**Баум, Ольга Игоревна.**

## Спектры кросслюминесценции в приближении сильной связи : диссертация ... кандидата физико-математических наук : 01.04.05. - Москва, 1999. - 119 с. : ил.

## Оглавление диссертациикандидат физико-математических наук Баум, Ольга Игоревна

ВВЕДЕНИЕ1

ГЛАВА ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР8

§ 1.1 Природа и свойства кросслюминесценции8

1.1.1 Простейшая модель кросслюминесценции.

Первые экспериментальные данные8

1.1.2 Примесная кросслюминесценция20

1.1.3 Кластерные модели спектров кросслюминесценции в литературе21

1.1.4 Температурная зависимость свойств и кинетики затухания кросслюминесценции27

§ 1.2 Применение теории групп и квантовой механики при расчете спектров кросслюминесценции.

Приближение «сильной связи»34

1.2.1 О приближениях, используемых при теоретических расчетах спектров кросслюминесценции34

1.2.2 Закон дисперсии бинарных кросслюминесцентных кристаллов. Метод сильно связанных электронов36

§ 1.3 Зонные особенности кросслюминесцентных кристаллов42

ГЛАВА РАСЧЕТ СПЕКТРОВ КРОССЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ47

§ 2.1 Энергетические зоны и плотность состояний кросслюминесцентных кристаллов47

2.1.1 Расчет плотности состояний методом Монте-Карло47

2.1.2 Подбор соотношения между интегралами перекрытия на основе эмпирических данных48

2.1.3 Интегралы перекрытия для водородоподобных функций52

§ 2.2 Взаимодействие поля излучения с кристаллом.

Учет распределения остовных носителей заряда по зоне Бриллюэна 56

§ 2.3 Правила отбора для матричных элементов с учетом теории групп. Построение спектров кросслюминесценции60

2.3.1. Правила отбора для матричных элементов спектральных переходов60

2.3.2. Учет анион-катионного взаимодействия63

2.3.3. Спектры кросслюминесценции СэС!, КЬБ и ВаРг.

Описание полученных результатов65

§ 2.4 Влияние спиновых эффектов на спектры кросслюминесценции69

2.4.1. Закон дисперсии и секулярное уравнение при учете спин-орбитального взаимодействия69

2.4.2. Матричное представление внутриатомного спинового взаимодействия72

2.4.3. Учет матричных элементов74

ГЛАВА ИССЛЕДОВАНИЕ СПЕКТРОВ КРОССЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ

НА ОСНОВЕ ТЕОРИИ ДЕФЕКТОВ77

§3.1 Локализация остовных дырок.

Свободные и резонансные состояния77

§ 3.2 Рассмотрение вырожденного случая при локализации остовных дырок94