

РОЗРАХУНОК ЕЛЕКТРОННОЇ ГУСТИНИ ТА ЕЛЕКТРОННОГО ЕНЕРГЕТИЧНОГО СПЕКТРА КРЕМНІЮ ЧИСЛОВИМИ МЕТОДАМИ

Для самоузгодженого розрахунку електронного енергетичного спектра і хвильових функцій, які визначають багато властивостей напівпровідників, необхідно розрахувати електронну густина та кристалічний потенціал на її основі. Запишемо систему лінійних однорідних рівнянь у плоскохвильовому зображенні[1]:

$$\sum_{\vec{G}} \left[\left((\vec{k} + \vec{G})^2 - E_{n,\vec{k}} \right) \delta_{i,j} + W_{i,j}(\vec{G}) \right] a_{n,\vec{k}}(\vec{G}) = 0 \quad (1)$$

У системі (1) $E_{n,\vec{k}}$ - невідомий енергетичний спектр, \vec{k} - вектор з першої зони Брилюєна, \vec{G} - вектор оберненої ґратки і $a_{n,\vec{k}}(\vec{G})$ - невідомі коефіцієнти розкладу хвильового вектора. Псевдопотенціал $w(\vec{r})$ подамо, як суму $w_i(\vec{r})$ локального модельного псевдопотенціалу, і екрануючих доданків: потенціалів кулонівської $V_H(\vec{r})$ і обмінно-кореляційної $V_{x,c}(\vec{r})$ взаємодії:

$$w(\vec{r}) = w_i(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) + V_{x,c}(\vec{r}) \quad (2)$$

Кулонівський і обмінно-кореляційні потенціали залежать від розподілу електронної густини у кристалі $\rho(\vec{r})$. Фур'є образ густини валентних електронів $\rho(\vec{q})$ визначимо так:

$$\rho(\vec{q}) = \frac{1}{\Omega} \int \rho(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\vec{r}} d\vec{r}, \quad (3)$$

де $\vec{q} = \vec{G}_i - \vec{G}_j$. Тобто виникає проблема знаходження інтегралів типу:

$$I(q) = \frac{1}{\Omega} \int \int \int \varphi(x, y, z)^{1/3} e^{-i(q_x x + q_y y + q_z z)} dx dy dz, \quad (4)$$

Таку проблему, інтегрування швидкоосцелюючих функцій, можна розв'язати за допомогою числових методів. Для цього функцію $\exp(-iqr)$ необхідно виділити як ваговий множник. Запишемо квадратурну формулу для довільної функції трьох змінних $f(x,y,z)$:

$$\int_{a_1}^{b_1} \int_{a_2}^{b_2} \int_{a_3}^{b_3} f(x, y, z) e^{-i(q_x x + q_y y + q_z z)} dx dy dz = S_n(q), \quad (5)$$

$$S_n(q) \approx \frac{b_1 - a_1}{2} \frac{b_2 - a_2}{2} \frac{b_3 - a_3}{2} \exp\left(-iq_x \frac{b_1 + a_1}{2}\right) \exp\left(-iq_y \frac{b_2 + a_2}{2}\right) * \exp\left(-iq_z \frac{b_3 + a_3}{2}\right) C_n(x, y, z) \quad (6)$$

Функцію $f(x,y,z)$ у (6) ми замінили інтерполяційним многочленом Чебишева [2] $C_n(x,y,z)$. На основі запропонованого алгоритму розрахунку електронної густини $\rho(\vec{q})$ проведені розрахунки енергетичних спектрів $E_{n,\vec{k}}$ для кремнію. Хід кривих електронного спектра розрахованого та взятого з літературних джерел співпадають, а значення енергій міжзонних переходів є близькими до експериментальних[3].

1. Буджак Я.С., Сиротюк С.В., Собчук І.С. Розрахунок електронної енергетичної структури кремнію методом адитивного екрануваного псевдопотенціалу// Український фізичний журнал, 1997 т.42, №4, с.469-471. 2. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельников Г.М. Численные методы.-М.: Наука,1987.-600 с. 3.Hyberstsen M. and Loue S. Electron correlation in semiconductors and insulators:Band gaps and quasiparticle energies//Phys.Rev.B – 1986/ - V.20, №10. -р. 5390-5413.