

УДК 537.226; 539.2

© 1991

СПИН-ОРБИТАЛЬНОЕ РАСЩЕПЛЕНИЕ ЭКСИТОННОГО ДУБЛЕТА В ОКСИДЕ МАГНИЯ

В. А. Лобач

Показано, что теория дублетного спин-орбитального расщепления (СОР) экситонов Онодеры—Тойозавы непригодна для описания «обратной» структуры СОР в MgO. Наблюдаемый порядок следования компонент дублета в MgO объясняется как результат наличия потенциального барьера в эффективном потенциале аниона, приводящего к отрицательному значению параметра СОР и, следовательно, обратному релятивистскому расщеплению вершины валентной зоны.

На рис. 1, а схематично представлен спектр поглощения в экситонной области [1, 2]. Относительные интенсивности компонент дублета, а также наличие расщепления второй компоненты (при условии применимости теории Онодеры—Тойозавы [3]) в данном случае приводят к энергетической диаграмме (рис. 1, б). В свою очередь такая диаграмма возможна при «обратном» (по отношению к щелочно-галогидным кристаллам — ЩГК) порядке следования компонент ($j=1/2$, $j=3/2$) релятивистской структуры валентной зоны (ВЗ). Поэтому в [1] при анализе спектров поглощения было выдвинуто предположение, что в оксиде магния зона Γ_6^- ($j=1/2$) лежит выше зоны ($j=3/2$), хотя ранее давалась противоположная интерпретация [2]. К сожалению, полные релятивистские зонные расчеты

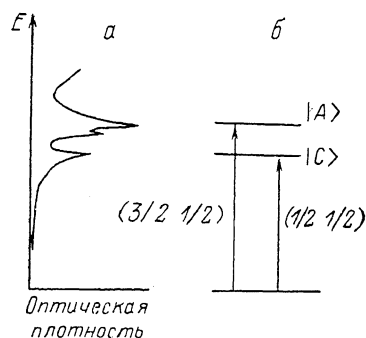


Рис. 1. Спектр поглощения (а) и энергетическая диаграмма низших экситонов (б) в MgO.

щелочноземельных оксидов (ЩЗО) отсутствуют, а имеющиеся скалярно-релятивистские расчеты [4] не могут служить основанием для анализа порядка следования компонент дублета. Более того, даже полный неэмпирический подход может не прояснить вопроса об «обратном» порядке следования, если взаимодействие, которое приводит к этому эффекту, не является стандартно учитываемым в зонных расчетах.

В такой ситуации имеет смысл проанализировать возможности теории Онодеры—Тойозавы для объяснения рассматриваемого эффекта. Интерес представляют эффекты, приводящие к таким параметрам теории, при которых тонкая структура экситонного спектра в MgO, а возможно, и в других ЩЗО может быть разумно описана.

1. Теория дублетного расщепления экситонов

Теория дублетного спин-орбитального расщепления (СОР) экситонов, явно учитывающая блоховский характер электронного компонента, развита на основе приближения эффективной массы Онодерой и Тойоза-

вой [3]. Теория объясняет инверсию интенсивностей переходов дублета как смешивание его состояний за счет обменного взаимодействия между электроном и дыркой, которое существенно для экситонов малого радиуса, как, например, в ШГК. Приближение справедливо для кристаллов, в которых дно зоны проводимости (ЗП) имеет s -симметрию и располагается в точке Г. Тогда на дне ЗП электронный компонент занимает состояние с $j=1/2$, а дырка в ВЗ представляет собой вакансию электрона в заполненной оболочке аниона типа np^5 с $j=1/2, 3/2$ и, следовательно, в пределе jj -связи двум низшим возбуждениям соответствуют два экситона: $(3/2 \ 1/2)$ и $(1/2 \ 1/2)$. В атомах с p -оболочкой, заполненной более чем наполовину, порядок следования уровней при СОР следующий:

$$W_{so} = \begin{cases} \xi, & j = 1/2 \\ -\frac{1}{2}\xi, & j = 3/2, \end{cases} \quad (1)$$

