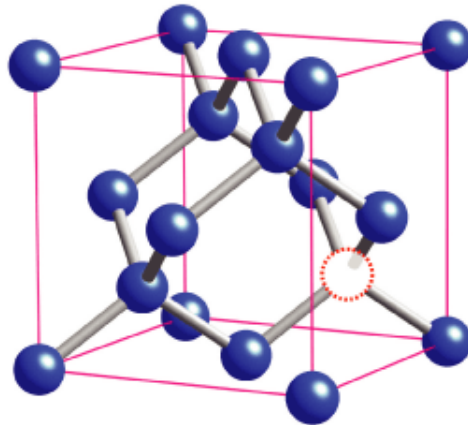


Bandstrukturmethoden Demo 3: Silizium-Kristall (diamond)

Bandstrukturrechnung mittels FP-LAPW WIEN2k-02

- Kristallstruktur von Si → diamond
- Input für das WIEN-Programm
- Vorbereitung der Bandstrukturrechnung (mit weiteren wichtigen Parametern).
- Die selbstkonsistente Bandstrukturrechnung
- Ergebnisse: **die indirekte Bandlücke**



**WIEN2k: An Augmented Plane Wave Plus Orbitals
Program for Calculating Crystal Properties**

P. Blaha, K. Schwarz, G. Madsen, D. Kvasnicka,
J. Luitz,
Inst. of Physical and Theoretical Chemistry,
Vienna University of Technology

Elektronenstruktur (Z=14):



- Input für das WIEN-Programm: Si_demo.struct

Si

F LATTICE,NONEQUIV. ATOMS: 1 227 Fd-3m

MODE OF CALC=NREL

10.262500 10.262500 10.262500 90.000000 90.000000 90.000000

ATOM= 1: X=0.12500000 Y=0.12500000 Z=0.12500000

MULT= 2 ISPLIT= 2

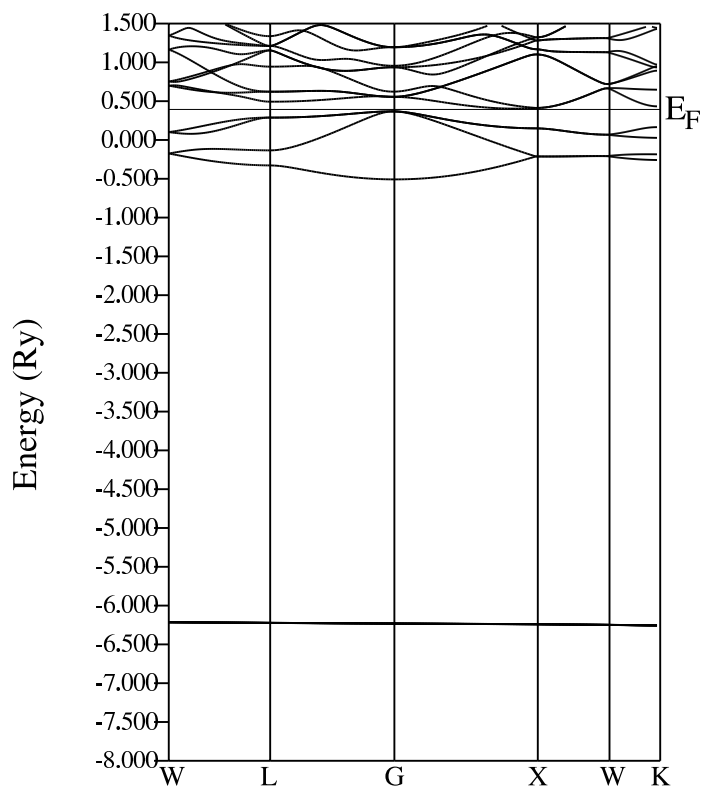
1: X=0.87500000 Y=0.37500000 Z=0.37500000

