

Computational Microelectronics [HW-7]

Professor: Sung-Min Hong

Data: 18/10/22

Student ID: 20172106

Student name: Hyo Seok, Kim

1. Simulation explanation

In this homework, 우리는 슈뢰딩거 방정식을 사용하여, 3D infinite potential well 에서의 Electron density 를 얻을 예정이다. 경계조건은 x,y,z 축에 대하여, 각각 $L_x = L_y = 100 \text{ nm}$, $L_z = 5 \text{ nm}$ 이며, Mesh size 는 모든 축에 대하여, 0.1 nm 로 설정한다.

그리고, x 방향 과 y 방향의 Electron 질량은 각각 $0.19 \cdot m_0$, $0.19 \cdot m_0$, $0.91 \cdot m_0$ 로 설정한다. 이 시뮬레이션에서는, Fermi energy 를 -0.1 eV 부터 0.1 eV 까지 변경하면서, z 방향 위치에 따른 Electron density 의 변화 양상 과 각각의 Fermi energy 에서의 Integrated Electron density 를 이해하고자 한다.

Elementary charge, [C]	1.602192e-19
Vacuum permittivity, [F/m]	8.854187817e-12
Boltzmann constant, [eV/K]	8.6173303e-5

Planck constant, [J*s]	1.380662e-23
Electron rest mass, [kg]	9.109534e-31
Temperature, [K]	300.0
Fermi energy, [eV]	From -1.0 eV to 1.0 eV

Table.1: Simulation parameters

위 시뮬레이션에서 사용한 Parameter 는 Table.1 에서 확인할 수 있다.

