

HW7 : Electron density in 1D-confined 3D box

20171057

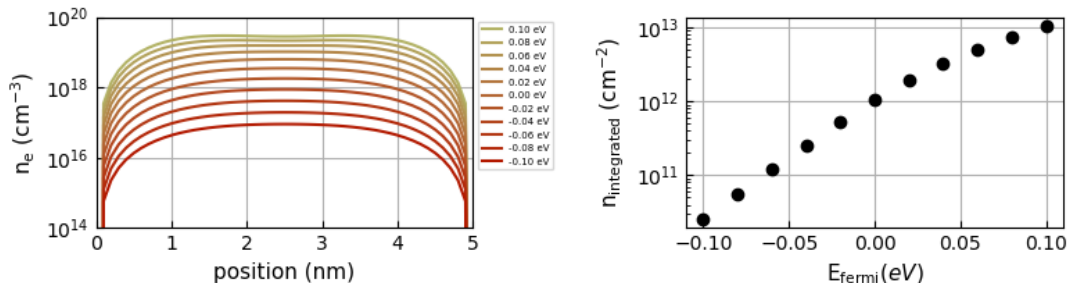
Dongkyu Lee

Introduction and Approach

Z-방향에 대해 confined 되어있는 3 차원 infinite potential box 를 고려한다. 이번 과제에선 이 상자 안의 electron density 를 구하고자 한다. 상자의 X, Y 방향 크기는 100nm 로 고려하고 Z 방향은 5nm 로 고려하였다. Electron 의 conductivity effective mass 역시 X,Y 방향은 $0.19m_0$, Z 방향은 $0.91m_0$ 로 anisotropy 를 고려하였다. 각 subband 의 occupancy 는 300K 의 fermi-dirac 분포를 이루고 있음을 고려하였다. Fermi energy 를 -0.1eV 에서 0.1eV 까지 변화시키며 상자 속 electron density 의 변화를 보았다.

Results and Conclusions

Electron density in a box



좌측의 그래프는 Fermi energy 의 변화에 따른 electron density 의 위치별 변화를 나타낸다. boundary 에선 0 의 밀도를 가지고 중앙으로 갈수록 전자농도가 증가하는 모습을 보인다. 이것은 이전 과제로 풀어본 poisson equation 과 상반된 농도분포임을 알 수 있다. Fermi 에너지가 증가함에 따라 electron concentration 도 증가해가는데, $-0.1\sim 0.04\text{eV}$ 까지의 범위에선 logarithmic 하게 증가함을 알 수 있고, Fermi energy 가 그 이상으로 증가할 경우엔 전자밀도의 증가폭이 점점 감소함을 알 수 있다. 특히 중앙부분의 증가폭이 더 크게 줄어들면서 아치형태의 density 분포에서 벗어남을 알 수 있다.

오른쪽의 그래프는 Fermi energy 변화에 따른 integrated electron concentration 을 그린 것이다. 좌측의 그래프에서 알 수 있듯이 Fermi energy 가 증가함에 따라 concentration 은 증가하는 것을 알 수 있다.