где энергия отсчитывается от уровня $W_{so}=0$, а $\xi > 0$ — параметр СОР [5]. Знак ξ определяется производной от эффективного потенциала в гамильтониане $\mathcal{V}(\mathbf{r})$, и поэтому для атомов, где $\mathcal{V}(\mathbf{r})$ монотонно возрастает, он строго определен. В кристаллах параметр СОР состояний ВЗ, по-видимому, не имеет строгого теоретического обоснования, и поэтому обычно используются полуэмпирические значения полного СОР $\lambda=3/2 \xi$, где ξ — параметр СОР аниона. Тогда в предположении малости массы электрона по сравнению с массой дырки в отсутствие обмена матричные элементы гамильтониана имеют вид [3]

$$H_{\mu\nu\mu'\nu'} = \begin{cases} \delta_{\mu\mu'}\delta_{\nu\nu'} \left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + \mathcal{V}(\mathbf{r}) + \frac{2}{3}\lambda \right], \\ \delta_{\mu\mu'}\delta_{\nu\nu'} \left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + \mathcal{V}(\mathbf{r}) - \frac{1}{3}\lambda \right], \end{cases} \quad (2)$$

где индексы μ, ν относятся к ВЗ и ЗП. Далее по теории возмущений включается обмен между дыркой и электроном. При этом по аналогии с атомами учитывается, что обмен может влиять только на смешанные состояния синглета и триплета, которые соответствуют полному угловому моменту $J=1$. Состояния с $J=0$ для $(1/2 \ 1/2)$ и с $J=2$ для $(3/2 \ 1/2)$ имеют энергии $(2/3)\lambda$ и $-(1/3)\lambda$ соответственно, которые не зависят от величины обменного взаимодействия. Для смешанных состояний остается матрица

$$\begin{matrix} (1/2 \ 1/2) \\ (3/2 \ 1/2) \end{matrix} \begin{bmatrix} \frac{2}{3}\lambda + \frac{1}{3}\Delta & \frac{\sqrt{2}}{3}\Delta \\ \frac{\sqrt{2}}{3}\Delta & -\frac{1}{3}\lambda + \frac{2}{3}\Delta \end{bmatrix}, \quad (3)$$

где

$$\Delta = 2I |F(\mathbf{0})|^2 \Omega - \frac{8\pi}{3} \mu^2 \quad (4)$$

выражается через обменный интеграл I и дипольный момент перехода μ . Эта матрица диагонализуется в базисе

$$|A\rangle = \cos \varphi (1/2 \ 1/2) + \sin \varphi (3/2 \ 1/2), \quad (5)$$

$$|C\rangle = -\sin \varphi (1/2 \ 1/2) + \cos \varphi (3/2 \ 1/2), \quad (6)$$

где φ определяется из уравнения

$$\operatorname{tg} 2\varphi = 2\sqrt{2} \frac{\Delta}{3\lambda - \Delta}, \quad (7)$$

а ее собственные значения имеют вид [3]

$$\left. \begin{matrix} E_A \\ E_C \end{matrix} \right\} = \frac{1}{2} \left[\Delta + \frac{\lambda}{3} \pm \sqrt{\left(\Delta - \frac{\lambda}{3}\right)^2 + \frac{8}{9}\lambda^2} \right]. \quad (8)$$

Зависимости E_A и E_C представлены на рис. 2. Чистые триплетные состояния обозначены штриховыми линиями. Величина φ , характеризующая вклад экситона данного типа в состояния $|A\rangle$ и $|C\rangle$, меняется монотонно от нуля до $\pi/4$ при $|\Delta| \leq 3\lambda$. Тогда при $0 < \Delta < \lambda$, что обычно имеет место в хлоридах и бромидов, верхнее состояние преимущественно формируется экситоном $(1/2 \ 1/2)$. На рис. 3 приведены типичная релятивистская зонная структура бромида (а), энергетическая диаграмма экситонного дублета (разрешенных в дипольном приближении), полученная с помощью (8) (б), а также типичный спектр поглощения в экситонной области (в).