2. Result and discussion

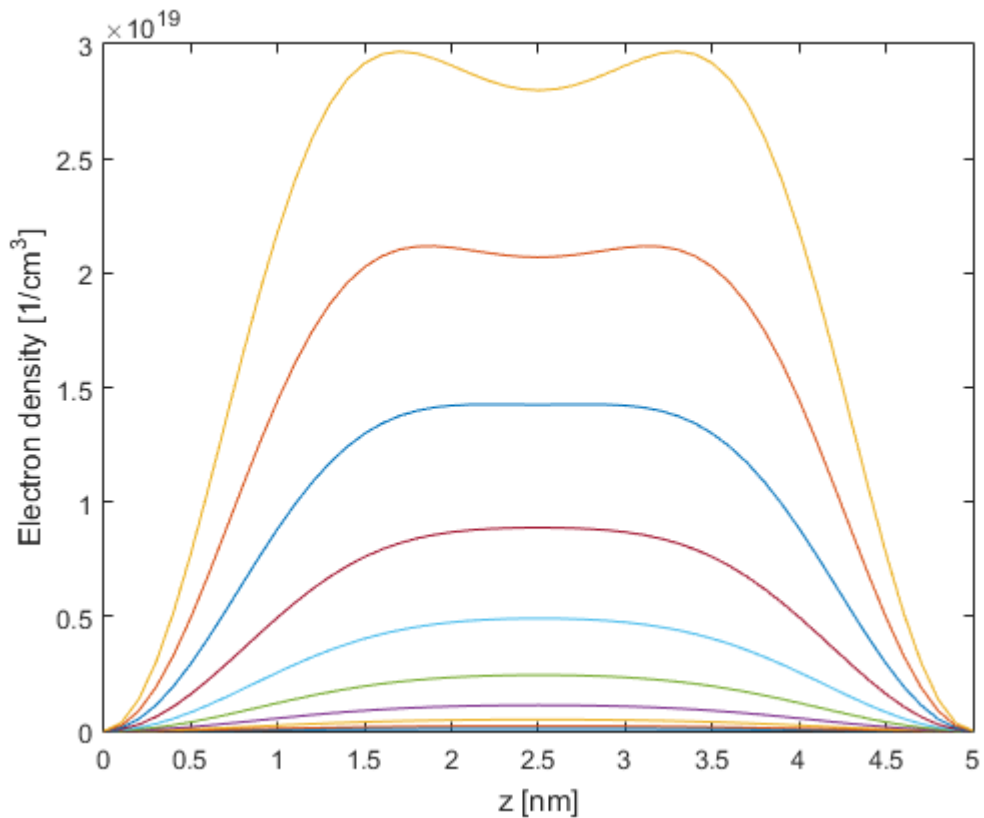


Figure 1. Electron density vs Position in z-axis

Fermi energy 를 -0.1 eV 부터 0.1 eV 까지 증가시킴에 따라, Position 에 따른 Electron density 가 점차 증가하였다. 게다가, 증가하면서, 그래프의 모양이 점차 $n = 1$ 의 the lowest normal mode 에서 $n = 3$ 의 the high order normal mode 의 모양으로 변화하고 있음을 알 수 있다. 이는 Fermi energy 가 증가하면서, High order 의 Wave function 을 가지는 Electron 의 Density 가 증가했다고 해석 할 수 있다. 즉 전체 Electron 중에 $n = 3$ normal mode 를 Wave function 으로 가지는 비율이 증가하고 있다.

두번째는 그래프는 z-방향으로 Integrated Electron density 가 Fermi energy 에 따라서 어떻게 변화하는지 살펴보았다. 앞서 보인 Figure1 에서 예상할 수 있듯이, 점차 증가하게 되는데, 이것이 Log-scale 로 증가함을 알 수 있다. 이에 대한 결과는 Figure 2. 에서 확인가능 하다.

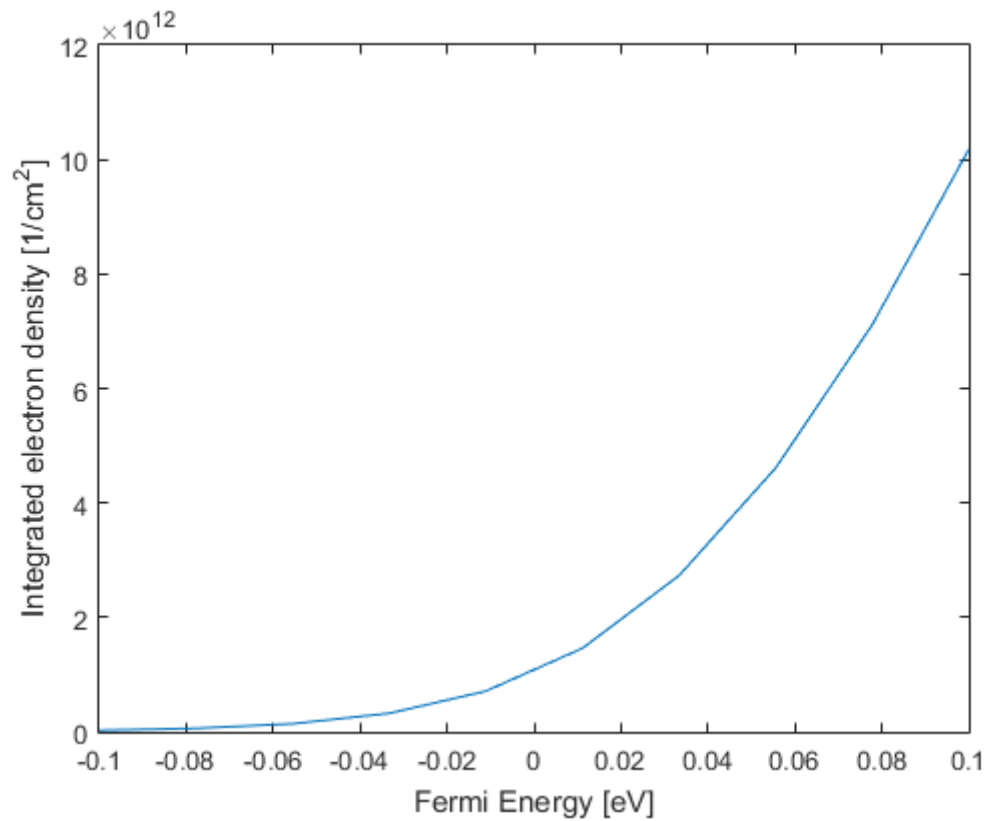


Figure 2. Integrated Electron density vs Fermi energy