

Problem #1

문제에 주어진 조건에 따라서 dx 를 0.1nm로 설정하고, N 을 25로 설정하였다. Interface는 $N=6$ ($x=0.5\text{nm}$)에 생기게 된다. 수업의 내용을 따르게 되면, A 행렬은 25×25 의 크기를 가지며, 6 번째 행을 기준으로 2~5 행은 SiO_2 의 permittivity에 관한 성분들이 들어가고, 7~24 행은 HfO_2 의 permittivity에 관한 성분을 가지게 될 것이다. $A(6,5) = 3.9$, $A(6,6) = -(3.9+22)$, $A(6,7) = 22$ 의 성분을 각각 가지게 된다. 이렇게 생기는 A 행렬을 가지고 풀 때, boundary condition으로 $x = 2.4\text{nm}$ 에 1V를 가하는 것으로 설정하였다. 이 식을 풀어주게 되면 위치에 따른 potential을 얻을 수 있게 된다.

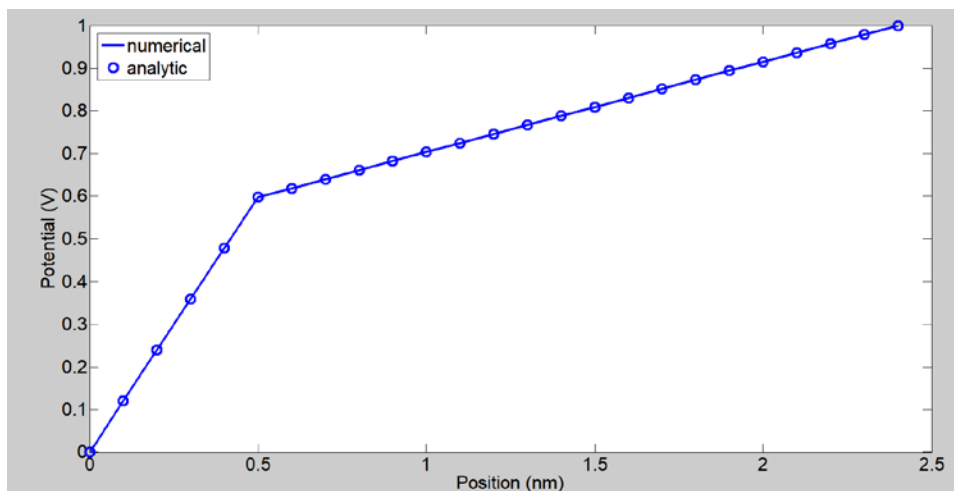
그리고 비교를 위해서 analytic한 식으로도 풀어주었다. SiO_2 쪽의 포텐셜을 ϕ_1 , HfO_2 쪽의 포텐셜을 ϕ_2 라 하고 연립방정식을 세워주게 되면,

$$\begin{cases} \phi_1(x) = c_1x + c_2, & 0 < x \leq 0.5 \text{ nm} \\ \phi_2(x) = c_3x + c_4, & 0.5 \text{ nm} < x \leq 2.4 \text{ nm} \end{cases}$$

여기서 경계조건 $x = 0$ 에서 $\phi=0$, $x=2.4\text{nm}$ 에서 $\phi=1$ 과 두 유전율 차이의 비율에 의해서 기울기 C_1 , C_3 의 비율이 결정되는 조건을 이용된다 ($C_1 \cdot 3.9 = C_3 \cdot 22$). 이러한 조건을 가지고 풀어주게 되면,

$$\begin{cases} \phi_1(x) = c_1x, & 0 < x \leq 0.5 \text{ nm} \\ \phi_2(x) = \frac{3.9}{22}c_1x + 1 - \frac{3.9}{22}c_1 \cdot 2.4\text{nm}, & 0.5 \text{ nm} < x \leq 2.4 \text{ nm} \\ c_1 = \frac{1}{2.4\text{nm}(\frac{5}{24} + \frac{19}{24} \cdot \frac{3.9}{22})} \end{cases}$$

앞서 나온 numerical한 풀이와 analytic한 식 결과를 같이 그려주게 되면 아래 그래프와 같다.



Numerical하게 얻은 결과로부터 SiO₂ 영역과 HfO₂ 영역에서의 E field와 D field를 구할 수 있게 된다. E field는 $\frac{\phi_{interface}-\phi_1}{0.5 \text{ nm}}$, $\frac{\phi_{25}-\phi_{interface}}{1.9 \text{ nm}}$ 로 각각 구할 수 있고, D field는 각각의 epsilon을 곱해주면 얻어지게 된다. 이 때 경계에서 두 D 값은 일치해야 한다. 그러면 전체 구간에서 D는 일정하다. 전체 구간을 놓고 봤을 때, $D = \epsilon * \frac{1V-0V}{2.4nm} = D_1 = D_2$. 여기서 D₁, D₂는 각각의 영역에서의 D 값이며, ϵ 은 전체 영역을 놓고 봤을 때의 epsilon을 의미한다. Capacitance는 epsilon을 전체 구간의 길이 2.4 nm로 나눠주면 얻을 수 있으므로, 앞의 식에서 D1 또는 D2를 1V로 나눈 값이 된다. 얻어진 결과는 단위 면적당 capacitance이며, 단위는 F/m²이므로 cm의 단위로 수정해주면 된다.

그리고 analytic하게 계산한 결과는 두 capacitor가 직렬로 연결되어 있다 생각하고 계산할 수 있게 된다. Capacitance의 결과 식은 이와 같고 $C = \frac{C_1 C_2}{C_1 + C_2}$, C₁, C₂는 각각의 영역에서의 capacitance를 의미한다.

numerical하게 얻은 capacitance는 4.1265e-6 F/cm². analytic하게 얻은 결과 또한 4.1265e-6 F/cm². D1과 D2는 numerical한 계산으로 0.0413 C/m².

```
>> C_numerical
C_numerical =
    4.1265e-06

>> C_analytic
C_analytic =
    4.1265e-06

>> D1
D1 =
    0.0413

>> D2
D2 =
    0.0413
```