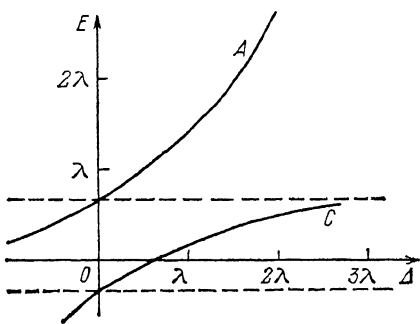


Рис. 2. Зависимости энергий экситонного дублета от величины параметра Δ в теории Онодеры—Тойозавы (в единицах полного СОР λ).

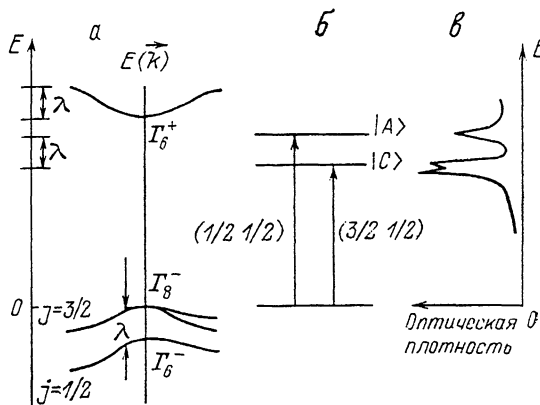


Рис. 3. Структура энергетических зон (а), энергетическая диаграмма экситонного дублета (б) и типичная форма спектра поглощения в экситонной области бромидов (в).

Структура в первом пике поглощения обычно приписывается расщеплению компоненты дублета с большим j . Более того, часто расщепление компоненты является основанием для ее идентификации по j [1].

Хотя теория Онодеры—Тойозавы разработана для анализа дублетного расщепления экситонов в ШГК, т. е. для экситонов малого радиуса, следуя авторам [6], можно считать, что основные приближения этой теории сохраняют смысл и в случае ШЗО, в которых, как известно, экситонная структура удовлетворительно воспроизводится в модели Ванье [2]. Действительно, в MgO и CaO энергии связи Γ -экситонов равны 145 ± 20 и 130 ± 30 мэВ, параметр Δ не превышает 40 мэВ [1], а эффективные массы электрона и дырки отличаются на порядок. Такие соотношения между параметрами экситонов находятся в пределах, предполагаемых в теории Онодеры—Тойозавы.

2. Дублетное расщепление в MgO

В соответствии с (5)—(8) порядок следования компонент дублета определяется парциальным составом экситонных состояний $|A\rangle$ и $|C\rangle$, который в свою очередь выражается через угол поворота системы координат φ при переходе к базису из собственных векторов. Из (7) следует, что если $\Delta < 3\lambda$, то $|\varphi| < \pi/4$. Другими словами, при всех Δ (положительных и отрицательных), при которых справедлива теория возмущений, низшим по энергии оказывается экситон $(3/2 \ 1/2)$, а не $(1/2 \ 1/2)$, как это имеет место в спектре поглощения MgO. Формально это означает, что при любом разумном, с точки зрения теории Онодеры—Тойозавы, Δ невозможно объяснить порядок следования компонент дублета в оксиде при стандартном релятивистском расщеплении вершины ВЗ, т. е. когда верхняя компонента имеет $j=3/2$, а нижняя $j=1/2$. Заметим, что такой вывод противоречит утверждению, выдвинутому в [7], о том, что второе слагаемое в (4), примерно равное двойному члену Геллера—Маркуса для по-

перечного экситона в точке Γ [8, 9], может изменить порядок следования синглета и триплета. Поэтому рассмотрим эту ситуацию подробнее.