Si1 NPT= 781 R0=0.00050000 RMT= 2.2000 Z: 14.0

LOCAL ROT MATRIX: 1.0000000 0.0000000 0.0000000
0.0000000 1.0000000 0.0000000
0.0000000 0.0000000 1.0000000

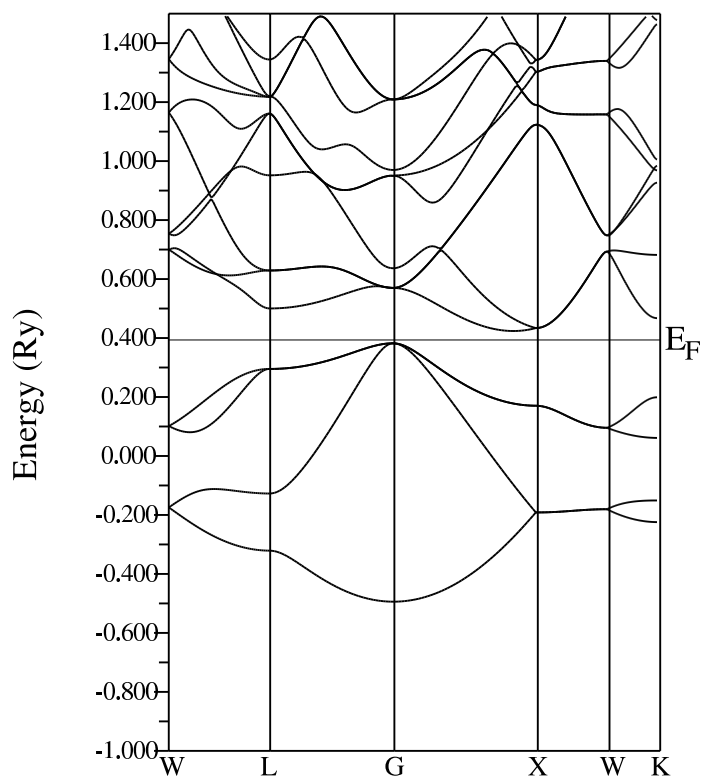
0 NUMBER OF SYMMETRY OPERATIONS

Si_demo atom 0 size 0.20



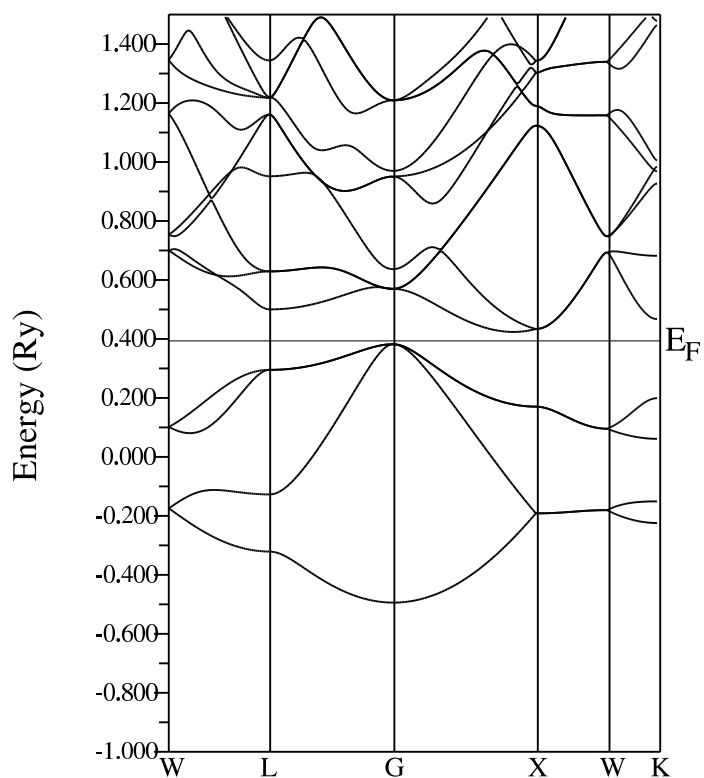
Silizium-Bandstruktur: 2p- und Valenzbänder

