



MISSION INNOVATION

accelerating the clean energy revolution

POA MATERIALI AVANZATI PER L'ENERGIA

PROGETTO IEMAP - Piattaforma Italiana Accelerata per i Materiali per
l'Energia

D4.10 - Programma di Calcolo del Diagramma a Bande di Energia

G. Abagnale



D4.10 - Modello teorico diagramma a bande di energia e programma di Simulazione per semiconduttori

G. Abagnale, RSE

Dicembre 2024

Report MISSION INNOVATION

Ministero della Transizione Ecologica - ENEA
Mission Innovation 2021-2024 - III annualità

Progetto: Piattaforma Italiana Accelerata per i Materiali per l'Energia

Work package: WP4

WP4 – LA4.8: Sviluppo del modello teorico stress/deformazioni e del programma di calcolo per la selezione di strutture buffer per celle InGaP/Si.

Responsabile del Progetto: M. Celino, ENEA

Responsabile della LA: G. Abagnale, RSE

Indice

SOMMARIO	5
1 INTRODUZIONE	6
2 SVILUPPO MODELLO TEORICO	6
2.1 LA STRUTTURA A BANDE	5
2.2 MODELLI TEORICI.....	7
3 RISULTATI.....	12
4 CONCLUSIONI.....	13
5 APPENDICE.....	14
6 BIBLIOGRAFIA.....	17

Lista figure

Figura 2.1: Formazione delle bande al diminuire della distanza di interazione tra atomi

Figura 2.2: Visualizzazione dello stato energetico di una molecola

Figura 2.3: Visualizzazione di un'onda piana unidimensionale e^{ikx}

Figura 2.4: Confronto tra la funzione d'onda e il potenziale reali

Figura 2.5: diagramma di flusso per soluzione iterativa (self-consistent) delle equazioni di Kohn-Sham.

Figura 3.6: Grafico della struttura a bande del silicio ottenuto per esecuzione del codice

Figura 3.7: Grafico della struttura a bande del GaAs ottenuto dal modello di calcolo

Sommario

Nell'ambito del progetto Mission Innovation si propone di sviluppare, attraverso la piattaforma IEMAP, nuove strutture di materiali che permettano di realizzare celle InGaP su substrati di Silicio (Si), in sostituzione dei substrati di arseniuro di gallio (GaAs) attualmente impiegati, permettendo così di ottenere elevate prestazioni, una riduzione dei costi e dell'impatto ambientale.

A tal fine, nel secondo anno del progetto MI-IEMAP si è svolta un'attività per la realizzazione di un modello teorico e di un programma di calcolo che consenta di calcolare il diagramma a bande dei semiconduttori utilizzati nei processi epitassiali simulati.

1 Introduzione

Nel secondo anno dell'attività di ricerca prevista nella LA 4.8 del WP4 (*Sviluppo del modello teorico stress/deformazioni e programma di calcolo per la selezione di strutture buffer per celle InGaP/Si*), si prevede la formulazione di un modello teorico che consenta di calcolare il diagramma a bande dei semiconduttori coinvolti nella crescita di strutture epitassiali.

2 Sviluppo Modello Teorico

2.1 La struttura a bande

La struttura a bande di un materiale è fondamentale per comprenderne le proprietà ottiche ed elettromagnetiche.

Esaminando lo spettro di un atomo o di una molecola, è possibile individuare delle linee (siano esse in assorbimento o in emissione) corrispondenti ai livelli energetici disponibili agli elettroni.

La disposizione energetica degli elettroni è regolata da diversi fattori: innanzitutto, essendo fermioni, devono obbedire al principio di esclusione di Pauli; in secondo luogo, valgono le regole empiriche di Hund, per la determinazione dell'ordine di riempimento degli orbitali atomici.

L'esempio di spettro più semplice si osserva nel caso degli atomi isolati: le principali interazioni hanno natura elettrostatica attrattiva (elettroni-nucleo) e repulsiva (tra elettroni), le energie coinvolte sono dell'ordine dell'elettronvolt e le linee spettrali appaiono ben distanziate e nette.

