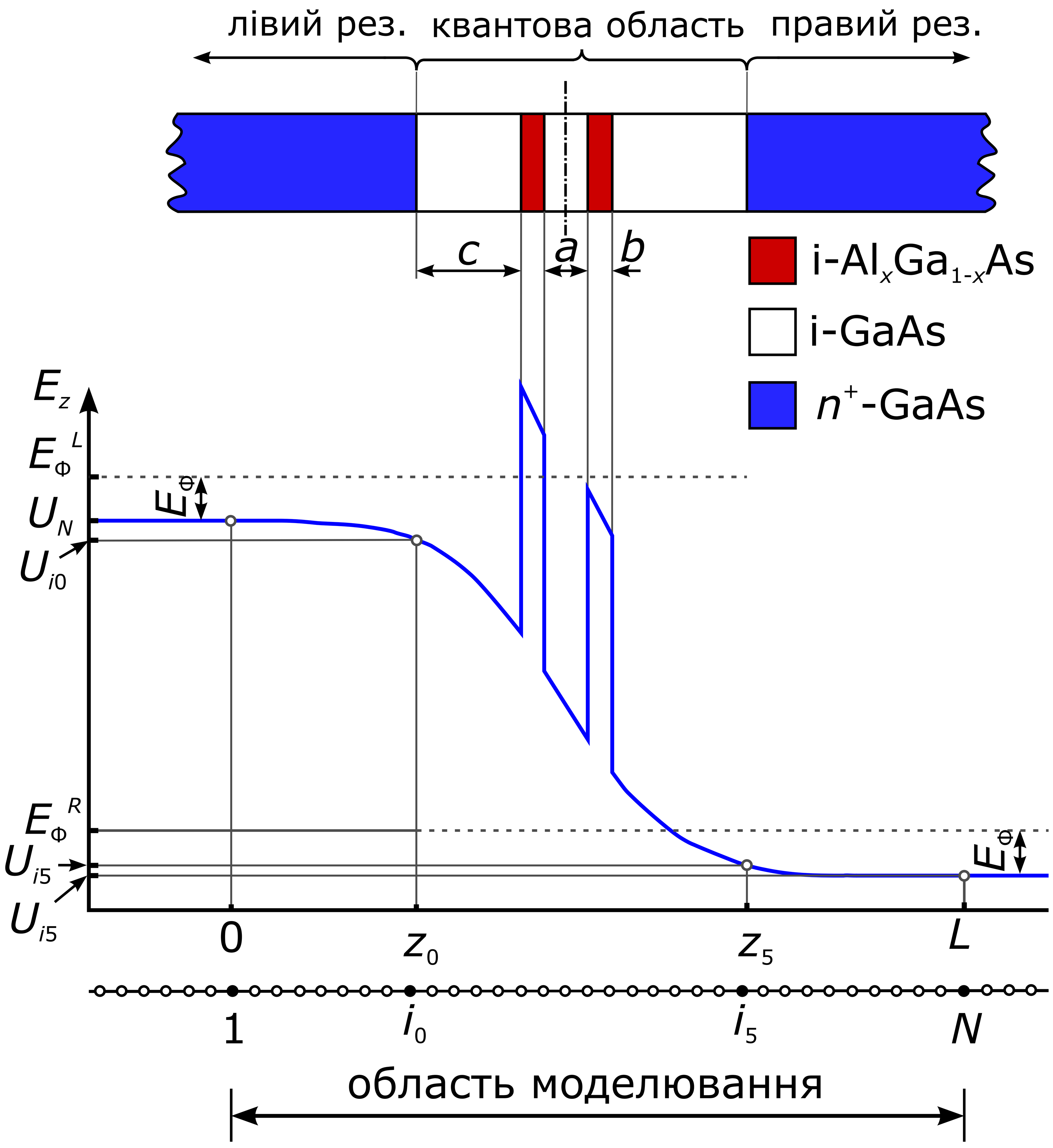
Чисельна однодолинна модель (ядро)

ПРИПУЩЕННЯ:
- заселена лише Г-долина;
- самоузгодження Хартрі

ВДОСКОНАЛЕННЯ:
+1 Область самоузгодження на відміну від попередніх робіт розширена на спейсери та частину клас. обл.,
+2 границя між квантовою та класичною областями обиралися на границях нелегованої області;

виключено припасувальні параметри: поверхневий заряд, границя зшивки

+3 на відміну від попередніх робіт у резервуарах використана статистика Фермі-Дірака.



Основні рівняння чиельної однодолинної моделі

$$J=\frac{2m^* e k_B T}{(2\pi)^2\hbar^3}\int\limits_{\max(U_{i5},U_{i0})}^{\infty} T(E_z,V)D(E_z,V)dE_z$$

$$D(E_z)\equiv\ln\left(\left\{1+\exp\left(-\frac{E_z-(E_F+U_1)}{k_Б T}\right)\right\}\Big/\left\{1+\exp\left(-\frac{E_z-(E_F+U_N)}{k_Б T}\right)\right\}\right)$$

$$\frac{d}{dz}\frac{1}{m^*(z)}\frac{d\psi_{L(R)}(z)}{dz}+\frac{2}{\hbar^2}\left(E-U(z)\right)\psi_{L(R)}(z)=0$$

система рівнянь
Шредінгера-Пуассона

$$J(V)\leftarrow T(E_z)=\frac{k_L}{k_R}|\psi_N|^2\leftarrow\left|\psi_{L(R)}(z,E_z,U(z))\right|^2\rightarrow\boxed{n(z)\rightleftarrows U(z)}=E_c(z)-eV_s(z).$$

$$n(z)=\begin{cases}\sum\limits_{i=L,R}\int\left|\psi_i(E_z(k_z),V_s,z)\right|^2 f_i(E_z)dE_z, & z\in[z_0,z_5],\\ 4\pi(2m^*/h^2)^{3/2}\int\limits_{U_i}^{\infty}\dfrac{\sqrt{E-U(z)}}{1+\exp\left(\dfrac{E-(E_Ф+U_{1(N)})}{k_Б T}\right)}dE, & z\notin[z_0,z_5],\end{cases}$$

$$f_i(E_z)\equiv\frac{N_c'}{\sqrt{E_z-U_{i0(i5)}}}\ln\left(1+\exp\left(-\frac{E_z-(E_Ф+U_{1(N)})}{k_Б T}\right)\right)$$

$$\frac{d}{dz}\varepsilon(z)\frac{dV_s}{dz}=\frac{e}{\varepsilon_0}\left[n(z)-N_д^+(z)\right]$$

лінеаризований метод Гумеля

$$\frac{d}{dz}\varepsilon(z)\frac{dV_s^{(i+1)}}{dz}-n^{(i)}(z)\frac{e}{\varepsilon_0}\frac{V_s^{(i+1)}}{k_Б T}=$$

$$=\frac{e}{\varepsilon_0}\left[n^{(i)}(z)\left(1-\frac{V_s^{(i)}}{k_Б T}\right)-N_д^+(z)\right]$$