

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ СПЕКТРОВ, СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ И СПОНТАННОГО ИСПУСКАНИЯ В $N - I - P - I$ КРИСТАЛЛАХ

Уравнения Пуассона и Шредингера, используемые для нахождения потенциального профиля, уровней энергии и волновых функций для $n - i - p - i$ кристалла, могут быть решены аналитически только в гармоническом приближении. Учет ангармоничности и других факторов, влияющих на процессы поглощения и испускания излучения, усложняет исходные уравнения, решение которых возможно лишь с использованием численных методов.

Энергетические уровни и волновые функции для различных значений волнового вектора с учетом периодичности потенциала сверхрешетки в направлении оси z находятся из уравнения Шредингера, являющегося дифференциальным уравнением второго порядка:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(z)\right) \psi = E\psi, \quad (1)$$
$$\psi(z) = \varphi(z) \exp(ik_z z).$$

Здесь m - эффективная масса частицы, \hbar - постоянная Планка, k_z - волновой вектор, $V(z)$ - потенциал. Ввиду сложного вида потенциала, уравнение (1) решаем численно. После дискретизации получаем

$$\varphi_{i-1} e^{-ik_z h} + \left(-2 + \hbar^2 \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_i)\right) \varphi_i + \varphi_{i+1} e^{ik_z h}, \quad (2)$$

где h - шаг дискретизации. Для n шагов получаем $(n - 1)$ систему линейных уравнений, решаемых методом Гаусса. Для эффективной сходимости решения используются методы уточнения и локализации корней. По формуле Симпсона вычисляются интегралы перекрытия между волновыми функциями разрешенных состояний дырок и электронов.

Программный комплекс, написанный на языке Паскаль 5.0 на базе IBM PC AT, позволяет исследовать дисперсию энергии с ростом волнового вектора, зависимости спектров поглощения и спонтанного испускания от уровня накачки и характеристик $n - i - p - i$ кристалла. Результаты вычислений выводятся на экран или печатающее устройство в графическом виде.