

## РОЗРАХУНКИ ЗОННОЇ СТРУКТУРИ Si, Ge ТА GaAs МЕТОДОМ МОДЕЛЬНОГО ПСЕВДОПОТЕНЦІАЛУ

П. М. Якібчук, О. В. Бовгира, І. В. Куца

*Львівський національний університет імені Івана Франка, фізичний факультет,  
вул. Кирила і Мефодія, 8, Львів, 79005, Україна, e-mail:iryua.kutsa@gmail.com*

(Отримано 13 листопада 2014 р.; в остаточному вигляді — 18 травня 2015 р.)

Розраховано зонну енергетичну структуру напівпровідників Si, Ge та GaAs на основі формфакторів модельного потенціалу, екранованих із використанням діелектричної проникності за Пенном. Отримано добре узгодження параметрів зонної структури з експериментальними даними та результатами інших розрахунків.

**Ключові слова:** модельний потенціал, зонна структура, напівпровідники.

PACS number(s): 71.15.–m, 71.20.Nr

### ВСТУП

На сьогодні актуальною проблемою функціональної електроніки та оптоелектроніки все ще є проблема керування змінами електричних і фундаментальних оптичних характеристик напівпровідникових кристалів, зокрема ширини забороненої зони, електропровідності, оптичного пропускання, енергетичного стану та ширини смуг поглинання, рефракційних параметрів, оптичної анізотропії, фотолюмінесценції тощо.

Для адекватного опису та прогнозування вказаних характеристик потрібно подолати точною зонною енергетичною структурою досліджуваних матеріалів.

Викликаються зацікавлення також і багатопарові та просторово модульовані матеріали, такі, як гетероепітаксціальні структури із квантовими точками. Науковий інтерес до згаданих об'єктів стосується можливості утворення тривимірної надґратки або модуляції, існування квазіізотропного стану, а також загальних проблем електронного енергетичного спектра при трансформації кристалів від тривимірних, монокристалічних до квазітривимірних, двовимірних і нульвимірних структур. Електронні процеси в таких матеріалах не можна описати на основі уявлень про газ квазічастинок, які використовують для опису електронних процесів у твердому тілі.

Зонну структуру напівпровідників можна отримати із застосуванням таких методів:  $\mathbf{kp}$ , лінійних комбінацій атомних орбіталей, приєднаних плоских хвиль, ортогоналізованих плоских хвиль, функцій Гріна, емпіричних, модельних і першопринципних псевдопотенціалів тощо.

Теоретичний опис процесів переносу зарядів у нанорозмірних напівпровідникових системах можливий у межах розрахунків, оснований на зонній структурі кристалів одержаних із перших принципів. Проте такі розрахунки часто дуже затратні, незважаючи на стрімке зростання обчислювальної здатності сучасної комп'ютерної техніки. Тому для пришвидшення подібних обчислень доцільно створити простіші моделі електронної структури, які б усе ж точно описували основні енергетичні характеристики системи, такі, як ширина енергетичної щілини й дисперсія електронних станів вершини валентної зони та дна зони провідності.

У зв'язку з цим розвинулись методи, у яких прагнуть поєднати переваги напівемпіричних (порівняно простих у реалізації і основаних на надійних експериментальних даних) і методів із перших принципів. Одним з найбільш ефективних є метод модельного псевдопотенціалу, що забезпечує високу точність опису електронного спектра. У практичних розрахунках перевагу мають псевдопотенціали з м'якою серцевиною, що дають змогу використовувати невеликий базис плоских хвиль і досліджувати складні структури з великою кількістю атомів в елементарній комірці. Такі псевдопотенціали застосовуються для розрахунку електронних станів квантових ям, точок, нанострічок тощо [1–3]. Вони забезпечують опис електронного спектра наноструктур, які містять тисячі атомів в елементарній комірці, що поки є недосяжним для прямих першопринципних методів.

У працях [4, 5] запропоновано нелокальний модельний потенціал (МП) для опису електрон-йонної взаємодії в металах. У низці робіт цей МП використано для розрахунку властивостей простих [6,7], перехідних [8] і рідкісноземельних [9] металів й у всіх випадках отримано добре узгодження результатів розрахунку з відповідними експериментальними даними. Природно, виникає запитання про можливість застосування цього МП для опису електрон-йонної взаємодії в напівпровідниках. Щоби відповісти на поставлене запитання, ми визначимо параметри МП для напівпровідників, розрахуємо його формфактори, які потім застосуємо до розрахунку конкретних властивостей напівпровідників.

### І. ВИЗНАЧЕННЯ ПАРАМЕТРІВ МОДЕЛЬНОГО ПОТЕНЦІАЛУ

Нелокальний МП для опису електрон-йонної взаємодії в металах записуємо у вигляді

$$w(r) = -\frac{z}{r} + \sum_{l=0}^{l_0} e^{-r/R_l} \left( A_l + \frac{z}{r} \right) P_l. \quad (1)$$

Тут  $A_l$  і  $R_l$  — параметри МП;  $P_l$  — проєкційний оператор.