Quando degli atomi vengono avvicinati tra loro, le energie in gioco fanno sì che nuovi livelli intermedi vengano resi disponibili agli elettroni, fenomeno che va sotto il nome di *splitting dei livelli energetici* (Fig.1.1).

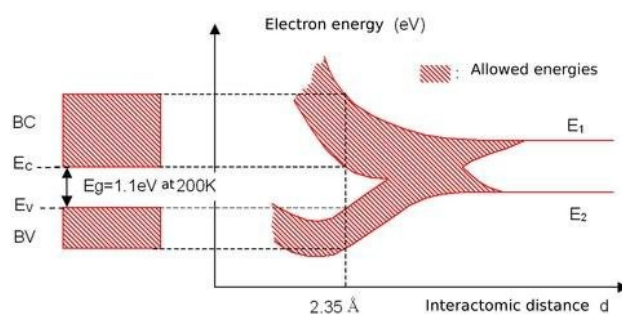


Figura 2.1: Formazione delle bande al diminuire della distanza di interazione tra atomi

Nel caso semplificato di due atomi, al diminuire della distanza si crea un legame molecolare e il sistema così formato si arricchisce di nuovi gradi di libertà, dovuti ai moti relativi dei due nuclei e degli elettroni coinvolti (Fig.1.2).

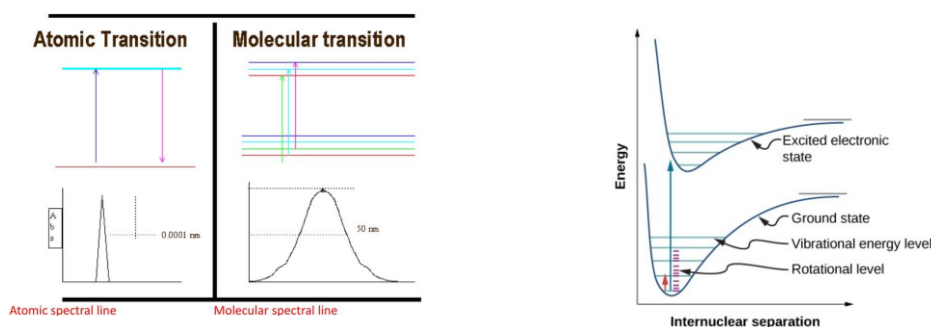


Figura 2.2: Visualizzazione dello stato energetico di una molecola

L'aumento del numero di livelli energetici, quando dalle molecole di modeste dimensioni si passa ai solidi - contenenti una quantità molto maggiore di atomi - si traduce nella trasformazione delle righe spettrali in bande energetiche: zone dello spettro in cui i livelli energetici sono talmente vicini da essere difficilmente risolvibili. Le bande energetiche possono essere di due tipologie: di conduzione e di valenza. Tra queste, a seconda della natura del materiale, può esservi un gap energetico di ampiezza variabile. I metalli presentano una sovrapposizione tra la banda di conduzione e quella di valenza, semiconduttori ed isolanti le hanno invece separate [1]. Nel caso di materiali cristallini, caratterizzati da una struttura geometrica estremamente regolare, si ha il coinvolgimento di un gran numero di elettroni che rende impossibile una soluzione diretta dell'equazione di Schrödinger.

