

энергонезависимой памяти технологических режимов и операций, снизить энергопотребление за счет оптимизации технологических режимов.

Литература:

1. Муромцев Ю.Л., Орлова Л.П., Муромцев Д.Ю. Информационные технологии энергосберегающего управления динамическими режимами. – Приборы и системы. Управление, контроль, диагностика, 2000, №7. - С.13-16.

ПРОГРАММА ДЛЯ КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ МЕТОДОМ ХАРТРИ-ФОКА

Г. А. Боднарчук

Самарский государственный аэрокосмический
университет имени академика С.П. Королева, г. Самара

Прогресс в развитии микроэлектроники последнего времени во многом определяется успехом в подборе используемых полупроводниковых материалов, технологических процессов, обеспечивающих малую дефектность структур и скорость деградации [1,2]. Одновременно необходимо, чтобы используемые материалы удовлетворяли большому количеству, порой, противоположных требований. Развитие вычислительной техники позволило осуществить быстрое расширение возможностей квантово-механических методов расчета свойств твердых тел. С их помощью удалось добиться приемлимой точности в расчете большого количества практических задач (расчет стационарного состояния системы, расчет энергий ионизации, энергии образования дефектов и др.).

К настоящему моменту разработано большое количество методов и расчетных методик для решения квантово-механических систем большого размера. Условно, все методы можно разделить на эмпирические, полуэмпирические и неэмпирические (*ab initio*).

Предлагаемая здесь программа относится к последней группе. Она позволяет, используя минимальный набор исходных данных, итерационным методом решить задачу на нахождение собственных функций и собственных значений квантово-механической системы, т.е. решить стационарное уравнение Шредингера.

Программа реализована на основе метода Хартри-Фока-Рутана. В качестве исходных данных для всех атомов составляющих систему вводятся их номера, координаты, главное и орбитальное числа, магнитное квантовое число, заряд атомного ядра, потенциалы ионизации для состояний, описываемых базисными функциями, слетеровские экспоненты базисных орбиталей.

В качестве молекулярных (кристаллических) орбиталей используются линейные комбинации атомных орбиталей (ЛКАО)

$$\varphi_j(r) = \sum_{p=1}^N C_{pi} \chi_p(r) \quad (1)$$

где: $\varphi_i(r)$ - молекулярная орбиталь, $\chi_p(r)$ - известные атомные орбитали, C_{pi} - искомые коэффициенты.

Атомные орбитали представляются в виде слетеровских орбиталей. В программе используется гауссовские аппроксимации функций.

Решение задачи сводится к диагонализации матрицы оператора Фока F, т.е. к отысканию ее собственных векторов. Диагонализация осуществляется методом вращений. В результате получаются собственные вектора и собственные значения в порядке возрастания последних.

Литература:

1. Пигалов М.Н. Исследование полупроводниковых бескорпусных микросхем // Физические основы надежности и деградации полупроводниковых приборов: Тез.доклады 3-ей всесоюзной конф. 27-29.05.91.-Киев, 1991. Ч.2-С.36.

2. Пигалов М.Н., Чернобровин П.Г., Архипов А.В. Исследование процессов деградации полупроводниковых микросхем // Шумовые и деградационные процессы в полупроводниковых приборах: Тез. доклады всесоюзной ПТС 12-16.11.90.-п.Черноголовка, 1990. Ч.2.-С.3-4.

АДАПТИВНОЕ УСТРОЙСТВО ВЫЧИСЛЕНИЯ ПРЯМЫХ ТРИГОНОМЕТРИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ

М.В. Руфицкий, А.К. Флиппов

Владимирский государственный университет, г.Владимир

В настоящее время прямые тригонометрические функции (ПТФ) находят применение в самых различных областях науки и техники - при решении траекторных задач, в трехмерном моделировании, при компрессии мультимедийных данных, в телекоммуникационных системах и т.д. Однако при обработке данных в режиме реального времени часто возникает необходимость в аппаратной реализации алгоритмов расчета ПТФ. При этом главным недостатком классических вариантов (на основе стандартных, заказных или полузаказных микросхем) является их ориентация на довольно узкий спектр вычислительных методов и разрядностей данных. В предельном случае подобные операции реализуются на основе одного из численных алгоритмов и рассчитаны на использование единственного формата данных. Такой подход к вычислениям оправдан только при выполнении двух условий:

- требования к точности расчетов остаются постоянными при решении