Визначаючи параметри МП, дуже важливо використовувати таку експериментальну інформацію, яка б не була безпосередньо пов'язана з досліджуваними за допомогою цього МП характеристиками. Тільки так визначені МП можна вважати апріорними.

Одним із рівнянь, яке ми використовуємо для знаходження параметрів, є радіальне рівняння Шредингера:

$$\left[ -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + w_l^0(r) - E_l \right] \varphi_l(r) = 0, \quad (2)$$

де  $w_l^0(r) = -\frac{z}{r} + (A_l + \frac{z}{r}) e^{-r/R_l}$  — це  $l$ -та компонента МП,  $\varphi_l(r)$  — радіальна частина псевдохвильової функції  $l$ -го стану валентного електрона. За власне значення енергії  $E_l$  використовуємо енергію спостережуваних спектроскопічних термів вільного йона.

Другим рівнянням, необхідним для обчислення двох параметрів  $A_l$  і  $R_l$ , може бути запропонована в [10] умова оптимізації МП.

$$\left( \frac{1}{R_l^* E_l} \int_0^{R_l^*} |w_l^0(r)| dr \right) = \min. \quad (3)$$

Тут  $R_l^*$  — радіус, що характеризує розміри йонного залишку. Фізичний зміст умови (3) полягає в тому, що зі всієї сукупності можливих МП, параметри яких задовольняють радіальне рівняння Шредингера (2), вибираємо той МП, що є найслабшим в області йонного залишку.

Отже, рівняння (2) разом з умовою оптимізації (3) утворюють систему двох рівнянь для визначення невідомих параметрів  $A_l$  і  $R_l$ .

Обчислені таким способом параметри низки атомів наведено в табл. 1.

Для розрахунку параметрів МП зробимо фур'є-перетворення виразу (1)

$$(\mathbf{k} + \mathbf{q} | W(\mathbf{r}) | \mathbf{k}) = W^0(k, q) = \nu_q + f(k, q), \quad (4)$$

де  $\nu_q = -\frac{4\pi z}{\Omega_0 q^2}$  — фур'є-зображення кулонівського потенціалу, а  $f(k, q)$  — матричний елемент нелокальної частини МП (1)

$$f(k, q) = \frac{4\pi}{\Omega} \sum_{l=0}^{l_0} (2l+1) P_l(\cos \theta) \times \int_0^{\infty} e^{-\frac{r}{R_l}} \left( A_l + \frac{z}{r} \right) j_l(|\mathbf{k} + \mathbf{q}|r) j_l(kr) r^2 dr, \quad (5)$$

Тут:  $\Omega_0$  — атомний об'єм напівпровідника,  $P_l = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)$  — поліном Лежандра,  $j_l(x)$  — сферичні функції Бесселя,  $\theta$  — кут між векторами  $\mathbf{k}$  і  $\mathbf{k} + \mathbf{q}$ .

При чисельному розрахунку формфакторів використовуємо наближення сфери Фермі, згідно з якими:

$$|\mathbf{k}| = k_F; \quad |\mathbf{k} + \mathbf{q}| = \begin{cases} k_F, & q < 2k_F, \\ q - k_F, & q \geq 2k_F; \end{cases}$$

$$\cos(\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}) = \begin{cases} 1 - 2 \left( \frac{q}{2k_F} \right)^2, & q < 2k_F, \\ -1, & q \geq 2k_F. \end{cases} \quad (6)$$

Отже, згідно з цим наближенням:  $f(k, q) = f(k_F, q)$ .

Тоді формфактори екранованого МП запишемо так:

$$W(k, q) = \frac{\nu_q + f(k_F, q)}{\varepsilon^*(q)}. \quad (7)$$

Тут  $\varepsilon^*(q) = 1 + [\varepsilon(q) - 1] [1 - \varphi(q)]$  — діелектрична проникність, яка враховує обмінно-кореляційну взаємодію за допомогою функції  $\phi(q)$ .

	$z$	$A_0$	$R_0$	$A_1$	$R_1$	$A_2$	$R_2$
C	4	13.875	0.298				
Te	6	15.656	0.456	15.406	0.423	20.156	0.393
Ga	3	7.625	0.468	10.031	0.372	9.438	0.399
As	5	12.250	0.439	15.281	0.366	16.344	0.347
Se	6	15.938	0.411	23.0	0.332	25.50	0.307
Sn	4	9.625	0.552	11.469	0.444	10.438	0.499
Ge	4	10.844	0.441	14.281	0.361	14.525	0.357
Si	4	10.625	0.449	15.094	0.346		
B	5	9.406	0.358				
In	3	6.94	0.522	8.25	0.446	6.643	0.544
Tl	3	7.568	0.481	9.113	0.450	5.870	0.607
Pb	4	8.75	0.541	10.0	0.513	4.5	0.864
Cd	2	4.714	0.516	6.476	0.383	4.402	0.549
Zn	2	5.262	0.462	6.197	0.323	6.197	0.397

Таблиця 1. Параметри модельного потенціалу.

