

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ЕФЕКТИВНОЇ МАСИ НОСІВ ЗАРЯДУ КРЕМНІЮ

Методом змішаного базису розраховано енергетичний спектр кремнію. Значення ефективної маси носіїв заряду отримані з використанням поліномів Лагранжа та сплайн-функцій. Результати моделювання добре узгоджуються з експериментальними даними.

The energy band spectrum has been calculated on the mixed basis. The effective mass obtained using Lagrange polynomials and spline functions and shows the good agreement with experiment in case of crystals silicon.

1. ВСТУП

Тензор ефективної маси носіїв заряду є важливою диференційною характеристикою закону дисперсії $E(k)$. З ефективною масою пов'язані безпосередньо такі важливі параметри напівпровідника, як ширина забороненої зони та сила осцилятора прямих міжзонних переходів [1]. Найбільший інтерес для напівпровідників становлять значення ефективних мас в найнижчих долинах зони провідності та біля стелі валентної зони.

2. ПОСТАНОВКА ПРОБЛЕМИ

Для обчислення тензора ефективної маси носіїв заряду кремнію необхідно провести розрахунок електронного енергетичного спектру. Його здійснюють методом змішаного базису [2,3]. Однак, у методі змішаного базису безпосередній розрахунок ефективної маси є достатньо складним [4].

У цій роботі, для визначення компонентів тензора ефективної маси електронів і дірок, запропоновано, в окремих долинах описати закон дисперсії носіїв заряду аналітичним виразом $E(k)$.

Знайшовши другу похідну $\frac{\partial^2 E(K)}{\partial k^2}$ отримаємо значення тензора ефективної маси.

²⁹ Національний університет "Львівська політехніка"

3. ФОРМУВАННЯ ЦІЛЕЙ РОБОТИ

Обчислення тензора ефективної маси носіїв заряду в кремнії є актуальним і практично важливим завданням. Безпосередній розрахунок вимагає великої кількості обчислень, і тому є затратним. Отримання аналітичного виразу закону дисперсії носіїв заряду $E(k)$ дає можливість спростити розрахунки. Для отримання аналітичного виразу закону дисперсії $E(k)$ можна використати методи Лагранжа, Ньютона, поліноми Чебишева, сплайн-функції та ін. [5].

У цій роботі аналітичний вираз закону дисперсії для кремнію $E(k)$ отримано за допомогою методів Лагранжа та з використанням кубічних сплайнів [5]. Розрахунки і моделювання виконано у комп'ютерному пакеті Maple.

4. ВИКЛАД ОСНОВНОГО МАТЕРІАЛУ

Перевагою використання саме сплайнів є те, що вони – найбільш гладкі функції серед тих, які приймають значення в заданих точках. Сплайни степені вище першої у випадку гладкої функції добре наближають не лише саму функцію, а також її похідні. Таким чином, використання кубічних сплайнів забезпечує неперервність першої та другої похідних у вузлах x_1, x_2, \dots, x_{N-1} . Для визначення тензора ефективної маси носіїв заряду нам саме й необхідно розраховувати другу похідну функції $E(k)$, яка є гладкою у долинах.

Для наближення функції $E(k)$ поліномами Лагранжа та кубічними сплайнами розраховуємо значення $E(k)$ в околі екстремальних точок k_0 за 7-точковою схемою вздовж кожної з осей x, y, z з кроком $\frac{2\pi}{a} \times 0.02$, де a - параметр ґратки кремнію. У кремнії абсолютний мінімум зони провідності знаходиться в точці $(0.84, 0, 0)$ на напрямку Γ -Х. Ізоенергетичні поверхні є еліпсоїдами обертання відносно великої півосі, що збігається з напрямком $\{1, 0, 0\}$. Для валентної зони кремнію максимум енергії знаходиться в центрі зони Брилюєна $k = 0$, а ізоенергетичні поверхні мають сферичну форму.

Компоненти тензора ефективної маси розраховуємо за формулою:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2 m_0} \times \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k^2}, \quad (1)$$

де m_0 - вільноелектронна маса, \hbar - стала Планка.

