

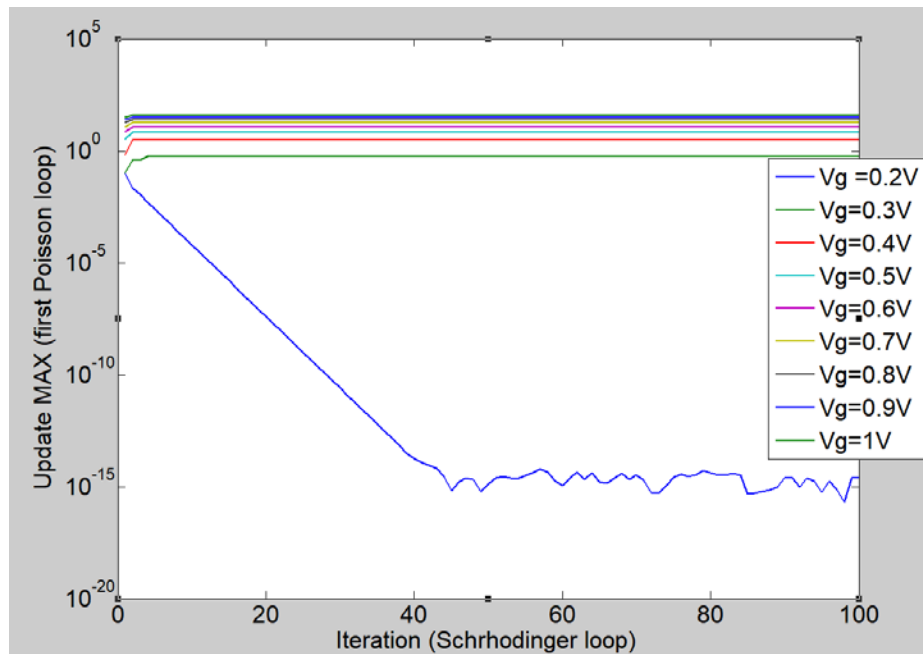
Problem #1

이번 과제는 지난 HW 12를 확장시키는 과제로, Schrodinger equation으로 얻은 전자 농도를 다시 Poisson equation에 넣어서 electrostatic potential을 업데이트하고 다시 Schrodinger equation으로 전자농도를 얻는 과정이 반복된다. 따라서 전체 Schrodinger equation을 푸는 loop와 그안에서 poisson equation을 푸는 loop를 가지게 된다. Convergence monitoring은 전체 Schrodinger equation loop 안에서 poisson equation의 첫 번째 loop의 update 벡터의 maximum 값을 확인하였다.

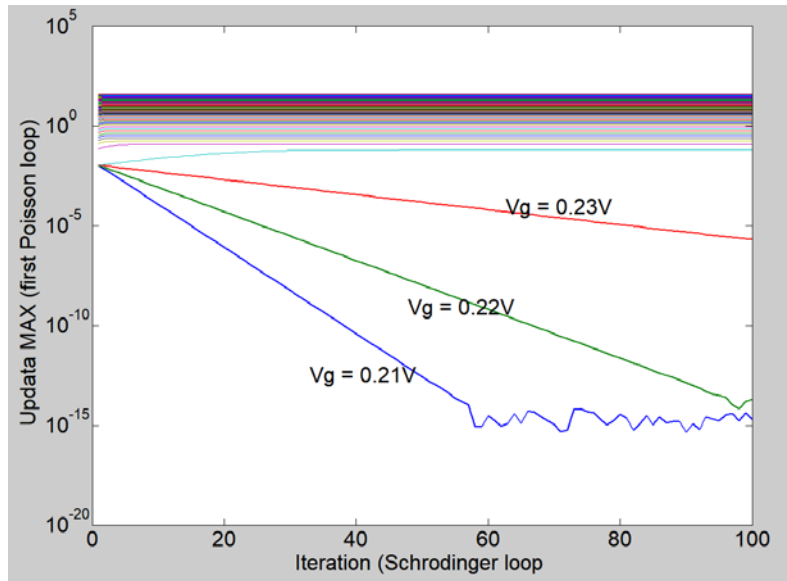
Poisson equation을 푸는 방법은 두가지로 사용하였다. 하나는 Schrodinger equation으로 얻어진 전자농도를 상수로 넣는 방법과, 다른 하나는 전자 농도의 변화가 exponential의 형태를 따르는 방법을 사용하였다.

계산 결과는 아래와 같다.

먼저, Schrodinger equation에서 얻은 전자농도를 상수로 넣었을 때이다. V_g 를 0V부터 0.1V씩 증가시키면서 계산을 진행하였고, 0.2V까지는 수렴이 되는 것을 볼 수 있었다. 그러나 그 이후 step부터는 수렴이 되지 않았다.

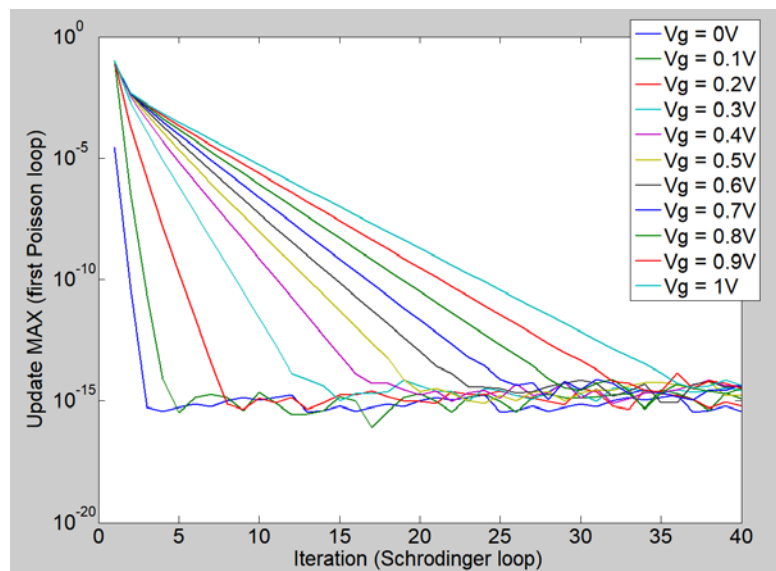


위의 그래프를 보면 V_g 가 0.3V에서부터는 iteration을 증가시켜도 수렴이 되지 않는 것을 볼 수 있다. Step 간격을 0.01V로 줄여도 V_g 가 커지게 되면 수렴 문제가 계속해서 생기고 있다.



위와 같이 V_g 가 0.23V에서도 수렴성이 좋지 않고, 0.24V에서부터는 수렴이 되지 않고 있다. 따라서 electron을 상수로 넣는 방법으로는 Schrodinger-Poisson solver에서 좋은 해를 구하지 못하였다.

다음은 Schrodinger equation에서 얻은 전자 농도를 Poisson equation에 넣을 때, 전자 농도의 변화가 exponential의 형태를 따르는 방법을 사용한 결과이다. V_g 의 간격은 0.1V로 하였다.



위의 결과에서 보이는데로, V_g 가 커질수록 수렴성이 떨어지기는 하지만 수렴이 되고 있는 것을 확인 할 수 있다. 이 결과를 토대로 얻어진 전자 농도와 non-self-consistent한 결과의 비교는 아래와 같다. 빨간색 결과는 self-consistent, 파란색은 non-self-consistent, 초록색은 nonlinear Poisson equation에서 얻은 결과이다. V_g 가 0.7V부터는 self-consistent와 non-self-consistent의 결과만 비교하였다.