## II. МОДЕЛЬНІ ПОТЕНЦІАЛИ ДЛЯ Si, Ge I GaAs

При побудові модельних потенціалів для напівпровідників ми заміняємо металічну функцію діелектричної проникності на відповідну функцію в наближенні Пена [11]

$$\varepsilon(q, E_g) = 1 + \frac{\left[ \frac{\hbar\omega_p}{E_g} \right]^2 \left[ 1 - \frac{E_g}{4E_F} \right]}{\left[ 1 + \frac{E_F}{E_g} \left( \frac{q}{E_F} \right) \sqrt{1 - \frac{E_g}{4E_F}} \right]^2}, \quad (8)$$

де  $E_F$  — енергія Фермі,  $\omega_p$  — плазмонна частота,  $E_g$  — параметр енергетичної щільності, який визначаємо у границі  $q \rightarrow 0$

$$E_g = \frac{\hbar\omega_p}{\sqrt{\varepsilon(0) - 1}}. \quad (9)$$

На рисунках 1–4 наведено розраховані екрановані формфактори МП (суцільна крива) для As, Si, Ga, Ge. На цих же рисунках подано дискретні значення емпіричних псевдопотенціалів цих елементів [12–15] та розраховані екрановані формфактори МП Хейне–Абаренкова (пунктирна крива) [16].

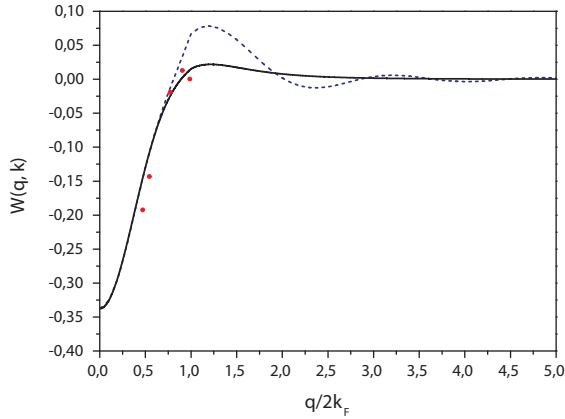


Рис. 1. Екранований формфактор As.

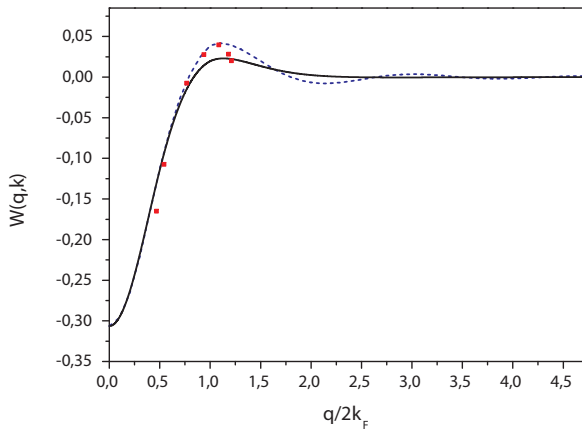


Рис. 2. Екранований формфактор Si.

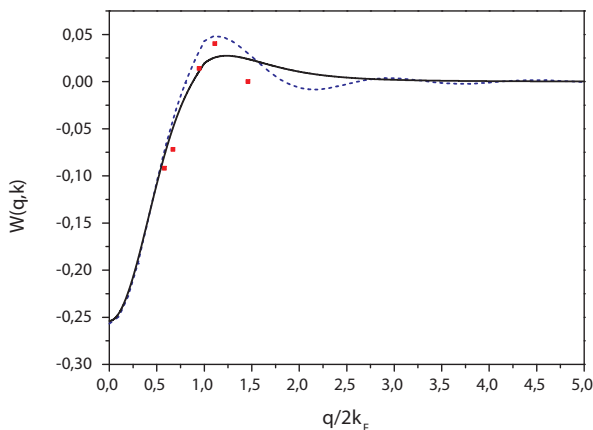


Рис. 3. Екранований формфактор Ga.

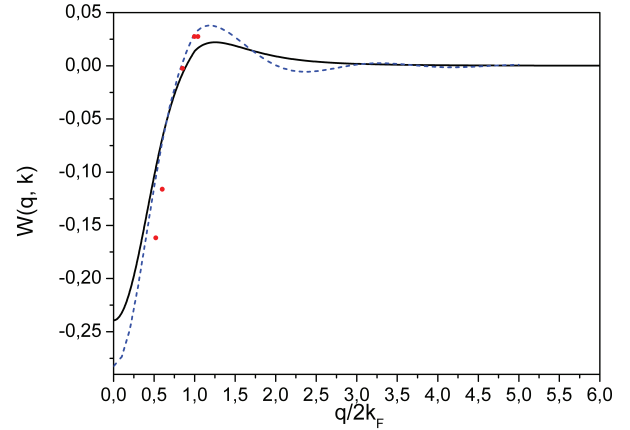


Рис. 4. Екранований формфактор Ge.

