

УДК 004.942

Хемій С. – ст. гр. СП-43

Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя

**ПРОГРАМНА СИСТЕМА ДЛЯ МАТЕМАТИЧНОГО
МОДЕЛЮВАННЯ СПЕКТРАЛЬНИХ ХАРАКТЕРИСТИК
ЕЛЕКТРОННИХ СТАНІВ З РІЗНИМИ ЕФЕКТИВНИМИ
ПОТЕНЦІАЛАМИ**

Науковий керівник: к.ф.-м.н., доцент Бойко І. В.

Khemii S.

Ternopil Ivan Puluj National Technical University

**SOFTWARE SYSTEM FOR MATHEMATICAL MODELLING OF
SPECTRAL CHARACTERISTICS OF ELECTRONIC STATES WITH
DIFFERENT EFFECTIVE POTENTIALS**

Supervisor: Ph.D. in Physics and Mathematics, associate professor Boyko I.V.

Ключові слова: спектральні характеристики, математична модель, ефективний потенціал

Keywords: spectral characteristics, mathematical model, effective potential

Однією з основних задач сучасної електроніки низьковимірних структур, що широко застосовуються у низці інженерних та природничих дисциплін, є створення точного математичного опису спектральних характеристик для кожного окремого випадку конкретно взятих параметрів. Підхід до розв'язання даних проблем виходить за межі класичних підходів та усе частіше вимагає застосування підходів, що належать до сфери інформаційних технологій, а саме інженерії програмного забезпечення. У розробці відповідного програмного забезпечення також помітно відсутність універсальних підходів до чисельного опису електронних станів та енергій активації у структурах зі складною геометрією потенціального поля та просторового конфайнменту. Крім того, бракує узагальнених алгоритмів, здатних працювати з такими математичними моделями в загальному випадку.

До розробки такого програмного забезпечення необхідно підійти комплексно, тобто розбивши проєктовану систему на компоненти, а також виконуючи процес моделювання у кілька етапів. На першому етапі слід виконати побудову математичних моделей ефективних потенціалів. На другому етапі варто побудувати різницеві схеми математичних моделей, програмна реалізація яких забезпечує математичне моделювання спектру, локалізації та розподілу квазічастинкових станів шляхом зміни вхідних параметрів. Останнім етапом є розробка гнучкої архітектури програмної системи, що дозволяє реалізовувати математичну модель із довільним локальним потенціалом, а також виконувати розрахунки та здійснювати візуалізацію параметрів моделі та її характеристик на діапазоні неперервної зміни вхідних даних.

У даній роботі згадані проблеми вирішено шляхом розробки математичних моделей для різних ефективних потенціалів, що характеризують локальні квантові ями. Розроблених математичні моделі ефективних потенціалів реалізовано як спектральні проблеми для стаціонарного рівняння Шредінгера на основі побудованих сіткових різницевих схем. Розроблено архітектуру та складові компоненти програмної системи, призначеної для математичного моделювання спектральних характеристик електронних станів з різними ефективними потенціалами.