloidal quantum dot molecules manifesting quantum coupling at room temperature*, Nature Communication, 10, 5401 (2019); <https://doi.org/10.1038/s41467-019-13349-1>.
- [4] Eunjoo Jang, Hyosook Jang, *Review: Quantum Dot Light-Emitting Diodes*, Chemical Reviews, 123 (8), 4663 (2023); <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.2c00695>.
- [5] P. Senellart, G. Solomon & A. White, *High-performance semiconductor quantum-dot single-photon sources*, Nature Nanotechnology, 12, 1026 (2017); <https://doi.org/10.1038/nnano.2017.218>.
- [6] Stefania Castelletto, Alberto Boretti, *Luminescence solar concentrators: A technology update*, Nano Energy, 109, 108269 (2023); <https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2023.108269>.
- [7] I. Medintz, H. Uyeda, E. Goldman, et al., *Quantum dot bioconjugates for imaging, labelling and sensing*, Nature Mater, 4, 435 (2005); <https://doi.org/10.1038/nmat1390>.
- [8] Hancong Li, Qiming Peng, Xiulai Xu, Jianpu Wang, *Quantum dots for optoelectronics*, Advanced Photonics, 5(6), 060503 (2023); <https://doi.org/10.1117/1.AP.5.6.060503>.
- [9] Liberato Manna, *The Bright and Enlightening Science of Quantum Dots*, Nano Letters, 23, 9673 (2023); <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.3c03904>.
- [10] G.A. Mantashian, P. A. Mantashyan, D. B. Hayrapetyan, *Modeling of Quantum Dots with the Finite Element Method*, Computation, 11, 5 (2023); <https://doi.org/10.3390/computation11010005>.
- [11] J. Ahmed, S. Sharma, K. V. Ramanujachary, S. E. Lofland, A. K. Ganguli, *Microemulsion-mediated synthesis of cobalt (pure fcc and hexagonal phases) and cobalt-nickel alloy nanoparticles*, Journal of Colloid and Interface Science, 336(15), 814 (2009); <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2009.04.062>.
- [12] J.S. Hu, Y.G. Guo, H.P. Liang, L.J. Wan, L. Jiang, *Three-dimensional selforganization of supramolecular self-assembled porphyrin hollow hexagonal nanoprisms*, Journal of the American Chemical Society, 127(48), 17090 (2005); <https://doi.org/10.1021/ja0553912>.
- [13] M. Jitianu, D. V. Goia, *Zinc oxide colloids with controlled size, shape, and structure*, Journal of Colloid and Interface Science, 309(1), 78 (2007); <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2006.12.020>.
- [14] X. Qu, L. Omar, T. B. H. Le, L. Tetley, K. Bolton, K. W. Chooi, W. Wang, I. F. Uchegbu, *Polymeric Amphiphile Branching Leads to Rare Nanodisc Shaped Planar Self-Assemblies*, Langmuir, 24(18), 9997 (2008); <https://doi.org/10.1021/la8007848>.
- [15] Vincent Notot, Willem Walravens, Maxime Berthe, Nemanja Peric, Ahmed Addad, Xavier Wallart, Christophe Delerue, Zeger Hens, Bruno Grandidier, and Louis Biadala, *Quantum Dot Acceptors in Two-Dimensional Epitaxially Fused PbSe Quantum Dot Superlattices*, ACS Nano, 16, 3081 (2022); <https://doi.org/10.1021/acsnano.1c10596>.
- [16] A. Abelson, C. Qian, T. Salk, et al., *Collective topo-epitaxy in the self-assembly of a 3D quantum dot superlattice*, Nature Materials, 19, 49 (2020); <https://doi.org/10.1038/s41563-019-0485-2>.
- [17] Philipp Schapotschnikow, Marijn A. van Huis, Henny W. Zandbergen, Daniël Vanmaekelbergh, and Thijs J. H. Vlugt, *Morphological Transformations and Fusion of PbSe Nanocrystals Studied Using Atomistic Simulations*, Nano Letters, 10, 3966 (2010); <https://doi.org/10.1021/nl101793b>.