Si_demo atom 0 size 0.20



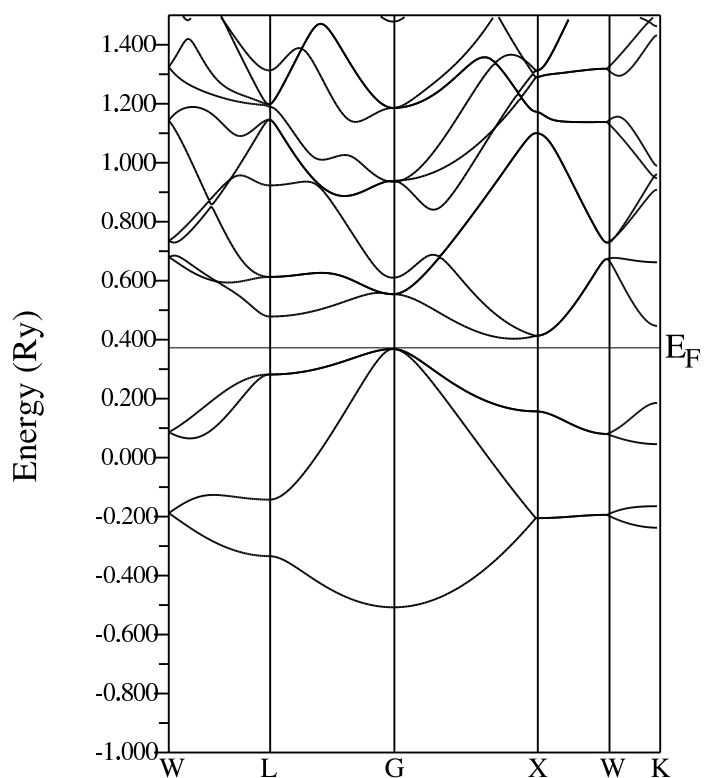
Silizium-Bandstruktur: Valenz- und Leitungsbänder

Si_demo atom 0 size 0.20



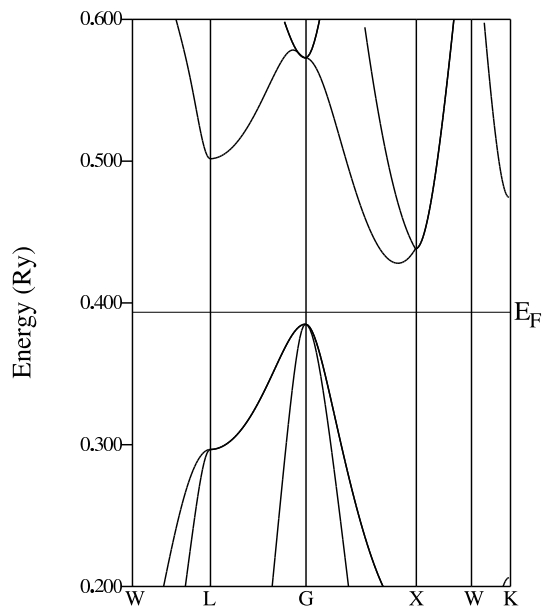
Silizium-Bandstruktur: GGA

Si_demo atom 0 size 0.20



Silizium-Bandstruktur: LDA

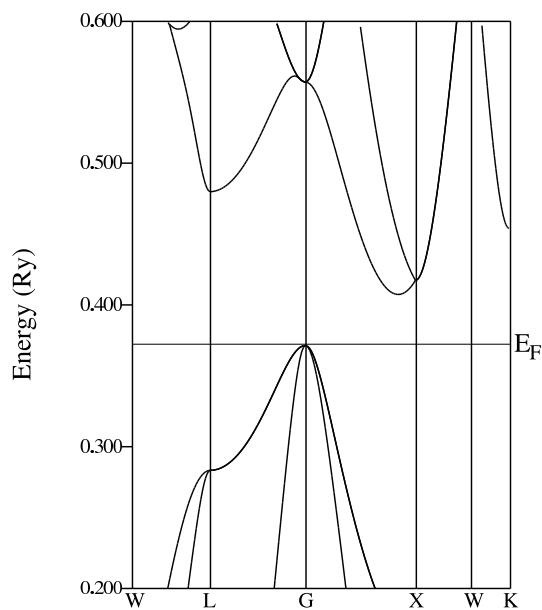
Si_demo atom 0 size 0.20



Silizium-Bandstruktur: GGA

Die Breite der (indirekten) Bandlücke beträgt 0.58 eV.

