

# Computational Microelectronics HW.11

EECS, 20204003

Phil-Hun, Ahn

## 1. Subbands

### 1) Used Model

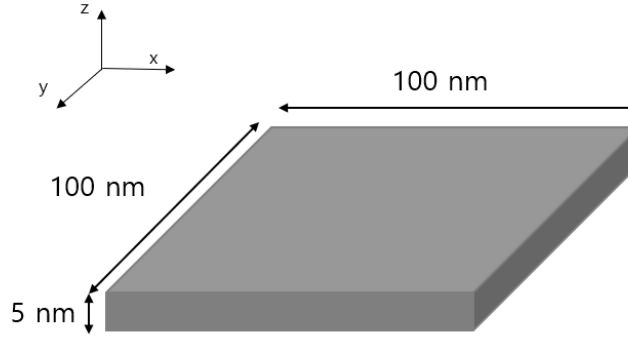


Fig. 1 z confined model

위 그림은 이번 과제에서 사용한 육면체 모델이며, z 방향으로만 매우 짧은 5nm이고, 나머지는 100nm의 긴 길이를 가진다. Confined 되어있으므로, 여러 개의 subband들이 형성되며, 각각의 subband에 존재하는 전자들을 합쳐서 총 전자농도를 구하게 된다. 경계는 x, y 축으로는 Periodic Condition을 가진다. Valley는 z방향 유효질량이 무거운 것만 고려하였다.

이에 대한 수식은 아래에 나와있다. ( $m_d = \sqrt{m_{xx}m_{yy}}$ )

$$\begin{aligned} \frac{L_x L_y}{(2\pi)^2} (2\pi) \int_0^\infty dE_{xy} \frac{m_d}{\hbar^2} f_{FD}(E_{xy} + E_{z,n}) &= \frac{L_x L_y}{(2\pi)^2} (2\pi) \frac{m_d}{\hbar^2} \int_0^\infty \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_{xy} + E_{z,n} - E_F}{k_B T}\right)} dE_{xy} \\ &= \frac{L_x L_y}{(2\pi)^2} (2\pi) \frac{m_d}{\hbar^2} \int_0^\infty \frac{\exp\left(\frac{-E_{xy} - E_{z,n} + E_F}{k_B T}\right)}{1 + \exp\left(\frac{-E_{xy} - E_{z,n} + E_F}{k_B T}\right)} dE_{xy} = \frac{L_x L_y}{(2\pi)^2} (2\pi) \frac{m_d}{\hbar^2} k_B T \left(-\ln(1 + \exp\left(\frac{-E_{xy} - E_{z,n} + E_F}{k_B T}\right))\right) \Big|_{E_{xy}=0}^{E_{xy}=\infty} \\ &= \frac{L_x L_y}{(2\pi)^2} (2\pi) \frac{m_d}{\hbar^2} k_B T \ln(1 + \exp\left(\frac{-E_{z,n} + E_F}{k_B T}\right)) \end{aligned}$$

위 결과는 각 subband에 대한 전자의 개수(차원 없음)가 나오며, spin degeneracy가 고려되지 않았다. Electron density를 구하기 위해 위의 수식을 이용하여 다음과 같이 나타낸다.

$$n \text{ (cm}^{-2}\text{)} = \frac{2}{L_x L_y} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{L_x L_y}{(2\pi)^2} (2\pi) \frac{m_d}{\hbar^2} k_B T \ln(1 + \exp\left(\frac{-E_{z,n} + E_F}{k_B T}\right))$$

하지만 실제로 고려하는 subband 개수는 무한대가 아닌, 충분한 결과를 만족하는 값으로 지정한다.

