

ПРИПОВЕРХНОСТНЫЙ АВТОЛОКАЛИЗОВАННЫЙ ЭКСИТОН В Li₂O**Ботов М.А.^{1*}, Кузнецов А.Ю.¹, Соколев А.Б.¹**¹⁾ Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия*E-mail: scibma@gmail.com**NEAR-SURFACE SELF-TRAPPED EXCITON IN Li₂O****Botov M.A.^{1*}, Kuznetsov A.Yu.¹ Sobolev A.B.¹**¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

This paper is devoted to ab initio (HF, B3LYP) study of self-trapped exciton in subsurface area of lithium oxide. Charging, geometric characteristics and luminescence energy were obtained.

Оксид лития, являясь структурно сравнительно простым материалом, имеет множество областей применений реакторов термоядерного синтеза до производства специальных стекол. Особый интерес представляет моделирование процессов релаксации электронных возбуждений в приповерхностных областях Li₂O.

В данной работе мы теоретически рассматриваем свойства и оптические характеристики автолокализованного экситона в тонкой пленке оксида лития, отслоенной от идеального кристалла.

Расчеты были выполнены при помощи программного пакета CRYSTAL в рамках приближения Хартри-Фоки и гибридного функционала плотности B3LYP с 30% точного обмена в периодических граничных условиях.

Были получены возмущения решетки и распределения зарядовой плотности для рассматриваемого дефекта, а также была рассчитана энергия люминесценции автолокализованного экситона в Li₂O

1. Dovesi R, Saunders V.R, Roetti C et al //CRYSTAL09 User's Manual (University of Turin). – (2013)
2. Knox R.S // Theory of excitons. – Solid state physics (Ed. by Seitz and Turnbull, Academic, New York) 5, (1963)