

HW 13.

Tuesday, October 20, 2020 7:33 PM

$$* \text{HW 12.에서 } N(z) = \frac{2}{L_x L_y} \sum_n |\psi_n(z)|^2 f(E_{n,z}) \text{ 를 하였는지},$$

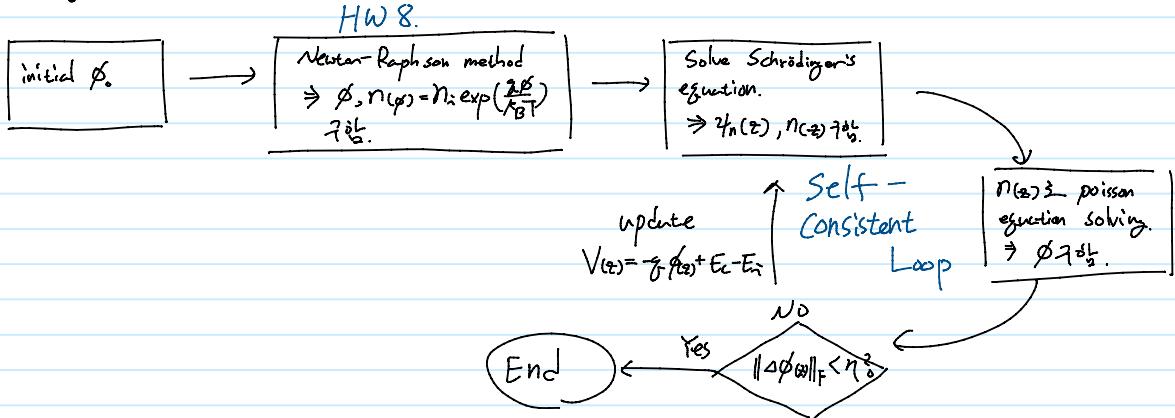
E_{xy} 는 고려하지 않았다.

$$N(z) = \frac{2}{L_x L_y} \sum_n |\psi_n(z)|^2 \frac{L_x L_y}{2\pi} \cdot \frac{M_d}{\hbar^2} \int_0^\infty dE_{xy} f(E_{xy} + E_{n,z})$$

$$= \sum_n |\psi_n(z)|^2 \frac{M_d}{2\pi} \cdot k_B T \ln(1 + e^{-\frac{E_{n,z}}{k_B T}}) \text{ 가 된다. } (M_d = \sqrt{m_{xx} m_{yy}})$$

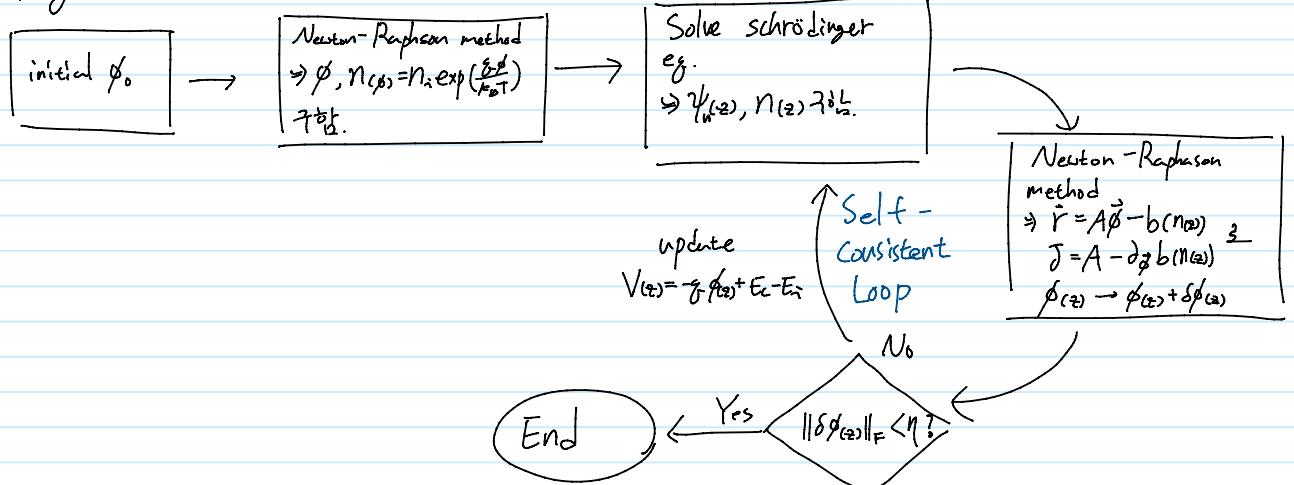
HW 12.와 같은 system에서 electric potential $\phi(z)$ 와 $N(z)$ 는 투여 보자.

* Algorithm 1.



Poisson equation을 풀어 $\phi(z)$ 를 update하는 과정은 $A\vec{\phi} = b(n(z))$ 꼴이 된다. 즉 $\nabla \cdot (\epsilon \nabla \phi) = -\rho$ 을 Linear solver로 풀어 진행하였다.