2.2 Modelli Teorici

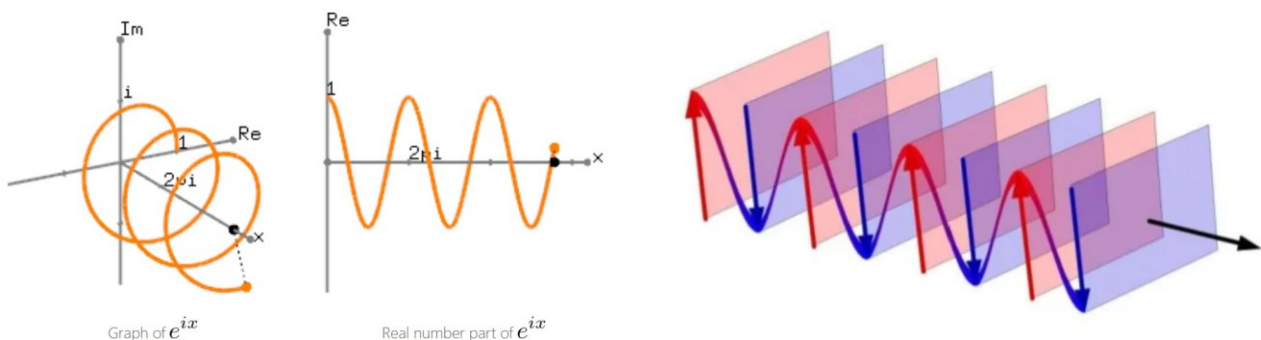
Diversi sono modelli teorici utilizzati per risolvere l'equazione di Schrödinger nel caso di un cristallo:

1. La teoria dello Pseudo-potenziale

Tale teoria sfrutta la simmetria del solido per semplificare i calcoli applicando il teorema di Bloch:

“le soluzioni $\phi_k(x)$ dell'equazione di Schrödinger per un potenziale periodico possono essere espresse sotto forma di onde piane modulate da funzioni periodiche $u_k(x)$ aventi la stessa periodicità del potenziale. In simboli: $\phi_k(x) = e^{ikx}u_k(x)$ se $V(x) = V(x + a)$ ”

Dove le onde piane considerate sono delle semplici forme e^{ikx} che rappresentano dei versori rotanti nel piano complesso, la cui proiezione nello spazio reale si traduce in onde sinusoidali dirette nel verso di propagazione x con vettore d'onda k [2,3]. I fronti d'onda sono costituiti da piani paralleli tra loro e perpendicolari alla direzione di propagazione, da cui il nome di onda piana (Fig.2.3).



(a) Onda nel piano complesso (sinistra)
(b) e proiezione sul piano reale (destra)

Fronti d'onda passanti per le creste e le valli dell'onda

Figura 2.3: Visualizzazione di un'onda piana unidimensionale e^{ikx}

Per quanto riguarda il potenziale che presenta delle ampie oscillazioni passando dalle regioni di core a quelle interstiziali, questa difficoltà può essere aggirata mediante il metodo pseudo-potenziale che consente di ignorare la forma esatta di $V(x)$ nel core preservando le proprietà fisiche rilevanti ai fini della sua caratterizzazione energetica [4,5] (fig.2.4).

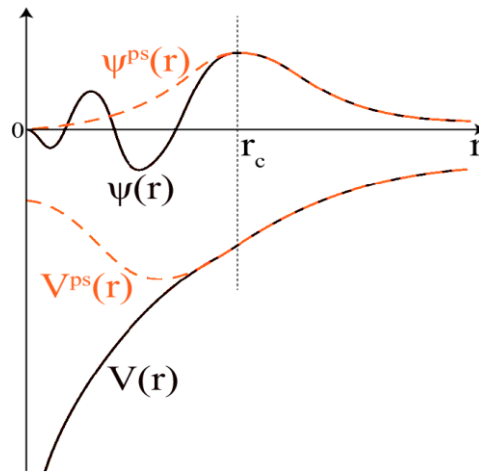


Figura 2.4: Confronto tra la funzione d'onda e il potenziale reali (linea nera) e i loro corrispettivi derivanti dal modello dello pseudo-potenziale (tratteggio arancione)

Lo pseudo-potenziale è creato mediante espansione in componenti di Fourier su un insieme limitato di vettori e nel caso più semplice di due atomi in posizioni simmetriche rispetto al centro della cella unitaria si ha:

$$V(x) = \sum_{|G| \leq G_0} (V_G^S S^S(G) + i V_G^A S^A(G)) e^{-iGx}$$

ove si sono separate la parte simmetrica e quella antisimmetrica del potenziale. I termini V_G sono detti fattori di forma, mentre con $S(G)$ si indicano i fattori di struttura.

