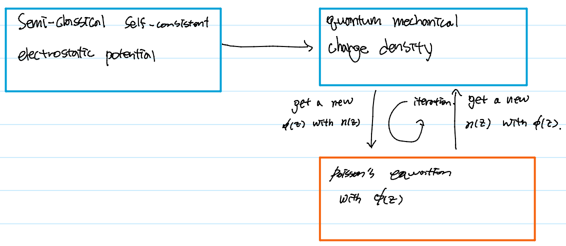
# HW 13

2020년 10월 23일 금요일 오후 12:26

이 번 HW 13 에서는 HW 12 에서 구한 quantum mechanical electron density 를 이용하여 self-consistent 한 electrostatic potential 을 다시 구하고, 이로부터 electron density 를 계산해 보았다. flow chart 를 통하여 계산의 순서를 나타내면 다음과 같다.



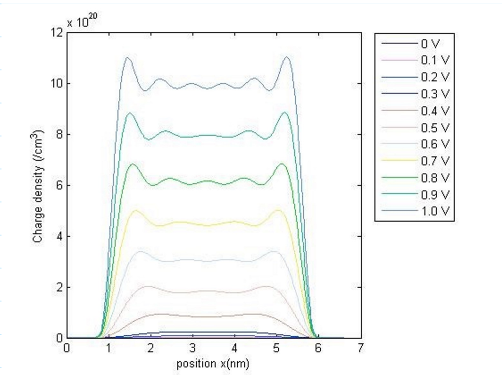

HW 12 에서 구한 electron density 를 이용하는 방법은 2가지가 있다.

① Poisson's equation 에 바로 적용하는 법.

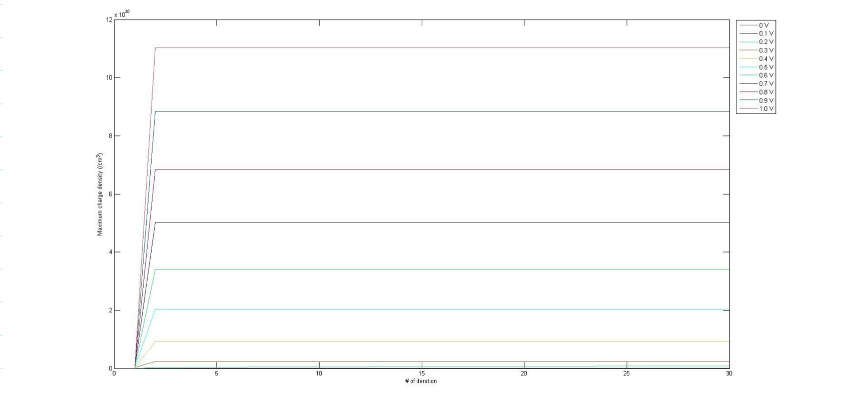
$$\nabla\cdot(\epsilon\nabla\phi) = -q\cdot(N + n(z)).$$

$$\Rightarrow \frac{\epsilon_{i+1}\phi_{i+1} - 2\epsilon_i\phi_i + \epsilon_{i-1}\phi_{i-1}}{(\Delta z)^2} = -q(N + n(z)) \Rightarrow \left(A\phi = b \Rightarrow \phi = A^{-1}b.\right)$$

이 방법으로 구한 경우, electron charge density 가 poisson's eq. 를 통해 update 가 되지 않았다.




quantum mechanical n(z) 를 바로 poisson's eq. 에 적용한 경우.




위 그래프는 iteration 횟수에 대해 각 gate V 에서 n(z)의 max 값을 보여준다. 여기서 n(z) 가 iteration # 1 이후로

$n(z)$의 max 값을 보여준다. 여기서 $n(z)$ 가 iteration #1 이후로 update 가 되지 않음을 알 수 있다.

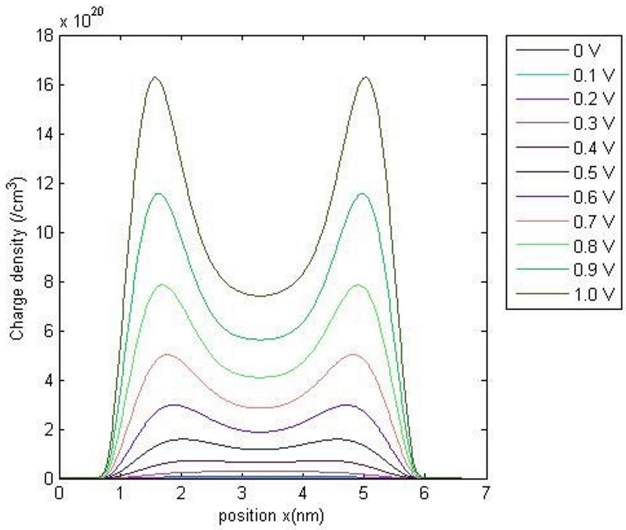
② Jacobian 사용하기.