У зоні провідності для кремнію експериментально виявлено легкі електрони $m_{ел.,л.}$ та важкі електрони $m_{ел.,в.}$. У валентній зоні виявлено легкі дірки $m_{д.,л.}$ та важкі дірки $m_{д.,в.}$. Результати розрахунку ефективних мас кремнію методом Лагранжа m_L та за допомогою сплайн-функцій m_{Sp} у порівнянні з експериментальними даними наведено в таблиці 1.

Таблиця 1

Значення ефективних мас кремнію m_L та m_{Sp} , розраховані за формулою (1) і експериментальні дані

В одиницях $1/m_0$	m_L	m_{Sp}	Експ.[6]	Експ.[7]
$m_{ел.,в.}$	0.997	0.962	0.961	0.92
$m_{ел.,л.}$	0.203	0.197	0.190	0.19
$m_{д.,в.}$	0.387	0.438	0.537	0.46
$m_{д.,л.}$	0.161	0.145	0.153	0.16

З аналізу даних таблиці 1 бачимо, що результати розрахунку ефективних мас кремнію методом Лагранжа та за допомогою сплайн-функцій добре узгоджуються з експериментальними даними. Це підтверджує ефективність запропонованого підходу для спрощення розрахунків.

На рис.1 зображено енергетичну криву валентної зони кремнію $E(k)$.

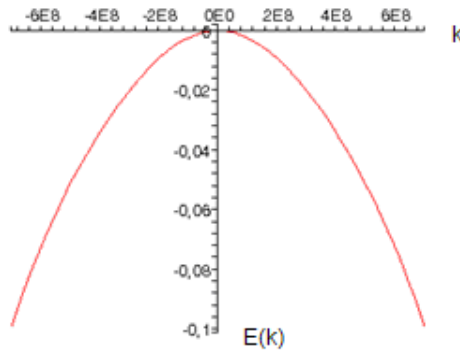


Рис. 1. Енергетична крива валентної зони для легких дірок $m_{д.,л.}$

(крок по вектору k рівний $\frac{2\pi}{a} \times 0.02$, де a - параметр ґратки

кремнію, $E(k)$ в еВ).

Дані моделювання використано для розрахунку ефективної маси легких дірок $m_{o..l}$ кремнію. Моделювання проведено у середовищі Maple. Аналогічно, отримано криві для легких $m_{el..l}$ і важких електронів $m_{el..e}$ та важких дірок $m_{o..e}$.

5. ВИСНОВКИ

Розраховані методом змішаного базису значення електронного енергетичного спектру кремнію використано для моделювання ефективної маси носіїв заряду. Аналіз даних таблиці показує, що розраховані значення тензора ефективної маси носіїв заряду у кремнії добре узгоджуються з експериментальними даними. Це підтверджує достовірність розрахунку електронного енергетичного спектру для кремнію у методі змішаного базису і обґрунтованість використання аналітичного виразу для моделювання ефективної маси носіїв заряду.

1. Ридли Б. Квантовые процессы в полупроводниках.-М.:Мир,1986.-304 с.
2. Сиротюк С.В. Про критерій побудови локального модельного потенціалу кремнію /Сиротюк С.В., Краєвський С.Н., Кинаш Ю.С.// Укр.фіз.журн.-2006.-Т.51.,№7.-С.674-678.
3. Сиротюк С.В. Електронна енергетична структура кристалів AlN, GaN та InN розрахована в змішаному базисі одночастинкових станів /Сиротюк С.В., Краєвський С.Н., Кинаш Ю.С.// Укр.фіз.журн.-2008.-Т.53.,№6.-С.547-551.
4. Syrotyuk S.V. The new implementation of the mixed basis approach to the ab initio electronic structure theory // 6th international workshop on expert evaluation and control of compound semiconductor materials and technologies-Budapest(Hungary). /Syrotyuk S.V., Kynash Yu.E., and Kraevskiy S.N. // -2002.-P.200.
5. Бахвалов Н.С. Численные методы. /Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельников Г.М. // -М.: Наука,1987.-600 с.
6. Fiorentini Vincenzo. Semiconductor band structures at zero pressure// Phys.Rev.,B.-1992.-V.46, №4.-P.2086-2091.
7. Gryko J., Energy band gaps of silicon-carbon alloys / Gryko J., Sankey O.F.// Phys.Rev.B.-1995.-V.51, №11.-P.7295-7298.