Визначені формфактори МП [4] для всіх розглянутих напівпровідників добре узгоджуються з аналогічно обчисленими МП Хейне–Абаренкова та експериментальними даними. Водночас вони плавно спадають до нуля при великих імпульсах розсіювання.

### III. МЕТОДИКА РОЗРАХУНКУ ЗОННОЇ СТРУКТУРИ

Оскільки кристалічний потенціал є періодичним, то псевдопотенціал є також періодичною функцією і може бути розкладений у ряд Фур'є за векторами оберненої ґратки

$$W_P(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} W(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}}, \quad (10)$$

де коефіцієнти розкладу задаються таким виразом:

$$W(\mathbf{G}) = \sum_{\alpha} S_{\alpha}(\mathbf{G}) W_{\alpha}(\mathbf{G}), \quad (11)$$

у якому сумування виконано за кожним сортом атомів  $\alpha$ . Вектори оберненої комірки

$$\mathbf{G} = 2\pi(l\mathbf{a}^* + m\mathbf{b}^* + n\mathbf{c}^*), \quad (12)$$

де  $\mathbf{a}^*$ ,  $\mathbf{b}^*$ ,  $\mathbf{c}^*$  — примітивні вектори трансляції оберненої комірки,  $l$ ,  $m$ ,  $n$  — цілі числа.

Структурний фактор

$$S_{\alpha}(\mathbf{G}) = \frac{1}{n_{\alpha}} \sum_{\tau_{\alpha}} e^{-i\mathbf{G}\tau_{\alpha}}, \quad (13)$$

де  $n_{\alpha}$  — кількість атомів сорту  $\alpha$  в елементарній комірниці та сумування зроблено за відповідними базисними векторами  $\tau_{\alpha}$  цих атомів. Для кристалів із структурою типу алмазу (Si, Ge) (рис. 5) та цинкової обманки (GaAs) базисний вектор комірки

$$\tau = a \left( \frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8} \right). \quad (14)$$

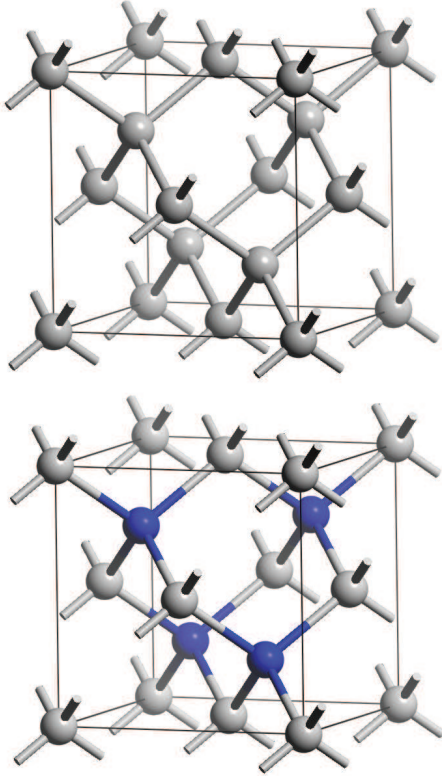


Рис. 5. Структури типу алмазу й типу цинкової обманки, відповідно світлими й темними сферами показано атоми різного ґатунку (Ga і As).

МП у фур'є-просторі обчислюємо з атомного потенціалу

$$W(\mathbf{G}) = \frac{1}{\Omega} \int d^3r W(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}, \quad (15)$$

де  $\Omega$  — об'єм елементарної комірки, а  $W(\mathbf{r})$  записуємо так:

$$W(\mathbf{r}) = W_1(\mathbf{r} - \boldsymbol{\tau}) + W_2(\mathbf{r} + \boldsymbol{\tau}),$$

де  $W_1$  і  $W_2$  — атомні потенціали катіона та аніона.

Для комірок типу алмазу та цинкової обманки фактори модельного псевдопотенціалу записуємо у вигляді суми симетричної  $W^S$  та антисиметричної  $W^A$  частин

$$W(\mathbf{G}) = W^S(\mathbf{G}) \cos(\mathbf{G}\boldsymbol{\tau}) + iW^A(\mathbf{G}) \sin(\mathbf{G}\boldsymbol{\tau}), \quad (16)$$

де

$$W^S(\mathbf{G}) = \frac{W_1(\mathbf{G}) + W_2(\mathbf{G})}{2},$$

$$W^A(\mathbf{G}) = \frac{W_1(\mathbf{G}) - W_2(\mathbf{G})}{2}.$$

У випадку Si та Ge МП матиме тільки симетричну частину

$$W(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} W(\mathbf{G}) \cos(\mathbf{G}\boldsymbol{\tau}) e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}. \quad (17)$$

Після визначення потенціалу наступним завданням є звести рівняння Шрединґера до матричної форми.