* Algorithm 2



Loop에서 Newton-Raphson method를 진행할 때, Jacobian J 를 구하기 위해서,

$$[\partial \vec{\phi} / \partial z_i]_{ij} = \partial \vec{\phi}_j / \partial z_i \approx g \frac{n_i(\vec{\phi} + \vec{\delta}_i) - n_i(\vec{\phi})}{\delta_i} \text{ where } \vec{\delta}_i = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \vec{\delta}_i \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \rightarrow j\text{-th element.}$$

($\phi_j \equiv \phi(z_j)$, $n_i \equiv n(z_i)$)
by discretization.

로 $\partial \vec{g} / \partial b(n(z))$ 를 numerically 만들었다.

Results.

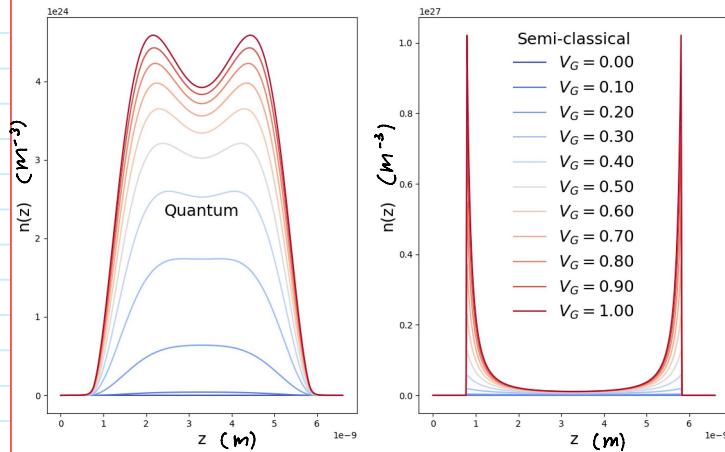
$|H_\omega|/2$ 와 같이 상수들을 주었고 $T = 300\text{K}$ 에서 gate Voltage V_G 를 바꾸어 계산 하였다. Grid spacing $N = 300$ 으로 하였다.

Algorithm 1 이전 $V_G \gtrsim 0.25\text{V}$ 면 $\phi(z)$ 가 수렴하지 않고 진동한다.

하지만, Newton method를 도입한 Algorithm 2 이전 잘 수렴한다.

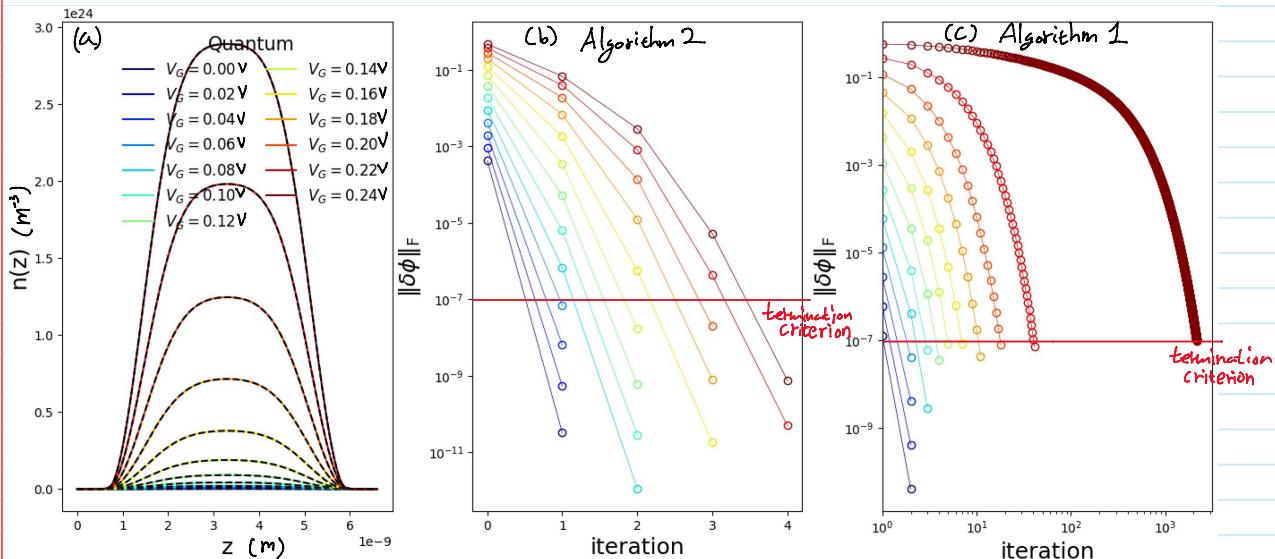
먼저 $M_{22} = 0.91 M_0$ 인 경우에서 두 Algorithm을 비교해 보자.