I fattori di forma dipendono dal potenziale per singolo atomo V_G^{at} :

$$V^{at}(G) = \frac{2}{\Omega} \int V^{at}(x) e^{iGx}$$

con Ω volume della cella unitaria e nel caso di due atomi in posizioni simmetriche rispetto al centro della cella unitaria, si ha: $V_G^S = V_{G,1} + V_{G,2}$ mentre $V_G^A = V_{G,1} - V_{G,2}$

2. Metodo Variazionale

In accordo con la teoria del metodo variazionale di Ritz, è possibile ricondurre la soluzione del problema di all'equazione di Schrödinger agli autovalori $\hat{H}\varphi = E\varphi$ ove $\hat{H}$ diventa una matrice avente componenti cinetiche solo sulla diagonale e componenti potenziali per ogni elemento.

In termini espliciti: $\hat{H}_{G,G'} = \frac{1}{2} |k + G|^2 \sigma_{G,G'} + V(|\Delta G|) \cos[(\Delta G_1 + \Delta G_2 + \Delta G_3) \frac{\pi}{4}]$

3. La teoria del funzionale della densità

La DFT (Density Functional Theory) è un altro potente strumento per il calcolo della struttura a bande di un materiale. Come per il metodo dello pseudopotenziale, il punto di partenza è l'equazione di Schrödinger.

Nel caso di un sistema a molti corpi, l'Hamiltoniana si compone di tre termini, che tengono conto delle interazioni elettrone-elettrone, elettrone-nucleo e nucleo-nucleo. In termini di unità atomiche di Hartree, l'equazione di Schrödinger per un sistema avente M nuclei ed N elettroni è:

$$\left[-\sum_i \frac{\nabla_i^2}{2} - \sum_I \frac{\nabla_I^2}{2M_I} - \sum_{i,I} \frac{Z_I}{|\vec{r}_i - \vec{R}_I|} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} + \frac{1}{2} \sum_{I \neq J} \frac{Z_I Z_J}{|\vec{R}_I - \vec{R}_J|} \right] \Psi = E_{tot} \Psi$$

ove si sono utilizzate le lettere minuscole per gli indici riferiti agli elettroni e quelle maiuscole per gli indici riferiti ai nuclei. Questa forma dell'equazione di Schrödinger è ancora molto generale: per semplificarla adattandola al caso dei solidi occorre introdurre alcune approssimazioni, prima tra tutte quella di nuclei fissi. Nell'approssimazione di nuclei fissi, le posizioni $\vec{R}_I$ dei nuclei diventano parametri noti e, per simulare l'immobilità, si possono portare all'infinito le masse nucleari: $M_I = \infty$.

Definendo inoltre l'energia totale privata della costante dovuta alle interazioni nucleari:

$$E = E_{tot} - \frac{1}{2} \sum_{I \neq J} \frac{Z_I Z_J}{|\vec{R}_I - \vec{R}_J|}$$

e il potenziale coulombiano nucleare di cui risentono gli elettroni

$$V_n(\vec{r}_i) = - \sum_I \frac{Z_I}{|\vec{r}_i - \vec{R}_I|}$$

si può riscrivere l'equazione di Schrödinger come:

$$\left[-\sum_i \frac{\nabla_i^2}{2} + \sum_i V_n(\vec{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \right] \Psi = E \Psi$$

Quest'ultima altro non è che l'equazione fondamentale della teoria della struttura elettronica. Dal confronto con l'equazione di Schrödinger dell'elettrone singolo, risulta immediato definire l'Hamiltoniana multi-elettrone:

$$\widehat{H}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \sum_i \left(-\frac{\nabla_i^2}{2} + V_n(\vec{r}_i) \right) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} = \sum_i \widehat{H}_0(\vec{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

$\widehat{H}_0$ Hamiltoniana di elettrone singolo.

