

## HW8 : Schrodinger-Poisson Solver

20171057

Dongkyu Lee

### Introduction and Approach

지난 HW6 에서 고려한 모델에 대해, 이번에는 quantum confinement effect 가 carrier density 에 주는 영향을 구하려 한다. 기존에 풀었던 방식대로 nonlinear poisson equation 을 푼 결과와, 이 결과를 initial potential 로 사용하여 Schrodinger-Poisson equation 을 푼 결과를 비교한다. 또한 두 방법을 사용하여 gate voltage 의 변화에 대해 integrated electron density 의 변화를 보고 quantum effect 가 double-gate MOS device 의 효율에 주는 영향을 확인할 것이다.

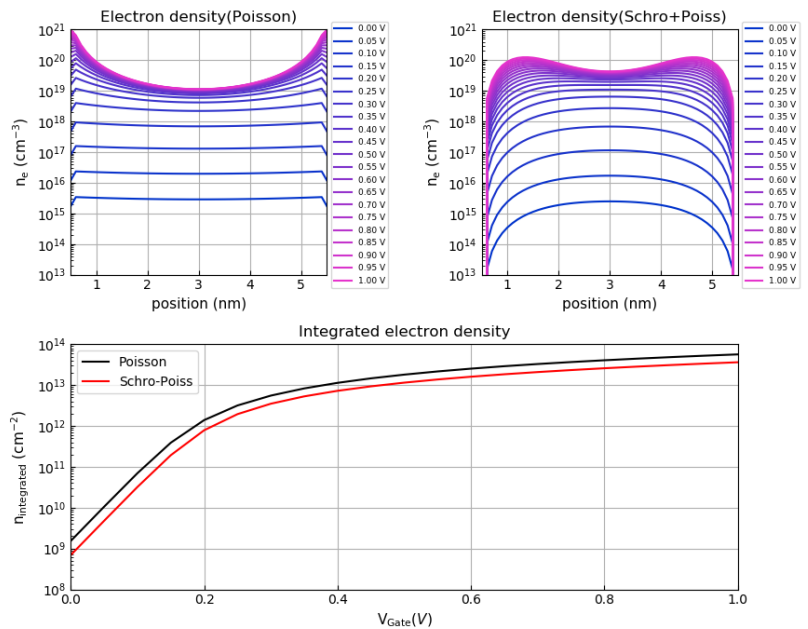
Nonlinear poisson equation 은 20 번의 Newton method step 후에 나오는 결과를 사용하였다. 또한 Schrodinger-Poisson solver 는 total energy 의 convergence 를 기준으로, total energy 가  $10^{-6}$  eV 로 수렴할 때까지 Newton's method step 을 진행하였다.

### Results and Discussion

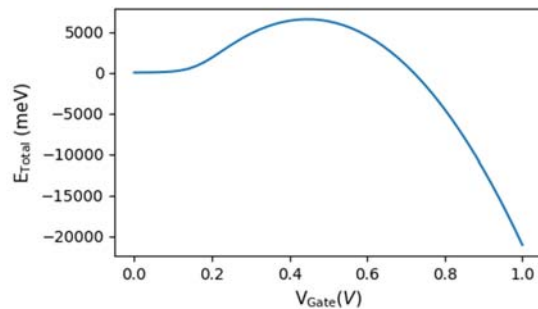
결과는 오른쪽의 figure 에서 확인할 수 있다. 오른쪽 figure 의 위 두 그래프는 각각 poisson solver 와 schrodinger-poisson solver 로 부터 나온 position 에 따른 electron concentration 을 보여준다. Poisson solver 로 부터 나온 carrier density 는 기존 숙제에서 구했던 것과 같이 아래로 볼록한 형태를 띠을 알 수 있다. 이전 숙제에서 구했듯이 gate voltage 가 커질수록 처음에는 logarithmic 한 증가폭을 보이다가 점점 증가폭이 작아지고 그것은 가운데일수록 더욱 더 증가하지 않음을 알 수 있다. Schrodinger-Poisson solver 로 부터 나온 결과의 경우 gate voltage 가 낮을 때는 아치형, gate voltage 가 높을 때는 m 형을 띠을 알 수 있다. Gate voltage 가 증가함에 따른 carrier density 의 증가폭은 Poisson equation 과 비슷한 모습을 보인다.

밑의 그래프는 gate voltage 의 변화에 따른 integrated carrier concentration 을 나타낸다. Poisson solver 로 부터 나온 classical result 에 비해, schrodinger-poisson solver 로 부터 나온 quantum result 가 같은 gate voltage 에서 훨씬 낮은 (1/3 이하의) carrier density 를

### Schrodinger-Poisson Solver



좀을 알 수 있다. 이것은 교수님의 2018 년 L11 lecture file 에서 제공된 결과와 일치하는 것을 알 수 있다. 만약  $10^{13} \text{ cm}^{-2}$  이상의 concentration 에서 device 의 on/off 가 결정된다면, classical result 에 비해 quantum effect 에 의해 0.1V 정도의 threshold voltage 의 차이가 난 다는 것을 알 수 있다.



이상하게도(?) 수업시간에 문제가 발생할 거라는 수업시간 교수님의 언급과는 다르게, 계산과정에서 문제는 전혀 발생하지 않았다. Gate voltage 가 높아감에 따라 convergence 과정에서 energy 의 oscillation 은 존재하였지만, 금방 cutoff energy 이내로 수렴하는 것을 확인하였다. Poisson solver 로 부터 나온 initial potential 로 부터 나오는 초기 에너지는 4000meV 정도인데, Convergence energy 가 그것보다 낮은 0.3V 의 gate voltage 에 대해선 oscillation 없이 금방

수렴하지만, 그 이상의 voltage 에 대해선 수렴폭이 꽤 큰것을 확인하였다. 또한 total energy 의 절대적인 크기가 0.7V 정도에서 positive 에서 negative 로 변하는 것을 알 수 있다. 이것의 원인은 확인하지 못하였다. 왼쪽 그래프는 gate voltage 에 대한 total energy 를 그린 것이다.