- [18] Luis Tortajada, Lucas V. Besteiro, Murilo L. Tiago, L. J. Gallego, James R. Chelikowsky, and M. M. G. Alemany, *Multidimensional nanoscale materials from fused quantum dots*, Phys. Rev. B, 84, 205326 (2011). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.205326>.
- [19] Tewodros Adaro Gatissa, Teshome Senbeta Debela, Belayneh Mesfin Ali, *Effect of cubic and spherical quantum dot size and size dispersion on the performance of quantum dot solar cells*, AIP Advances, 14, 015236 (2024); <https://doi.org/10.1063/5.0184745>.
- [20] Wei Li, Thomas M. Sabel. *Reinvestigation of quantum dot symmetry: the symmetric group of the 8-band k-p theory Hamiltonian*, Journal of Nanoparticle Research, 21, 16 (2019); <https://doi.org/10.1007/s11051-018-4448-3>.
- [21] F.A. Donado, F.G. Almanza, C.F. Viña, and al., *Impact of Nonresonant Intense Laser and Electric Fields on a Low-Dimensional CdTe/CdSe Type-II Cone*, Nanomaterials, 15, 1208 (2025); <https://doi.org/10.3390/nano15151208>.
- [22] V. Hols'kyi, R. Leshko, *The influence of deformations on single electron states in a molecule formed from three quantum dots of the heterosystem InAs/GaAs*, Physics and Chemistry of Solid State, 23(4), 686 (2022); <https://doi.org/10.15330/pcss.23.4.686-692>.
- [23] R. Ya. Leshko, I. V. Bilynskiy, O. V. Leshko, M. A. Slusarenko, *Electron energy spectrum of the non-concentric spherical core-shell quantum dot*, Micro and Nanostructures, 181, 207615 (2023); <https://doi.org/10.1016/j.micrna.2023.207615>.
- [24] R. Ya. Leshko, O. V. Leshko, I. V. Bilynskiy, M. V. Kvyk, Ya. Yu. Melnyk, A.O. Ocheretyanyi, M. Yu. Popov, *Electron and hole energy spectra in a non-concentric spherical core-shell quantum dot under a magnetic field*, Physics Letters A, 562, 130996 (2025); <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2025.130996>.
- [25] I. Bilynskiy, R. Leshko, O. Leshko, H. Terletska, R. Pazuyk, & K. Voitovych, *Impurity states in non-concentric spherical core-shell quantum dot*, Physics and Chemistry of Solid State, 25(1), 98 (2024); <https://doi.org/10.15330/pcss.25.1.98-103>.
- [26] Shu-Shen Li and Jian-Bai Xia, *Binding energy of a hydrogenic donor impurity in a rectangular parallelepiped-shaped quantum dot: Quantum confinement and Stark effects*, Journal of Applied Physics, 101, 093716 (2007); <http://dx.doi.org/10.1063/1.2734097>.
- [27] S. Sanguinetti, K. Watanabe, T. Tateno, M. Gurioli, P. Werner, M. Wakaki, N. Koguchi, *Modified droplet epitaxy GaAs/AlGaAs quantum dots grown on a variable thickness wetting layer*, Journal of Crystal Growth, 253(1–4), 71 (2003); [https://doi.org/10.1016/S0022-0248\(03\)01016-9](https://doi.org/10.1016/S0022-0248(03)01016-9).
- [28] S. Bietti, F.B. Basset, A. Tuktamyshev, et al, *High-temperature droplet epitaxy of symmetric GaAs/AlGaAs quantum dots*, Scientific Reports, 10, 6532 (2020); <https://doi.org/10.1038/s41598-020-62248-9>.
- [29] P. Harrison and A. Valavanis, *Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures*, 4th ed. (John Wiley & Sons, Chichester, 2016).

R.Ya. Leshko¹, O.V. Leshko¹, I.V. Bilynskiy^{1,2}, Ya.Yu. Melnyk², A.O. Ocheretyanyi²,
O.I. Chekin², M.V. Kvyk²

Electron energy spectrum of separated and fused spherical quantum dots

¹Department of physics and information systems, Drohobych Ivan Franko State Pedagogical University, Drohobych, Ukraine, leshkoroman@dspu.edu.ua;

²Department of physics, Kryvyi Rih State Pedagogical University, Kryvyi Rih, Ukraine

We present a highly efficient semi-analytical approach to model electronic states in fused spherical quantum dots by deriving an exact analytical Fourier transform of their 3D shape function using cylindrical Bessel functions. This mathematical novelty allows the direct application of the plane-wave expansion method to solve the Schrödinger equation with a spatially dependent effective mass, completely eliminating the need for resource-intensive 3D spatial meshing. Applying this to a GaAs/AlGaAs heterostructure, we demonstrate that strong geometric overlap induces robust quantum-mechanical hybridization, causing an exponential splitting of degenerate energy levels into symmetric and antisymmetric states. The model guarantees an exact asymptotic transition to isolated quantum dot solutions, providing a fast and rigorous tool for prototyping complex nanostructures.

Keywords: fused and coupled quantum dots, electron energy spectrum, wave function hybridization.