

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ КОНСЕРВАТИВНОЙ РАЗНОСТНОЙ СХЕМЫ ВОЛНОВОГО УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СИММЕТРИИ СИЛОВЫХ КОЭФФИЦИЕНТОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ СОСЕДНИХ ИОНОВ В ТВЕРДЫХ РАСТВОРАХ А II В VI

Пырков В.Н.

vpyrkov@mail.ru +7 910 451 65 00

Широкое использование твердых растворов А II В VI в полупроводниковых устройствах позволяет говорить о необходимости определения спектра колебаний ионов данных твердых растворов. Ранее разностная схема волнового уравнения использовалась для моделирования и сопоставления наблюдаемого спектра отражения твердых растворов CdHgTe в дальнем инфракрасном диапазоне. Моделирование основывалось на основе усредненных силовых коэффициентов взаимодействия ионов. В данном докладе проводится исследование возможности определения симметрии силовых коэффициентов взаимодействия ионов ближайшего окружения в твердых растворах А II В VI на основе использованием консервативной разностной схемы волнового уравнения. Показано, что с помощью вышеуказанной разностной схемы могут быть определены собственные значения и функции одноэлектронного уравнения Шредингера для потенциала с многими центрами притяжения без использования базисных функций. Далее в докладе показано, что рассчитанные вышеуказанные собственные значения и функции могут быть использованы для определения симметрии силовых коэффициентов взаимодействия ближайших ионов твердого раствора. Определение симметрии силовых коэффициентов для различных комбинаций соседних ионов твердого раствора позволит уточнить модель спектра отражения твердых растворов в далекой инфракрасной области со структурой цинковой обманки.