i) No Self-consistent loop



ii) Consider self-consistent loop

① Compare Algorithm 1 with 2



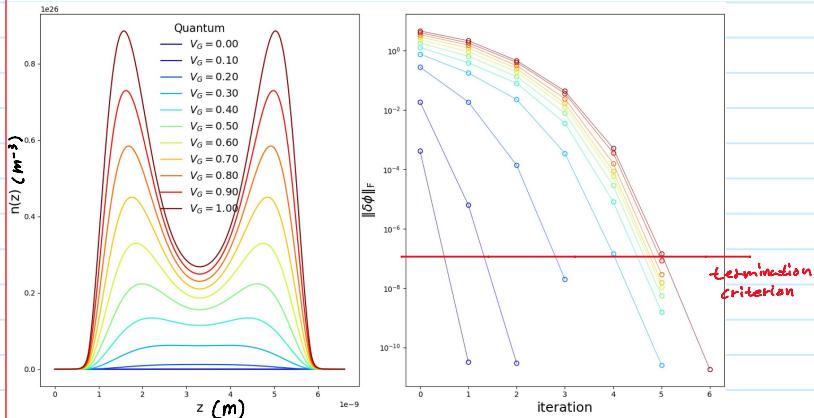
(a)에서 line은 Algorithm 2로 구한 값이고 dashed line은 Algorithm 1로 구한 값이다.

(a)를 보면 $V_G \leq 0.24\text{V}$ 이전 Algorithm 1과 2가 같은 결과를 준다는 걸 알 수 있다.

(b)와 (c)는 Algorithm 2와 1의 potential update의 영향을 보여준다.

(b)를 보면 Iteration이 4를 넘지 않는다면, (c)에서 iteration이 $\sim 10^3$ 까지 같다. 이를 보면 확실히 Newton method를 이용한 Algorithm 2가 V_G 가 커져도 빠르게 수렴하면서 좋은 성능을 가졌다는 걸 알 수 있다.

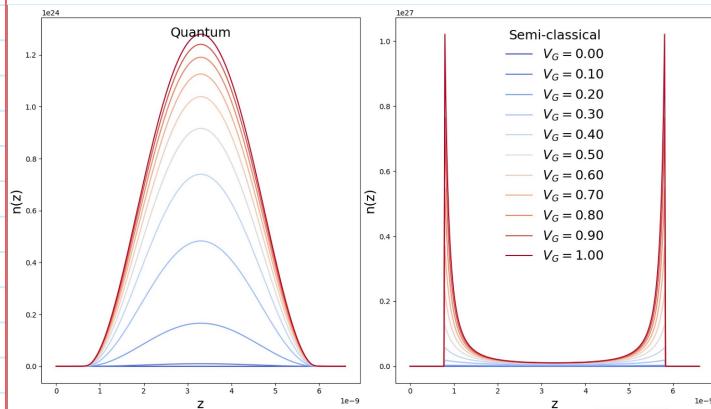
② Density using Algorithm 2 between $V_g = 0V$ and $V_g = 1V$



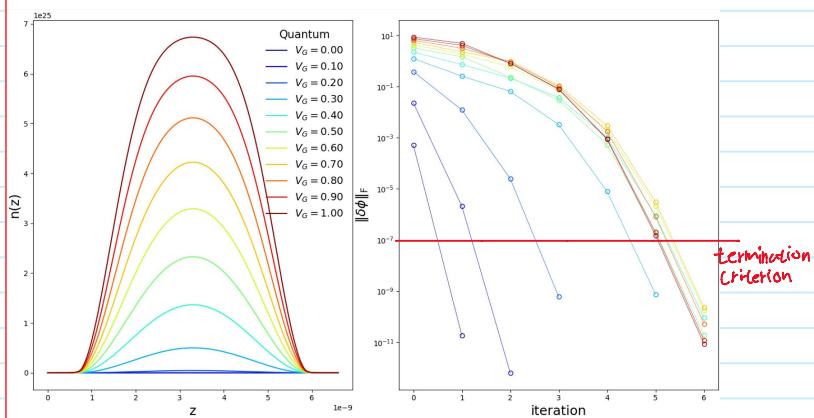
Gate voltage V_g 의 값 수록 Si layer 양극단의 density가 커진다.
Iteration 5 ~ 6을 넘지 않는다.

이번엔 $m_{ee} = 0.19m_e$, $T = 300K$ 일 때를 보자. Algorithm 2는 self-consistent density를 봄 것이다.

i) No Self-consistent loop



ii) Consider self-consistent loop



HW 12. 에너지 준위의 차이, m_{ee} 가 작아지면 energy level이 높아지기
같은 temperature에서 excited state 들의 기여는 더 많아진다.
따라서, $m_{ee} = 0.91m_e$ 이전 봉우리가 2개지만 $m_{ee} = 0.19m_e$ 이전 봉우리가 하나만 나타난다.