Nell'ulteriore approssimazione di elettroni indipendenti, il termine di interazione coulombiana tra gli elettroni viene soppresso e l'equazione di Schrödinger può essere riscritta nella semplice forma:

$$\sum_i \widehat{H}_0(\vec{r}_i) \Psi = E \Psi$$

Questa espressione presenta alcuni pro e contro: è intuitiva nel significato e più facile da trattare matematicamente ma elimina un termine che ha lo stesso ordine di grandezza degli altri.

Una soluzione a questo problema viene dall'approssimazione di campo medio, che consente di mantenere una descrizione a singolo elettrone e di considerare al tempo stesso l'interazione coulombiana tra elettroni. All'interno di questo contesto, risulta conveniente definire una nuova funzione: la densità elettronica $n(\vec{r})$, che è definita formalmente come la probabilità di trovare un elettrone qualsiasi in una data posizione $\vec{r}$.

In base all'equazione di Poisson $\nabla^2 \phi(\vec{r}) = 4 \pi n(\vec{r})$, la densità di elettroni genera un potenziale elettrostatico (si resta qui all'interno della teoria classica dell'elettromagnetismo) il quale, in unità atomiche, prende il nome di potenziale di Hartree ed è definito come $V_H(\vec{r}) = -\phi(\vec{r})$.

In questo modo, ogni elettrone è ancora considerato indipendente ma risente del medesimo potenziale complessivo ed è quindi possibile esprimere l'equazione di Schrödinger per singolo elettrone nella seguente forma:

$$\left[-\frac{\nabla^2}{2} + V_n(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) \right] \psi_i(\vec{r}) = E_i \psi_i(\vec{r})$$

con ψ_i autofunzione del singolo elettrone, $V_H(\vec{r}) = \int \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d\vec{r}'$ soluzione esplicita dell'equazione di Poisson e $n(\vec{r}) = \sum_i |\psi_i(\vec{r})|^2$ densità elettronica come somma delle probabilità indipendenti di trovare i singoli elettroni nella posizione $\vec{r}$.

Si nota che l'equazione risultante dell'approssimazione di campo medio comporta una notevole riduzione della complessità di calcolo: da un'equazione differenziale 3N-dimensionale si passa ad N equazioni tridimensionali. Questo approccio sinora è valido per particelle classiche e, al fine di poter descrivere accuratamente la scala atomica, occorre introdurre due ulteriori termini: il potenziale di scambio $V_x(\vec{r})$ e il potenziale di correlazione $V_c(\vec{r})$.

In questo modo, l'equazione di Schrödinger diventa:

$$\left[-\frac{\nabla^2}{2} + V_n(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) + V_x(\vec{r}) + V_c(\vec{r}) \right] \psi_i(\vec{r}) = E_i \psi_i(\vec{r})$$

Giunti a questo punto, tre sono ancora i nodi irrisolti:

- il legame tra la funzione d'onda totale Ψ e le autofunzioni di singolo elettrone ψ_i ;
- l'espressione esplicita delle ψ_i ;
- il valore dell'energia totale E.

Una prima osservazione, dovuta a Hohenberg - Kohn, è che,

“fintanto che il sistema si trova nello stato fondamentale, l'energia totale è un
funzionale della sola densità elettronica, ovvero $E = F[n(\vec{r})]$ ”.

Al contrario, per gli stati eccitati, l'energia totale è funzionale della funzione d'onda complessiva, ovvero $E = F[\Psi(\vec{r}_1 - \vec{r}_N)]$. Questa osservazione costituisce il primo teorema di Hohenberg-Kohn [6].

Il secondo teorema di Hohenberg-Kohn afferma che:

“la densità elettronica n_0 dello stato fondamentale è la funzione che minimizza l'energia totale $E = F[n]$,
ovvero $\frac{\delta F[n]}{\delta n} |_{n_0=0} = 0$ ”

Dalla dimostrazione di questi due teoremi si giunge all'equazione di Kohn-Sham:

$$\left[-\frac{\nabla^2}{2} + V_n(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) + V_{xc}(\vec{r}) \right] \psi_i(\vec{r}) = E_i \psi_i(\vec{r})$$

Con $V_{xc}(\vec{r}) = \frac{\delta E_{xc}[n]}{\delta n} |_{n(\vec{r})}$ potenziale di scambio e correlazione ove E_{xc} è l'energia di scambio e correlazione.

