

Problem #1

이번 과제는 nonlinear poisson equation으로부터 얻은 electrostatic potential을 이용하여 potential energy를 구하고, 이를 통해서 Schrodinger equation을 푸는 예제이다. 먼저 poisson equation을 풀고 potential energy를 구하는 과정까지는 이전 과제를 통해서 이미 결과를 가지고 있다.

Schrodinger equation을 풀 때, six valley를 고려해주어야 하며 3가지의 경우에 대해서 풀 뒤에 2를 곱해주는 과정을 가질것이다. Wavefunction은 interface에서 0으로 가정하였으므로, Si 내부에서만 Schrodinger equation을 풀어주면 된다. Discretization을 통해서 hamiltonian을 얻은 뒤, 이로부터 eigenvector와 eigenvalue를 얻을 수 있다. 0.1nm로 spacing을 해주었으므로 49개의 eigenenergy를 얻을 수 있으며, scale을 맞춰주는 작업이 필요하다. Subband는 10개만 고려하여도 큰 차이가 없어서 10개를 고려해주었고, 따라서 10개의 eigenenergy와 그에 대응하는 wavefunction만이 계산에 사용된다. Wavefunction 또한 normalization이 필요하며, eigenenergy를 사용하여 n번째 subband에 해당하는 electron의 수를 구할 수 있다. 여기에 wavefunction의 제곱을 곱해주면, z 방향에서 위치에 따른 electron density(/cm³)를 얻을 수 있게 되고, 각각의 subband에서 얻은 결과를 모두 더해주면 된다.

계산 결과는 아래와 같다. 빨간 선은 nonlinear poisson equation으로 얻은 전자 농도이며, 파란 선은 Schrodinger equation으로 얻은 전자 농도이다. Gate voltage는 0V부터 0.1V 간격으로 1V까지 증가시키면서 계산을 진행하였다. 결과를 보면, Schrodinger equation으로 얻은 전자 농도의 경우 poisson equation과 consistent하지 않은 결과이므로, nonlinear poisson equation으로 얻은 전자 농도와 많은 차이를 보이고 있다.