Si_demo atom 0 size 0.20



Silizium-Bandstruktur: LDA

Die Breite der (indirekten) Bandlücke beträgt 0.48 eV.

- Die Abhängigkeit der theoretisch ermittelten Bandlücke vom Kristallpotential ist beträchtlich ($\approx 20\%$).
- **Dessen ungeachtet können solche Potentialeffekte die große Differenz zum Experiment (band gap > 1 eV) nicht erklären.**

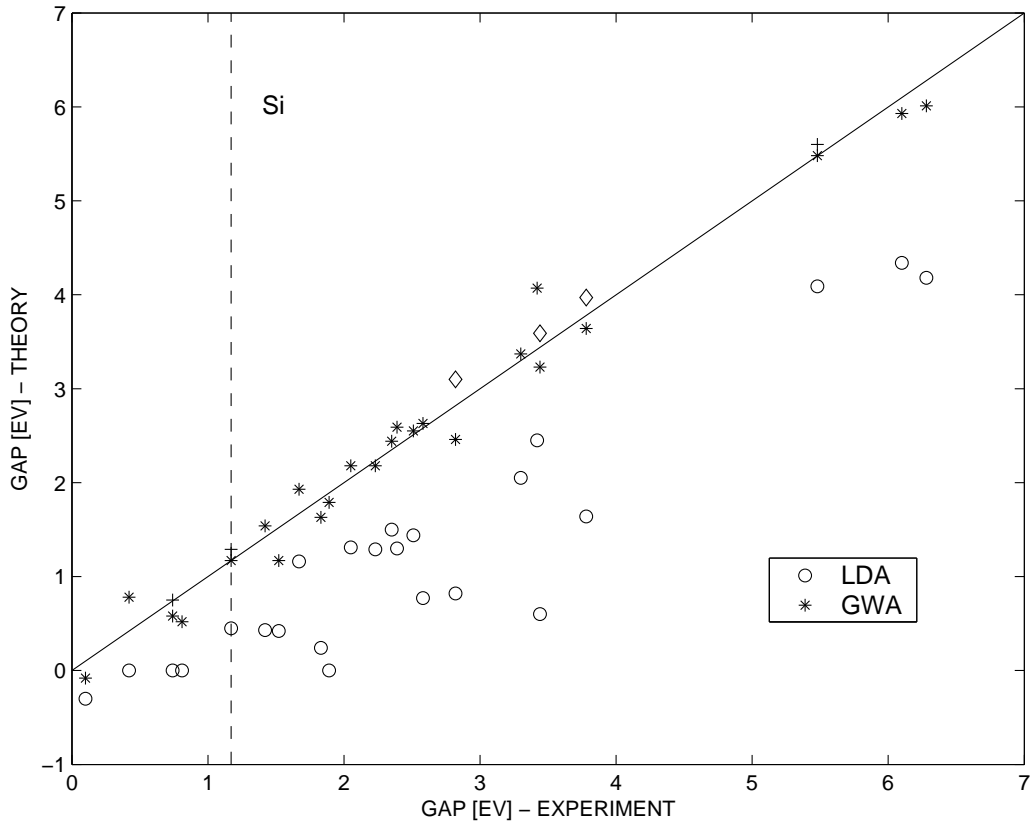


Figure 1: Vergleich theoretischer LDA- und GWA-Bandlücken mit experimentellen Werten für Halbleiter der Gruppen IV, III-V und II-VI. Daten aus: K.A. Johnson and N.W. Ashcroft, Phys. Rev. 58, 15548 (1998).

Zusätzlich sind in diesem Diagramm noch enthalten:

(+) Werte für C, Si, Ge (Hybertsen and Louie, 1986)

(diamond) Werte für ZnO, ZnS, ZnSe (Oshikiri and Aryasetiawan, 1999).