Розв'язок рівняння Шрединґера хвиль у періодичній гратці є функцією Блоха, яка розкладається в базис плоских хвиль

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{G}'} U(\mathbf{G}') e^{i\mathbf{G}'\cdot\mathbf{r}}. \quad (18)$$

Переходячи до фур'є-компонент функцій Блоха і підставляючи псевдохвильову функцію  $\phi_{\mathbf{k}}$  і потенціал  $W$  у хвильове рівняння Шрединґера, отримуємо таке матричне рівняння:

$$\sum_{\mathbf{G}} \left\{ \left[ \frac{\hbar^2 (\mathbf{k} + \mathbf{G})^2}{2m} - E \right] U(\mathbf{G}) + \sum_{\mathbf{G}'} W(|\mathbf{G} - \mathbf{G}'|) U(\mathbf{G}') \right\} = 0. \quad (19)$$

Вираз (19) дорівнює нулеві, якщо кожен доданок дорівнює нулеві, що приводить до такого виразу:

$$\left[ \frac{\hbar^2 (\mathbf{k} + \mathbf{G})^2}{2m} - E \right] U(\mathbf{G}) + \sum_{\mathbf{G}'} W(|\mathbf{G} - \mathbf{G}'|) U(\mathbf{G}') = 0. \quad (20)$$

Тобто розрахунок зонної структури зводиться до розв'язку задачі на пошук власних значень матричного рівняння (20). Кількість векторів оберненої гратки, які використовують під час обчислень, визначає розмір матриці і, відповідно, точність розрахунку.

У матричному вигляді рівняння (20) запишемо так:  $\mathbb{H}\mathbf{U} = E\mathbf{U}$ , де  $\mathbb{H}$  — матриця гамільтоніана системи,  $\mathbf{U}$  — власні вектори і  $E$  — власні значення енергій відповідних власних векторів. Діагональні елементи  $\mathbb{H}$  набувають вигляду

$$H_{i,i} = \frac{\hbar^2}{2m} |\mathbf{k} + \mathbf{G}_i|^2. \quad (21)$$

Для гратки типу алмазу недіагональні елементи ( $i \neq j$ )  $\mathbb{H}$

$$H_{i,j} = V_S (|\mathbf{G}_i - \mathbf{G}_j|) \cos[(\mathbf{G}_i - \mathbf{G}_j) \cdot \boldsymbol{\tau}], \quad (22)$$

а для гратки типу цинкової обманки недіагональні елементи ( $i \neq j$ )  $\mathbb{H}$

$$H_{i,j} = V_S (|\mathbf{G}_i - \mathbf{G}_j|) \cos[(\mathbf{G}_i - \mathbf{G}_j) \cdot \boldsymbol{\tau}] + iV_A (|\mathbf{G}_i - \mathbf{G}_j|) \sin[(\mathbf{G}_i - \mathbf{G}_j) \cdot \boldsymbol{\tau}]. \quad (23)$$

#### IV. РЕЗУЛЬТАТИ РОЗРАХУНКІВ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Для розрахунків дисперсії зон кристалів Si, Ge та GaAs використано базис плоских хвиль, який містить усі плоскі хвилі з області  $(\mathbf{k} + \mathbf{G})^2 \leq 21$ . Вибране значення енергії обрізання для плоских хвиль забезпечило збіжність власних значень енергії на рівні 0.01 eV (для GaAs) та 0.005 eV (для Si та Ge). Для отримання зонно-енергетичних діаграм значення енергій протабульовано в точках, які локалізовані на гранях та високосиметричних лініях 1/8 незвідної частини зони Бріллюена (рис. 6).

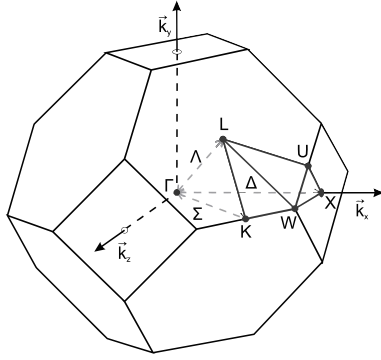


Рис. 6. Перша зона Бріллюена кубічної гранецентрованої ґратки.

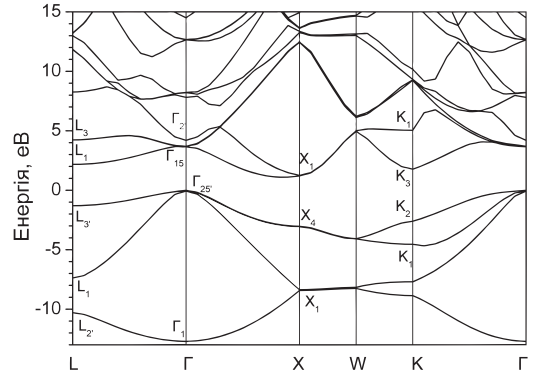


Рис. 7. Зонна діаграма кристалів Si.

На рис. 7–9 зображено розраховані зонні діаграми кристалів Si, Ge і GaAs, а в таблицях 2–4 — енергії важливих міжзонних переходів, які порівнюються з відповідними експериментальними даними [17–20], результатами розрахунків із використанням емпіричних псевдопотенціалів [15] та першопринципних розрахунків у межах теорії функціонала електронної густини (DFT) із використанням наближення локальної густини (LDA) для обмінно-кореляційного потенціалу в базисі орбіталей гауссового типу [23], наближення LDA в базисі плоских хвиль [24], узагальненого градієнтного наближення (GGA) [25, 26], гібридного функціонала B3LYP [27], наближення LDA з поправками GW-методики (G — функція Гріна, W — екранована взаємодія) [28].

