

HW3 : Source-free Heterojunction

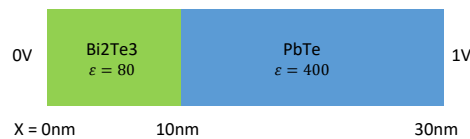
20171057

Dongkyu Lee

Introduction and Approach

현재 열전소재 재료의 열전도도에 대해 연구중이다. 그 때문에 이번 과제를 위한 heterojunction model 로 대표적인 열전물질로 알려진 Bi_2Te_3 와 PbTe 의 junction 을 사용하겠다. PbTe 와 Bi_2Te_3 모두 relative permittivity 의 isotropy 가 존재하지만, statistical relative permittivity 로서 각각 $\epsilon_{\text{Bi}_2\text{Te}_3} = 80$, $\epsilon_{\text{PbTe}} = 400$ 를 사용하였다. 또한 Bi_2Te_3 의 폭을 10nm, PbTe 의 폭을 20nm 로 설정하였다. Potential 의 boundary condition 은 $x=0\text{nm}$ 에서 0V, $x=30\text{nm}$ 에서 1V 로 두었다.

즉, 우리가 이번에 계산할 모델은 다음과 같다.



Result and Conclusion

위치에 따른 potential 을 numerics 로 구하고, analytic 하게 구한 potential 과 비교하였다. Numerics solution 은 수업시간에 배운 generalized poisson equation 을 풀어 구하였다.

Analytic solution 은 우선 capacity 의 analytic solution 얻어야 한다. 주어진 dielectric constant 와 width 에 대해 Capacity 는 $C_i/A = \frac{\epsilon_i \epsilon_0}{W_i}$ 로 구할 수 있으며 이것은 Bi_2Te_3 에 대해 $7.08\text{E-}6 \text{ F/cm}^2$, PbTe 에 대해 $1.77\text{E-}5$

F/cm^2 이다. 이것으로 부터 Total capacity 는 $C_T =$

$\left(\frac{1}{C_1} + \frac{1}{C_2}\right)^{-1}$ 로 구할 수있으며 이것은 $5.057\text{E-}6 \text{ F/cm}^2$ 이다.

구한 capacity 로 부터 junction 의 contact 부의 potential 은

$$\phi = 1 - \frac{C_T V}{C_2}$$

로서 구할 수 있다.

이로 부터 구한 junction contact($x=10\text{nm}$) 부분의 potential 은 numerical solution = 0.714286, analytical solution = 0.714286 으로 정확하게 일치함을 알 수 있다. 좌측 그림은 numerical solution(red dot), analytic solution(blue line)을 위치에 따라 그린 것이다.