Если допустить, что инверсия состояний экситона происходит благодаря доминирующему вкладу второго слагаемого в (4), т. е. при отрицательных Δ , то при всех Δ , удовлетворяющих условию $|\Delta| < \lambda$ (т. е. теории Онодеры—Тойозавы), из (8) следует тот же порядок следования компонент, что и при $0 < \Delta < \lambda$. Следовательно, даже если член Геллера—Маркуса в (4) равен $2I|F(0)|^2\Omega + \lambda$, его величины не достаточно для обращения порядка следования. Однако инверсия может оказаться возможной при $|\Delta| > \lambda$ (больших дипольных моментах $|\mu|$), при которых теория возмущений уже не работает. Тогда имело бы смысл сначала учесть продольно-поперечное расщепление экситона, а затем (по теории возмущений) спин-орбитальное. Однако если бы вклад продольно-поперечного расщепления в Δ был доминирующим, то ввиду пропорциональности сил осцилляторов (дипольно разрешенных) экситонных переходов квадратам модулей $|\mu|^2$ [2] следовало бы ожидать роста интенсивностей переходов в ряду MeO при переходе от Mg к Ba примерно на порядок, чего при сравнении спектров поглощения не наблюдается. Действительно, если величина дублетного расщепления возрастает от 0.025 эВ в MgO до 0.23 эВ в BaO, то интенсивности пиков в спектрах мнимой части диэлектрической проницаемости изменяются в пределах 2—4 единиц [6]. Таким образом, ни обменное взаимодействие между электроном и дыркой, ни продольно-поперечное расщепление не могут быть причиной обратного порядка следования компонент дублета в MgO. Отсюда, конечно, можно сделать вывод, что теория Онодеры—Тойозавы вообще неприменима к ЩЗО. Однако если, воспользовавшись эмпирическим значением величины СОР основного состояния 2P иона O^- $\lambda = 0.024$ эВ [10], рассчитать зависимости $E_A(\Delta)$ и $E_C(\Delta)$ в соответствии с (8), то оказывается, что экспериментальные энергии СОР ($\Delta E = E_A - E_C$) [6] воспроизводятся разностями $|\Delta E| = E_A - E_C$ при разумных величинах Δ : $|\Delta E| = 0.076$ эВ при $\Delta = 0.019$ эВ для MgO и 0.036 и 0.035 эВ соответственно для CaO. Для оксида стронция величина $|\Delta E| = 0.073$ эВ воспроизводится при $\Delta = 0.076$ эВ. Если при этом изменить порядок следования базисных векторов ($(3/2\ 1/2)$, $(1/2\ 1/2)$) вместо $(1/2\ 1/2)$ ($3/2\ 1/2$) в матрице (3), то низшим по энергии (как в эксперименте (рис. 3)) оказывается состояние, формируемое преимущественно экситоном $(1/2\ 1/2)$. В свою очередь такое изменение порядка следования базисных векторов соответствует предположению о том, что в отличие от ЩГК в ЩЗО имеет место обратное СОР валентной зоны, т. е. зона Γ_j^- ($j=1/2$) лежит выше зоны Γ_j^- ($j=3/2$). Напомним, что такое предположение об обратном СОР выдвигалось для MgO на основании экспериментального факта наличия тонкой структуры во втором пике спектра термоотражения, но без обсуждения причин такого поведения [1]. Мы предполагаем, что главной причиной обратного СОР валентной зоны ЩЗО является специфическая форма эффективного потенциала, локализующегося в кристаллах ЩЗО в окрестности аниона и действующего на валентные электроны.

В отличие от однозарядных анионов в ЩГК на кислороде в ЩЗО в соответствии с формальной валентностью должны локализоваться два электрона, что приводит к зарядовой конфигурации O^{2-} . Однако, например, эксперименты по рассеянию рентгеновского излучения обнаруживают картину распределения плотности валентных p -электронов на анионах в ЩЗО, которая описывается моделью O^- плюс один электрон, делокализованный в междоузельное пространство [11]. Возможность такой зарядовой конфигурации анионов в ЩГК подтверждается расчетом когезионных свойств [12], а также расчетами электронной структуры в зонных и кластерных [13—17] приближениях. Расчеты показывают, что в окрестности аниона в эффективном потенциале для электрона ВЗ в ЩЗО формируется потенциальный барьер. Барьер является причиной резонансного характера вершины ВЗ и делокализации электронного заряда в междоузельное пространство за счет резонансного туннелирования [16, 17].