У випадку Si дно зони провідності лежить на лінії  $\Delta$  ( $\Gamma$ –X) зони Брілюена. Вершина валентної зони — у центрі зони Брілюена (точка  $\Gamma$ ). Відповідно, кремній є непрямозонним напівпровідником (отримане значення ширини забороненої зони 1.10 eV добре узгоджується з даними експерименту 1.12 eV).

Аналіз результатів показує, що енергії міжзонних переходів, отримані з використанням МП, у випадку кристалів Si краще узгоджуються з експериментальними даними [17], ніж результати, одержані з використанням емпіричних псевдопотенціалів [15] та на основі першопринципних підходів [23–28], особливо для важливих переходів в околі забороненої зони, а саме:  $\Gamma_{2c}$ – $\Gamma_{25'v}$ ,  $L_{1c}$ – $L_{3'v}$ ,  $X_{1c}$ – $X_{4v}$  (індекс  $c$  відповідає стану зони провідності, а індекс  $v$  — стану валентної зони).

Енергія	МП	ЕМП [15]	LDA [23]	LDA [24]	GGA [25]	GGA [26]	B3LYP [27]	GW [28]	Експер. [17,21,22]
$E_g$	1.10	0.87	0.65	0.66	0.47			1.19	1.12, 1.17
$\Gamma_{1v}$ – $\Gamma_{25'v}$	–12.70	–12.60	–11.51	–11.91	–12.10	–12.11	–13.08	–11.57	–12.56
$\Gamma_{15c}$ – $\Gamma_{25'v}$	3.36	3.34	2.57	2.55	2.47	2.65	3.78	3.23	3.35, 3.40
$\Gamma_{2c}$ – $\Gamma_{25'v}$	4.19	4.37	3.24	3.28		3.27	4.68	3.96	4.16, 4.1
$L_{1c}$ – $\Gamma_{25'v}$	2.07	2.09	1.47	1.50	1.38	1.56	2.71	2.18	2.05, 2.1
$L_{3c}$ – $\Gamma_{25'v}$	4.23	3.88	3.32	3.33		3.49	5.34	4.06	3.91, 4.15
$L_{3v}$ – $\Gamma_{25'v}$	–1.29	–1.26	–1.17	–1.20	–1.21	–1.23	–1.83	–1.20	–1.22
$L_{1v}$ – $\Gamma_{25'v}$	–7.38	–7.33	–6.94	–6.96	–7.09	–7.06	–8.37	–6.78	–6.82
$X_{4v}$ – $\Gamma_{25'v}$	–2.99	–3.02	–2.78	–2.86	–2.90	–2.90	–3.69	–2.83	–2.90, –3.3
$L_{1c}$ – $L_{3'v}$	3.46	3.21	2.64	2.70		2.79	4.54	3.38	3.40
$X_{1c}$ – $X_{4v}$	4.27	4.0	3.43	3.52	3.37	3.70	5.26	4.18	4.3

Таблиця 2. Енергії міжзонних переходів у кристалі Si (в eV).

Дисперсія валентних зон кристалів Si та Ge є подібною, тоді як дисперсія зон провідності суттєво відрізняється, особливо в напрямках від центра зони Брілюена. У випадку Ge (рис. 8) дно зони провідності при  $k = 0$  відповідає електронному стану  $\Gamma_{2'}$ , при переході у високосиметричну точку L по лінії  $\Lambda$  дно зо-

ни опускається, так що мінімум зони провідності в Ge перебуває в точці L (стан  $L_1$ ). Вершина валентної зони відповідає стану  $\Gamma_{25'}$ , який (без урахування спінорбітальної взаємодії) шестикратно вироджений. Перший прямий перехід відбувається між станами  $\Gamma_{2'c}$ – $\Gamma_{25'v}$ .

Енергії станів зони провідності, отримані з використанням МП у випадку кристалів Ge добре узгоджуються з даними, одержаними на основі вимірювання фотоемісійних спектрів [18], тоді як для обчислених значень енергій станів валентної зони маємо вищі розбіжності, ніж у випадку Si. Причиною цього є неврахування ефектів спин-орбітальної взаємодії в наших розрахунках.

На відміну від Si та Ge, кристал GaAs є прямозонним напівпровідником із найменшим міжзонним

прямим переходом у точці  $\Gamma$  (рис. 9). Наступний мінімум найнижчої зони провідності є поблизу точки L. Антисиметрична частина потенціалу приводить до розщеплення рівня  $X_1$ , наявного в зоні провідності Si та Ge, на два рівні  $X_1$  і  $X_3$ . Енергії міжзонних переходів (табл. 4), отримані з використанням МП, у випадку кристалів GaAs показують краще узгодження з експериментальними даними [19–20], ніж результати, одержані з використанням першопринципних підходів, особливо в порівнянні з наближенням LDA.