## 2) Results

### a) Electron density at each Fermi energy.

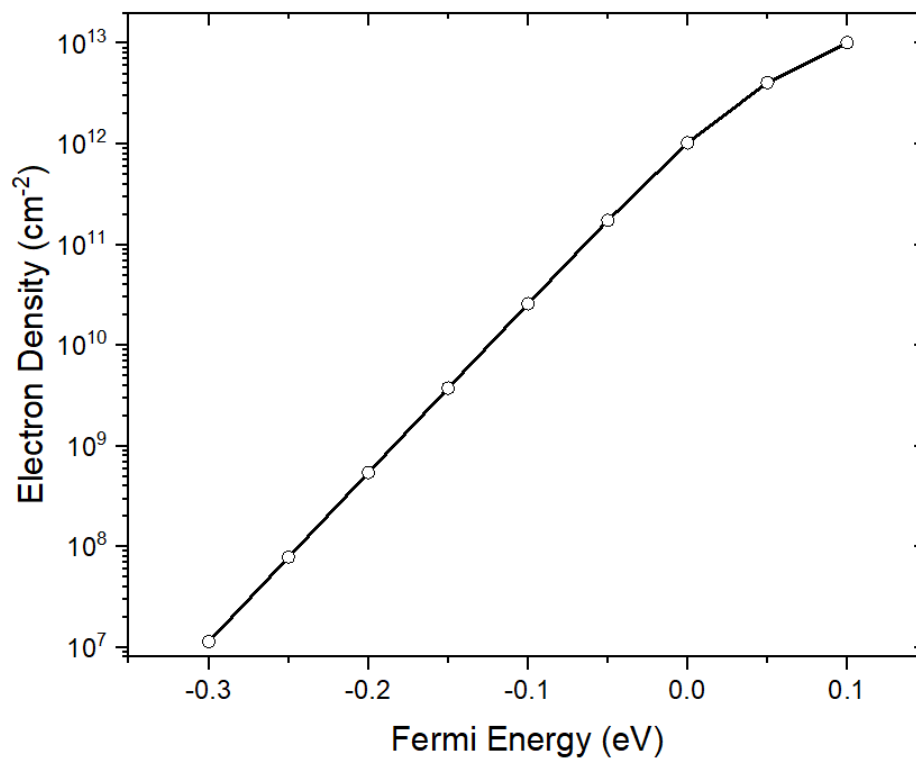


Fig 2. Fermi Energy vs. Electron Density graph.

위의 그래프는 전자 농도 그래프로, subband 개수는 50개까지 고려한 결과이다. Fermi energy가 증가함에 따라 점점 subband들에 전자들이 채워지면서 electron density가 커지는 것을 확인할 수 있다.

**b) Electron density at different maximum number of subband considered.**

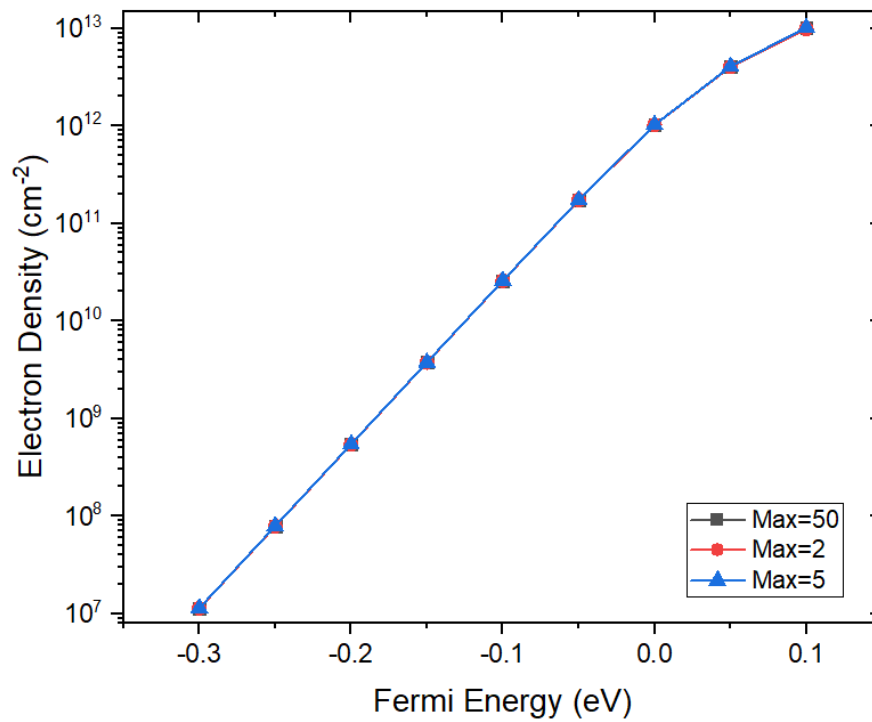


Fig 3. Fermi Energy vs. Electron Density graph with the different number of subbands are considered.

그림에서 확인 가능하듯, subband의 고려되는 개수를 변화함에 따라 큰 차이가 없는 것을 확인할 수 있다. 즉, 에너지가 작은 몇 개의 subband에 의해서 electron의 개수가 정해지는 것을 확인할 수 있다.