Поскольку, с одной стороны, наличие резонансов формы в ВЗ ЩЗО может оказаться общим свойством многих других оксидов, а с другой стороны, упомянутые расчеты содержат определенное количество достаточно грубых приближений, рассмотрим здесь простые аналитические выкладки, которые приводят к выводу о резонансах.

Учитывая, что рассеянию валентных электронов соответствуют малые энергии, эффективный потенциал в окрестности аниона $\mathcal{V}(r)$ можно считать сферически-симметричным [18], что подтверждается расчетами карт электронной плотности в [19]. Тогда в сферических координатах уравнение Шредингера в форме, удобной для анализа в рамках формальной теории рассеяния для электрона в окрестности аниона, имеет вид

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} + \mathcal{V}_l(r) - k^2\right] R_l(r) = 0, \quad (9)$$

$$\mathcal{V}_l(r) = \frac{l(l+1)}{r^2} - 2V(r), \quad (10)$$

$l(l+1)/r^2$ — центробежный потенциал (ЦБП). Ясно, что специфика рассеяния на анионе ЩЗО содержится во втором слагаемом (10) — кристаллическом потенциале в окрестности аниона, так как ЦБП одинаков для электронов p -оболочки любого атома. В локальном приближении к функционалу плотности эффективный потенциал общего вида

$$\mathcal{U}[\rho(r)] = v_{xc}(r) + \int \frac{\rho(r') dr'}{|r-r'|} + V_{\text{ext}}(r) \quad (11)$$

складывается из обменно-корреляционного, межэлектронного кулоновского и внешнего потенциалов. Удобно сначала рассмотреть свободный ион O^{2-} . Тогда для удаленного от остальных десятого электрона $V_{\text{ext}}(r)$ есть потенциал электростатического взаимодействия с ядром и вместе со вторым слагаемым в (11) они дают кулоновский потенциал ионного остатка (O^-), действующий на внешний электрон. Учитывая короткодействующую природу v_{xc} , можно использовать его асимптотическую (при больших r) форму [19]

$$v_{xc}(r) = -\frac{a}{r} - \frac{\beta}{2r^4}, \quad (12)$$

где $a=0.55$ или 1.0 , а β — статическая дипольная поляризуемость. Первое слагаемое в (12) имеет вид потенциала притяжения кулоновского типа и, следовательно, будучи объединенным с рассмотренными кулоновскими членами, имеет вид $-Z/r$, где Z — параметр, характеризующий эффективный заряд ионного остатка. Следовательно, для свободного иона эффективный потенциал, действующий на внешний электрон, имеет следующий (качественный) вид:

$$\mathcal{V}_l(r) = \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2Z}{r} - \frac{\beta}{r^4}. \quad (13)$$

В кристалле (наряду с изменением β) к взаимодействиям, учтенным в (13), основную добавку дают электростатический потенциал Маделунга и кулоновский потенциал взаимодействия с дыркой, остающейся на анионе после того, как электрон делокализовался в междоузельное пространство. Оба этих вклада не изменяют качественного вида потенциала $\mathcal{V}_l(r)$.

На рис. 4 представлены графики функции (13) при различных значениях параметров: $Z=0$ (скомпенсированное кулоновское взаимодействие), $\beta=0$ (отсутствие поляризации) и $\beta Z^2 < 0.296$. С учетом результатов упомянутых зонных и кластерных расчетов относительно резонансного характера ВЗ ЩЗО можно ожидать, что в этих кристаллах реализуются такие параметры Z и β , при которых $\mathcal{V}_l(r)$ в окрестности аниона качественно описывается последним из этих случаев. Стрелками на рис. 4 обозначены туннелирование десятого электрона иона O^{2-} в междоузельное пространство и последующая возможная релаксация. Первый случай ($Z=0$),

по-видимому, соответствует случаю свободного иона O^{2-} , в котором, как известно, отсутствует связанное состояние для десятого электрона. Для основной цели настоящей работы важно, что в рассмотренном модельном потенциале $\mathcal{V}_l(r)$ протуннелировавший электрон, оказавшись справа от барьера, «чувствует» спадающую часть действующего на него потенциала.