Енергія	МП	ЕМП [15]	LDA [23]	GW [23]	GGA [26]	GW [28]	Експер. [18, 23]
$E_g$	0.73	0.90	0.01	0.65		0.62	0.66, 0.744
$X_{1c} - \Gamma_{25'v}$	0.95	1.0	1.03	1.74	0.778	1.14	1.12, 1.3
$\Gamma_{15c} - \Gamma_{25'v}$	3.44	3.5	2.53	3.21	2.614	2.90	3.4, 3.21
$\Gamma_{2c} - \Gamma_{25'v}$	1.00	1.2	0.01	0.65	0.873	0.57	0.9, 0.89
$L_{1c} - L_{3'v}$	1.95	2.0	1.73	2.45	1.933	2.03	2.1
$L_{3c} - L_{3'v}$	5.38	5.4	5.2	6.04	5.111	5.58	5.4
$X_{1c} - X_{4v}$	3.85	3.8	4.05	4.9	3.836	4.31	4.3
$K_{2c} - K_{3v}$	-3.62	-3.54					-4.5

Таблиця 3. Енергії міжзонних переходів у кристалі Ge (в еВ).

Енергія	МП	ЕМП [15]	LDA [23]	GW [23]	LDA [28]	GW [28]	Експер. [19,20,23]
$E_g$	1.41	1.40	0.57	1.32	0.49	1.22	1.42, 1.52
$\Gamma_{15c} - \Gamma_{15v}$	4.41	4.49	3.73	4.60	3.55	4.24	4.60, 4.61
$L_{1c} - \Gamma_{15v}$	1.69	1.70	1.13	1.92	0.92	1.61	1.71, 1.74
$X_{1c} - \Gamma_{15v}$	1.86	1.82	1.80	2.65	1.30	1.96	1.90
$L_{1c} - L_{3v}$	2.58	2.61	2.40	3.09	2.02	2.73	2.55
$X_{1c} - X_{5v}$	4.10	4.02	4.36	5.36	3.98	4.65	4.58
$X_{1c} - X_{3c}$	0.38	0.30	0.05	0.07	0.22	0.23	0.32, 0.57

Таблиця 4. Енергії міжзонних переходів у кристалі GaAs (в еВ).

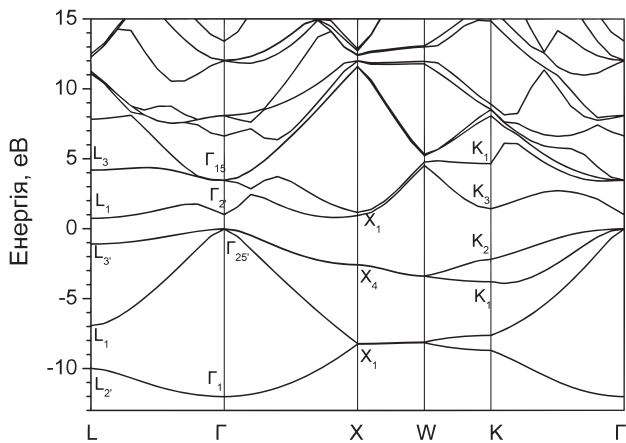


Рис. 8. Зонна діаграма кристалів Ge.

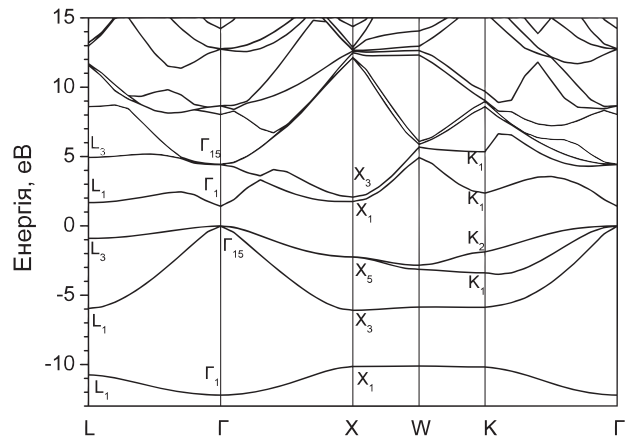


Рис. 9. Зонна діаграма кристалів GaAs.

## V. ВИСНОВКИ

Вивчено властивості електронного спектра напівпровідників Si, Ge та GaAs методом модельного псевдопотенціалу. Отримано добре узгодження з експериментальними даними та результатами розрахунків із використання різних модельних псевдопотенціалів. Запропонований екранований модельний псевдо-

потенціал може застосовуватися для розрахунків зонного енергетичного спектра простих напівпровідникових структур. Метод модельного псевдопотенціалу можна ефективно розширити для адекватного опису енергетичного спектра систем із великою кількістю атомів в елементарній комірці (напівпровідникових гетероструктур та наноструктур).