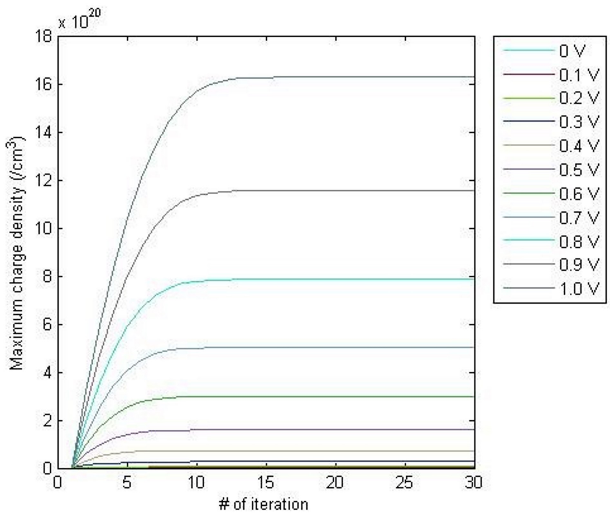
$$\text{Residue} = \frac{\epsilon_{i+1}\phi_{i+1} - 2\epsilon_i \phi_i + \epsilon_{i-1}\phi_{i-1}}{(\Delta z)^2} + q\left(N + n(z)\right)$$

$$\left(\begin{aligned} J_{i,i+1} &= \frac{\epsilon_{i+1}}{(\Delta z)^2} \\ J_{i,i} &= \frac{-2\epsilon_i}{(\Delta z)^2} + \frac{n(z)}{V_T} \\ J_{i,i-1} &= \frac{\epsilon_{i-1}}{(\Delta z)^2} \end{aligned}\right)$$

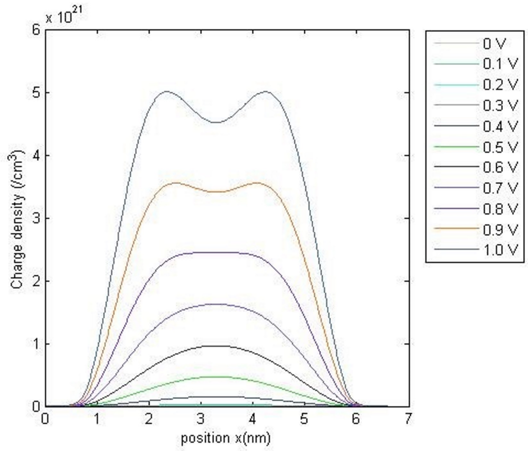
이 경우, $n(z)$ 가 iteration 에 따라 update 되어 수렴하는 특성을 잘 볼 수 있었다.

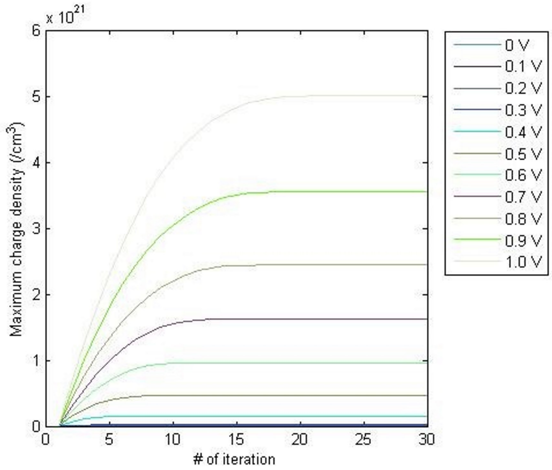
$m_z = 0.91 m_0$




$m_z = 0.19 m_0$


x 10^21
Charge density (/cm^3)
position x(nm)
0 V
0.1 V
0.2 V
0.3 V
0.4 V
0.5 V
0.6 V
0.7 V
0.8 V
0.9 V
1.0 V


x 10^21
Maximum charge density (/cm^3)
# of iteration
0 V
0.1 V
0.2 V
0.3 V
0.4 V
0.5 V
0.6 V
0.7 V
0.8 V
0.9 V
1.0 V