Напомним, что задаваемый выражением (1) порядок следования СОР-уровней для p -оболочки, заполненной более чем наполовину, определяется

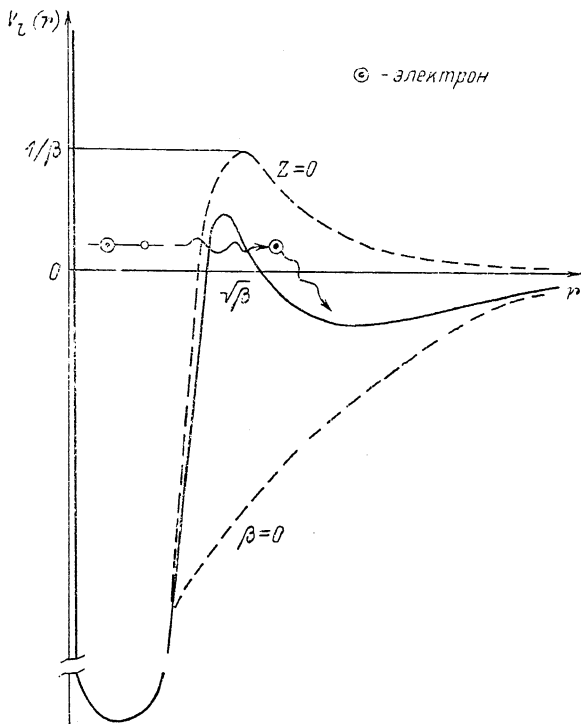


Рис. 4. Поведение эффективного потенциала аниона в оксиде в соответствии с (13).

знаком параметра СОР ξ [5]. В свою очередь знак ξ определяется знаком производной от потенциала $\mathcal{V}_l(r)$

$$W_{so} = \frac{\hbar^2}{2m^2c^2r_a} \frac{\partial \mathcal{V}_l(r)}{\partial r} (1s) = \begin{cases} \xi \left(\frac{1}{2} l \right), & j = l + \frac{1}{2}, \\ \xi \left(-\frac{1}{2} (l + 1) \right), & j = l - \frac{1}{2}. \end{cases} \quad (14)$$

Следовательно, при $\partial \mathcal{V}_l(r) / \partial r > 0$, т. е. на интервале, где функция $\mathcal{V}_l(r)$ возрастает (при $l=1$)

$$W_{so} = \begin{cases} \frac{1}{2} \xi, & j = \frac{3}{2}, \\ -\xi, & j = \frac{1}{2}, \end{cases} \quad (15)$$

что реализуется в однозарядных анионах ШГК. Если же потенциальная функция убывает на некотором интервале, как, например, в случае спин-орбитальной связи нуклона в ядре, то параметр СОР становится отрицательным, а уровень с большим $j=l+1/2$ располагается глубже уровня $j=l-1/2$ (см. § 118 в [20]) и, следовательно, имеет место обратный порядок СОР по отношению к (15).

В теории Онодеры—Тойозавы принадлежность s -состояния электронного компонента экситона к какому-либо из ионов кристалла не фигури-

рует явно. Поэтому для качественного анализа дублетного расщепления экситонов можно воспользоваться аналогией с возбужденными $np^5n's$ -конфигурациями инертных газов [7, 21, 22]. Для возбужденных состояний таких атомов в чистом виде не реализуется ни jj -, ни LS -связь. Очевидно, и в рассматриваемых здесь экситонах реализуется промежуточный тип связи. В таком случае качественную картину расположения уровней (а нас здесь интересует взаимное расположение синглетов и триплетов) принято получать сопоставлением предельных случаев LS - и jj -связей [23].