Le equazioni di Kohn-Sham non sono di immediata soluzione. Innanzitutto, il calcolo di $E_{xc}[n]$ richiede ulteriori approssimazioni e, in secondo luogo, le incognite ψ_i presentano un problema: esse sono infatti anche indispensabili per determinare la densità elettronica e quindi l'Hamiltoniana, risolvendo la quale le ψ_i stesse

si trovano. È un tipico caso di soluzioni accoppiate e la procedura che si segue in questo caso è di natura iterativa (Fig.2.5).

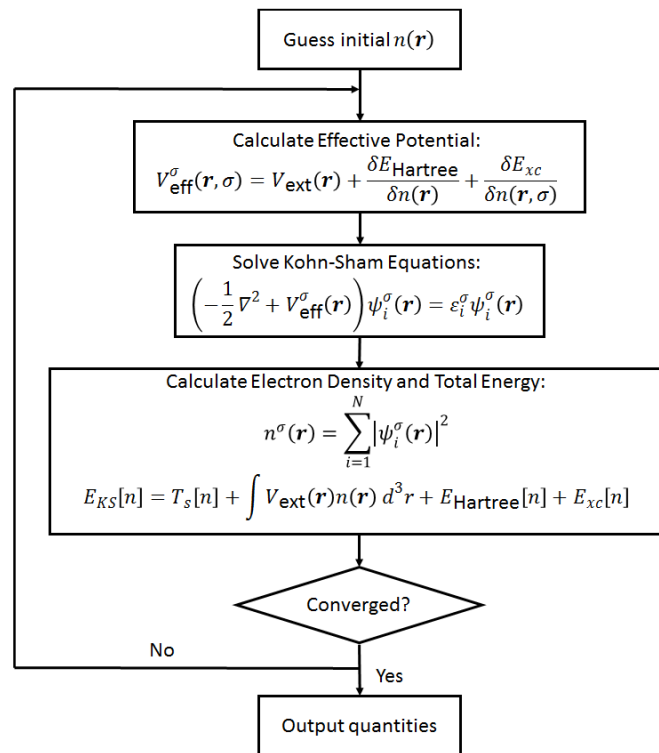


Fig. 2.5: diagramma di flusso per soluzione iterativa (self-consistent) delle equazioni di Kohn-Sham. Il parametro in input è la densità elettronica, che viene inserita all'interno delle equazioni stesse ed affinata in seguito al calcolo degli autovalori energetici. La densità elettronica che si ottiene in output a partire dai nuovi dati viene riportata in input, fino a quando non è soddisfatto un criterio di convergenza

3 Risultati

È stato codificato in linguaggio Python (versione 3.9) il metodo dello pseudo-potenziale ed applicato per ricavare la struttura a bande del Silicio al fine di verificare il corretto funzionamento del codice. Si è scelto il Silicio come elemento test poiché è presente molta letteratura per questo elemento con cui confrontare i risultati ottenuti dalla simulazione.

Il codice è stato così strutturato:

- si definiscono le funzioni necessarie per il calcolo dello pseudopotenziale $V_{ps}()$ e $V_{ps_TOT}()$ e dell'energia cinetica $T()$.
- si definiscono le funzioni responsabili della generazione degli indici di Miller dei vettori del reticolo reciproco $index_generator()$ e della disposizione di questi vettori in una matrice $vector_matrix()$
- si definisce la funzione che costruisce la matrice Hamiltoniana $H_fill()$. La chiamata di questa funzione genera, a cascata, chiamate a tutte le precedenti.
- si calcola il percorso k_path lungo il contorno della zona irriducibile di Brillouin, passando per i punti ad alta simmetria.
- si calcolano gli autovalori energetici E associati ai punti del k_path .
- si definiscono i parametri del grafico e vengono rappresentate le bande energetiche, traslate in maniera tale che lo zero sia centrato sull'energia di Fermi.