- [1] K. A. Mader, A. Zunger, Phys. Rev. B **50**, 17393 (1994).  
 [2] С. Н. Гриняев, В. А. Чалдышев, Физ. техн. полупр. **35** (1), 84 (2001).  
 [3] M. V. Fischetti *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter **25**, 473202 (2013).  
 [4] П. Н. Якибчук, М. И. Жовтанецкий, в *Научные сообщения Всесоюзной конференции по строению и свойствам металлических и шлаковых расплавов* (Свердловск, 1974), с. 6.  
 [5] Я. И. Дутчак, П. Н. Якибчук, М. И. Жовтанецкий, препринт ИТФ-75-26Р (Киев, 1975).  
 [6] П. Н. Якибчук, в *Тезисы докладов второго республиканского семинара по конфигурационной модели вещества* (Львов, 1977), с. 53–54.  
 [7] Я. М. Дутчак, П. Н. Якибчук, Г. И. Барыляк, Физ. метал. металловед. **44**, 5 (1977).  
 [8] Я. И. Дутчак, М. И. Жовтанецкий, П. Н. Якибчук, З. А. Гурский, В. В. Фурман, *Электронное строение и физико-химические свойства тугоплавких соединений и сплавов* (Наукова думка, Київ, 1980).  
 [9] В. В. Фурман, дис. канд. фіз.-мат. н. (Львів, 1997).  
 [10] Г. А. Краско, З. А. Гурский, Фіз. тверд. тіла **13**, (1971).  
 [11] D. R. Penn, Phys. Rev. **128**, 2093 (1962).  
 [12] K. Krebs, K. Holz, Sol. Status Commun. **5**, 159 (1968).  
 [13] M. H. Cohen, J. Phys. Rad. **23**, 643 (1962).  
 [14] G. Gilat, R. Rizzi, G. Cubiotti, Phys. Rev. **185**, 971 (1969).  
 [15] M. L. Cohen, T. K. Bergstresser, Phys. Rev. **141**, 789 (1966).  
 [16] У. Харрисон, *Псевдопотенциалы в теории металлов* (Мир, Москва, 1968).  
 [17] D. R. Masovic, F. R. Vukajlovic, S. Zekovic, J. Phys. C **16**, 6731 (1983).  
 [18] D. E. Aspnes, Phys. Rev. Lett. **31**, 230 (1973).  
 [19] T. C. Chiang, J. A. Knapp, M. Aono, D. E. Eastman, Phys. Rev. B **21**, 3513 (1980).  
 [20] D. D. Sell, Phys. Rev. B **6**, 3750 (1972).  
 [21] J. E. Ortega, F. J. Himpsel, Phys. Rev. B **47**, 2130 (1993).  
 [22] D. Straub, L. Ley, F. J. Himpsel, Phys. Rev. Lett. **54**, 142 (1985).  
 [23] M. Rohlfing, P. Kruger, J. Pollmann, Phys. Rev. B **48**, 17791 (1993).  
 [24] C. T. Chan, D. Vanderbilt, S. G. Louie, Phys. Rev. B **33**, 2455 (1986).  
 [25] C. Filippi, C. J. Umrigar, M. Taut, Phys. Rev. B **50**, 19947 (1994).  
 [26] D.M. Bylander, L. Kleinman, Phys. Rev. B **55**, 9432 (1997).  
 [27] J. Muscat, A. Wander, N. M. Harrison, Chem. Phys. Lett. **342**, 397 (2001).  
 [28] A. Fleszar, Phys. Rev. B **64**, 245204 (2001).

## MODEL PSEUDOPOTENTIAL CALCULATIONS FOR THE ELECTRONIC STRUCTURE OF Si, Ge, AND GaAs

P. M. Yakibchuk, O. V. Bovgyra, I. V. Kutsa  
*Faculty of Physics, Ivan Franko National University of Lviv,  
 8a, Kyrylo and Mefodiy St., Lviv, UA-79005, Ukraine*

This paper describes a nonlocal model pseudopotential proposed for the description of the electron-ion interaction in metals. In a series of works the present model pseudopotential was used to calculate the properties of simple, transitional and rare earth metals. In all cases, a good agreement of calculation results with appropriate experimental data was obtained. When we determined the parameters of the pseudopotential for energy eigenvalues we use energy of the observed spectroscopic terms of the free ion.

We have used parameters of model pseudopotential in our present semiconductor calculations. When constructing the model pseudopotentials for semiconductors we substitute metallic dielectric permittivity function for the corresponding function in Penn's approximation. Spin-orbit contributions have not been included in the present calculations. The band energy structure calculations have been performed for semiconductors Si, Ge, and GaAs. The band structure parameters obtained in the present work demonstrate a good agreement with experimental values and results of other calculations.

We conclude that the proposed screened model pseudopotential can be used for the calculation of band energy spectrum of simple semiconductor structures and can be effectively extended to adequately describe the energy spectrum of systems with a large number of atoms in the unit cell. This approach is motivated by the demand for pseudopotentials able to address semiconductor heterostructures and nanostructures where *ab initio* methods are both too costly and insufficiently accurate at the level of the local density approximation.