Система уровней, соответствующая низшим экситонным возбуждениям в jj -связи, рассмотрена в предыдущем разделе: $(3/2\ 1/2)_2$, $(3/2\ 1/2)_1$, $(1/2\ 1/2)_0$, $(1/2\ 1/2)_1$. Первый и третий уровни являются чистыми триплет-

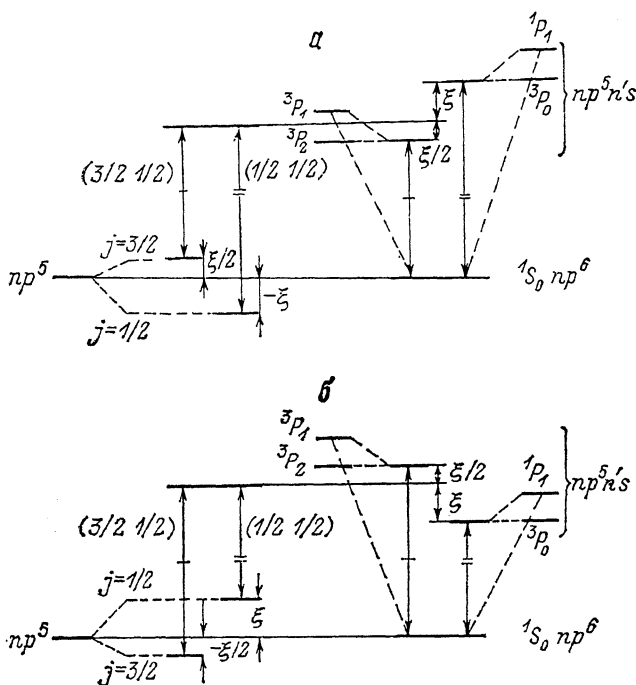


Рис. 5. Схемы, демонстрирующие формирование СОР дублетной структуры экситонов в ЦГК (а) и MgO (б).

ными, а второй и четвертый — смешанными состояниями синглета и триплета [3]. При LS -связи и положительном параметре СОР $np^5n's$ -конфигурация дает один синглетный уровень 3P_1 и три триплетных 3P_2 , 3P_1 , 3P_0 . На рис. 5, а справа представлена схема этих уровней при $\xi > 0$, которая описывается известными уравнениями [21, 22]

$$\begin{aligned}
 E(^1P_1) &= E + \frac{1}{2} \left[\Delta + \frac{\xi}{2} + \sqrt{\left(\Delta - \frac{\xi}{2}\right)^2 + 2\xi^2} \right], \\
 E(^3P_0) &= E + \xi, \\
 E(^3P_1) &= E + \frac{1}{2} \left[\Delta + \frac{\xi}{2} - \sqrt{\left(\Delta - \frac{\xi}{2}\right)^2 + 2\xi^2} \right], \\
 E(^3P_2) &= E - \frac{1}{2} \xi,
 \end{aligned}$$

где E — энергия $np^5n's$ -конфигурации без учета спин-орбитального и обменного взаимодействий. С учетом $\xi = 2\lambda/3$ легко видеть, что первое и третье уравнения соответствуют энергиям E_A и E_C в (8), а второе и четвертое описывают чистые триплетные (рис. 2). Низшему разрешенному правилам отбора по \mathcal{J} переходу с 1S_0 -уровня соответствует возбуждение элек-

трона в триплетном состоянии (3P_1), которое (расщепившись, например, за счет спин-спинового взаимодействия) дает тонкую структуру низшего компонента СОР-дублета экситона в ЩГК. Переход $^1S_0 \rightarrow ^1P_1$ соответствует второму компоненту СОР-дублета (рис. 5, а).

При отрицательном параметре СОР низшим по энергии оказывается экситон ($1/2\ 1/2$) (рис. 5, б). Предполагая, что положение чистых триплетов 3P_2 и 3P_0 определяется СОР валентной зоны, при LS -связи получаем схему уровней, представленную на рис. 5, б справа. В отличие от случая $\xi > 0$ здесь синглетный уровень располагается ниже триплетного, что согласуется с экспериментально наблюдаемым обратным порядком СОР в оксиде магния. Поскольку рассмотренная выше форма эффективного потенциала имеет место и в других ЩЗО [17], то можно ожидать проявлений обратного порядка СОР в этих кристаллах. Еще раз подчеркнем, однако, что реально в ЩЗО реализуется более сложная схема уровней, чем на рис. 5, б справа, поскольку последняя соответствует предельному случаю LS -связи и удобна в данном случае тем, что в ней в отличие от jj -связи явно определены понятия синглета и триплетта.

