

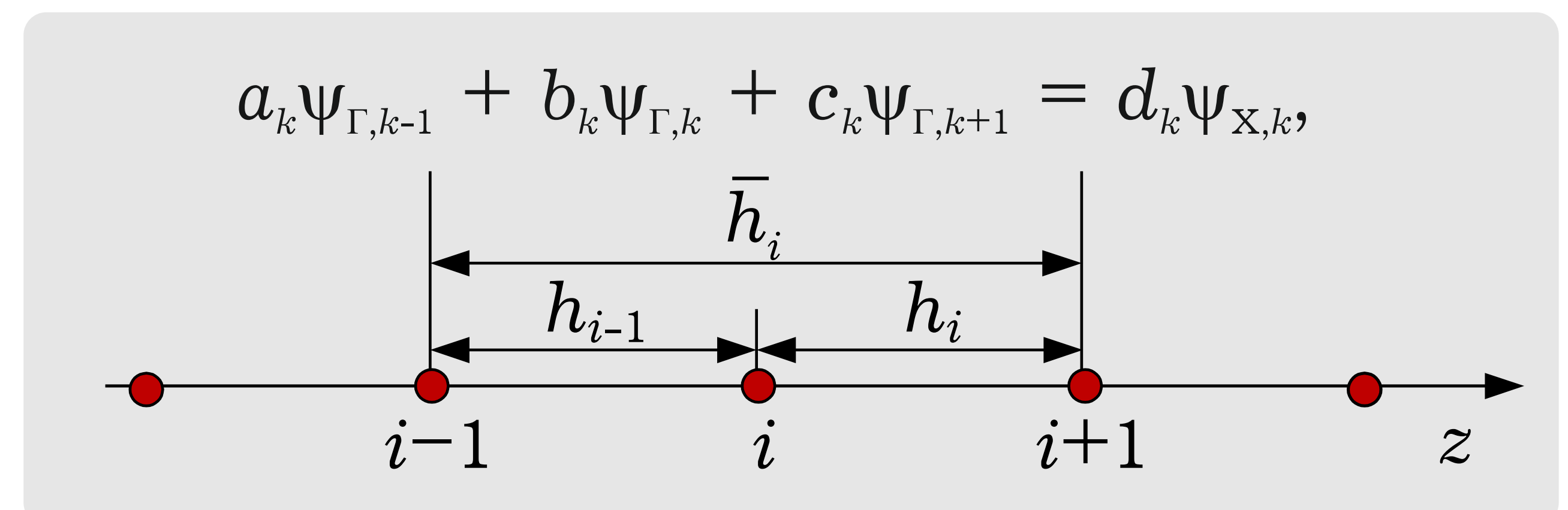
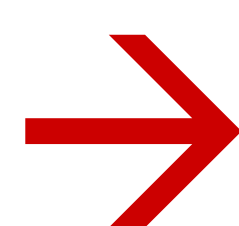
АДАПТАЦІЯ ТА ЧИСЕЛЬНА ВЕРИФІКАЦІЯ

+ При програмній реалізації використовувалися лише адаптивні алгоритми:

- а) консервативні скінченно-різницеві схеми для рівняння Шредінгера, отримані інтегро-інтерполяційним методом, що перевірені на 2-й порядок точності;
- б) скінченно-різницеві схеми для рівняння Пуассона;
- в) метод Томаса при знаходженні V_s та $y_{L(R)}$ зі СРС для однодолинної моделі та LU-факторизацію для СРС для дводолинної моделі
- г) інтегрування з використанням адаптивного методу Сімпсона для вектору (функція *quad* в *Matlab* перероблена для інтегрування відразу у всіх просторових точках)
- д) адаптивний метод розв'язання системи Шредінгера-Пуассона (лінеаризований метод Гумеля)

→ Приклад: СРС для рівняння Шредінгера з розривними коефіцієнтами:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} + U(z) \right] \psi_z(z) = E_z \psi_z(z)$$



Для внутр. точок

якщо i належить гетерограниці $i = k$:

$$\begin{aligned} a_k &= \frac{h_{k+1} m_{k+1}}{h_k m_{k-1}} & c_{\Gamma,k} &= 1 \\ b_k &= -1 - \frac{h_{k+1}}{h_k} \frac{m_{k+1}}{m_{k-1}} + \frac{h_{k+1} \bar{h}_k m_{k+1} 2m(E - V_{\Gamma,k})}{\hbar^2} \\ d_k &= -\frac{2n_{k+1} m_{k+1} m \alpha}{\hbar^2} \end{aligned}$$

якщо i не належить гетерограниці $i \neq k$:

$$\begin{aligned} a_i &= \frac{h_{i+1}}{h_i} \\ b_i &= -1 - \frac{h_{i+1}}{h_i} + \frac{h_{i+1} h_i m_i 2m(E - V_{\Gamma,i})}{\hbar^2} \\ c_i &= 1 \end{aligned}$$

Верифікація чисельних алгоритмів та програмного коду

Результати несамоузгодженого чисельного моделювання зіставлялися з результатами, що дають **принципово відмінні** методи. Отримано такі результати:

- За «0» напруги $T(E_z)$, розрахований за допомогою базової однодолинної моделі, співпадає з $T(E_z)$, що розрахований за допомогою методу матриць передачі.
- Максимуми коефіцієнту $T(E_z)$ співпадають з енергіями метастабільних рівнів, що розраховано в рамках теорії збурень.
- ВАХ, розрахована з залученням методу функцій Ейрі (вид методу матриць передач) співпадає з ВАХ, що розрахована за допомогою базової чисельної несамоузгодженої моделі.
- $T(E_z)$ за «0» напруги співпадає з результатами, що отримані з методу матриць передачі для 2-зонної моделі, що вперше був розроблений спеціально для цієї мети