

## НАУКОВА НОВИЗНА ОТРИМАНИХ РЕЗУЛЬТАТІВ

- 1. Уперше** для моделювання РТД запропоновано ієрархічний підхід та реалізовано відповідний ієрархічний ряд, що складається з моделей трьох рівнів: аналітичної, чисельних одно- та дводолинної, що дозволяє використовувати переваги як аналітичного, так і чисельного моделювання. Для кожної моделі визначено універсальність, функціональність, адекватність та зв'язок з іншими моделями ряду. Це дозволяє враховувати лише значущі для конкретних цілей моделювання ефекти, виділяти з ряду фізичних явищ одне або кілька, та зосереджуватися на їх дослідженні.
- 2.** Кожну з моделей ієрархічного ряду було **вдосконалено** порівняно з наявними аналогами. Так, аналітична модель РТД, на відміну від аналогів, **враховує** відмінності ефективних мас в різних шарах, а для знаходження енергетичних рівнів у квантовій ямі та рівня Фермі в резервуарах використовуються більш адекватні методи. Чисельна однодолинна модель **покращена** завдяки тому, що самоузгодження проводилося в тому числі в спейсерних шарах, границя зшивки обиралася на границі між спейсерами та високолегованими областями, а електронний газ в резервуарах вважався виродженим. Це дозволило **позбутися «припасувальних» параметрів** (поверхневий заряд на гетерограницях та положення границі зшивки квантової і класичної області), та скоректувати нефізичне припущення про невиродженість електронного газу в резервуарах.
- 3. Уперше**, базуючись на оригінальному методі, заснованому на введенні «віртуального» резервуару, описано накопичення електронів у емітерній квантовій ямі та електронний транспорт через неї. За допомогою чисельного моделювання показано, що ці ефекти виявляються в особливостях, що виникають на падаючій ділянці ВАХ РТД (далі – «артефактах»). На відміну від попередніх робіт (де «артефакти» пов'язували з іншими чинниками), достовірність саме такого механізму їх формування нещодавно була підтверджена експериментально. Відтак, вперше вдалося отримати адекватні уявлення про важливу для функціонування ділянку ВАХ РТД.
- 4. Уперше**, базуючись на результатах, отриманих методом псевдопотенціалів, було використано фізично виправдану апроксимацію гетеробар'єрів. Це дозволило отримати адекватні результати при верифікації по ВАХ без «припасувального» параметру, що описує форму гетеропереходів.
- 5. Уперше** розроблено математичну модель, чисельні алгоритми якої адаптовані до задач, які виникають при моделюванні РТД. Так, адаптивними є процедури інтегрування, обернення матриць, самоузгодження; усі побудовані скінченно-різницеві схеми перевірено на консервативність та належність до 2-го класу точності.