Таким образом, показано, что теория дублетного спин-орбитального расщепления экситонов Онодеры—Тойозавы ни при каких разумных значениях ее параметров не объясняет инверсии компонентов дублета в оксиде магния, если параметр СОР положителен. Напротив, при отрицательном значении этого параметра, сопоставляя предельные случаи jj - и LS -связи, можно предложить схему уровней, которая соответствует обратному порядку СОР. В свою очередь параметр СОР становится отрицательным благодаря наличию потенциального барьера в эффективном потенциале аниона. Поскольку такой барьер реализуется также в CaO и SrO , то предполагается, что и в этих оксидах дублетная структура экситонов должна быть обратной.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Whited R. C., Flatten C. J., Walker W. C. // *Solid State Commun.* 1973. V. 13. P. 1903—1905.
- [2] Roessler D. M., Walker W. C. // *Phys. Rev.* 1967. V. 159. N 3. P. 733—738.
- [3] Onodera Y., Toyozawa Y. // *J. Phys. Soc. Japan.* 1967. V. 22. N 3. P. 833—844.
- [4] Taurian O. E., Sprinborg M., Christensen N. E. // *Solid State Commun.* 1985. V. 55. N 4. P. 351—355.
- [5] Кондон Е., Шортли Г. Теория атомных спектров. М.: ИЛ, 1949. 440 с.
- [6] Kearney R. J., Cottini M., Grilli E., Baldini G. // *Phys. Stat. Sol. (b).* 1974. V. 64. N 1. P. 49—56.
- [7] Knox R. S., Inchauspe N. // *Phys. Rev.* 1959. V. 116. N 5. P. 1093—1099.
- [8] Нокс Р. Теория экситонов. М.: Мир, 1966. 219 с.
- [9] Луцик Ч. Б., Луцик А. Ч. Распад электронных возбуждений с образованием дефектов в твердых телах. М.: Наука, 1989. 263 с.
- [10] Vier D. T., Mayer J. E. // *J. Chem. Phys.* 1944. V. 12. N 1. P. 28—34.
- [11] Vidal-Valat B. G., Vidal J. P., Kurkt-Suonio K. // *Acta Cryst.* 1978. V. A34. P. 596—602.
- [12] Abarenkov I. V., Antonova I. M. // *Phys. Stat. Sol. (b).* 1979. V. 93. P. 315—323.
- [13] Зароченцев Е. В., Файн Е. А. // *ФТТ.* 1975. Т. 17. № 7. С. 2058—2064.
- [14] Bukowinski M. S. T. // *J. of Geophys. Research.* 1982. V. 87. N B1. P. 303—310.
- [15] Лобач В. А., Кулябин Б. Е., Жуков В. П., Медведева Н. И., Левашов М. В. // *ФТТ.* 1988. Т. 30. № 7. С. 2238—2240.
- [16] Lobatch V. A., Kulyabin B. E., Iukov V. P., Medvedeva N. I. // *Phys. Stat. Sol. (b).* 1990. V. 158. P. 239—249.
- [17] Лобач В. А., Рубин И. Р. // *ФТТ.* 1990. Т. 32. № 12. С. 3632—3636.
- [18] Демков И. Н., Рудаков В. С. // *ЖЭТФ.* 1970. Т. 59. С. 2035—2041.
- [19] Лобач В. А. // Конференция по квантовой химии твердого тела: Тез. докл. Рига, 1990. С. 109—110.
- [20] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика: Учебное пособие для вузов. Т. III. Квантовая механика (нерелятивистская теория). 4-е изд., испр. М.: Наука, 1989. 768 с.
- [21] Knox R. S. // *Phys. Rev.* 1958. V. 110. N 2. P. 375—381.
- [22] Gold A., Knox R. S. // *Phys. Rev.* 1959. V. 113. N 3. P. 834—839.
- [23] Собельман И. И. Введение в теорию атомных спектров. М.: Наука, 1977. 319 с.