Per poter eseguire il codice sono stati importati le librerie utili per la gestione degli strumenti algebrici e grafici oltre la libreria *tqdm* che permette di tenere traccia degli step del codice in esecuzione e la libreria *scipy.constants* che contiene le costanti fisiche.

Dall'esecuzione del codice si è ottenuto il grafico riportato in fig.3.6:

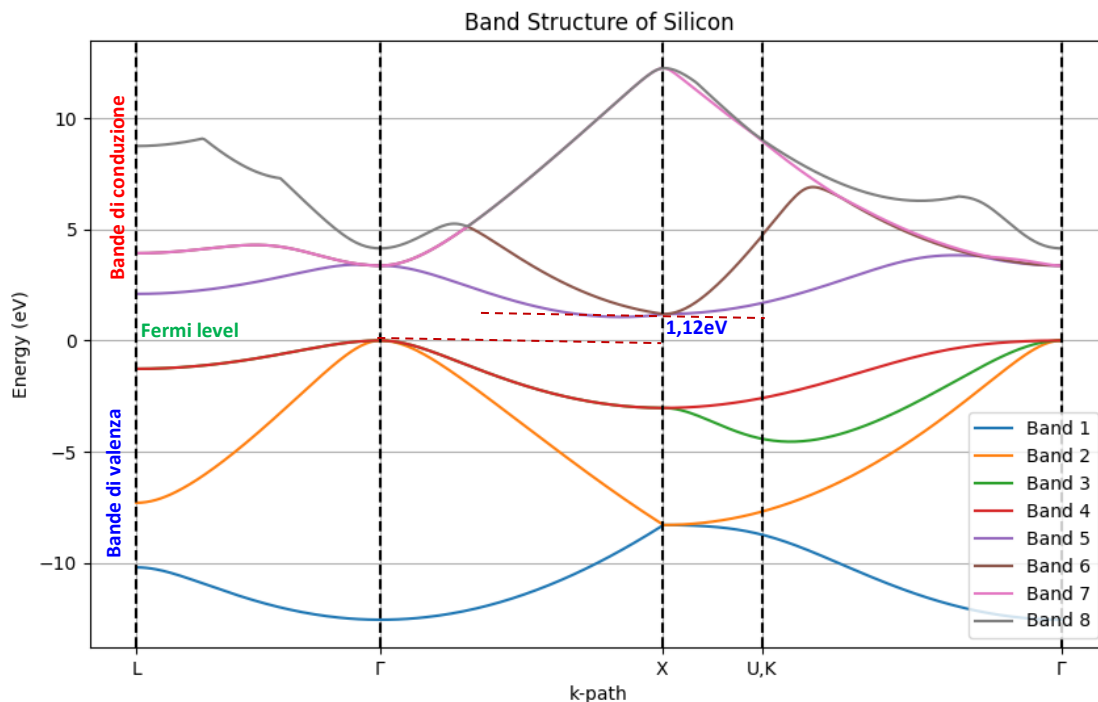


Figura 3.6: Grafico della struttura a bande del silicio ottenuto per esecuzione del codice

Come si può vedere dal grafico (fig.3.6) tra la banda di valenza più energetica e quella di conduzione meno energetica è presente una zona interdetta agli elettroni, il band gap, che ha un'ampiezza di 1,12 eV in accordo con quanto riportato in letteratura [7]. Lo stesso programma di simulazione è stato utilizzato per calcolare il band gap del composto Arseniuro di Gallio (GaAs), che ha una struttura cristallina FCC analoga a quella del

Silicio ma con gruppo di simmetria differente (O_h^7 -Fd3m per Si e T_d^2 -F43m per GaAs), per verificare l'utilizzo dello stesso modello anche per molecole più complesse. Il risultato della simulazione è riportato nel grafico sottostante (fig. 3.7):

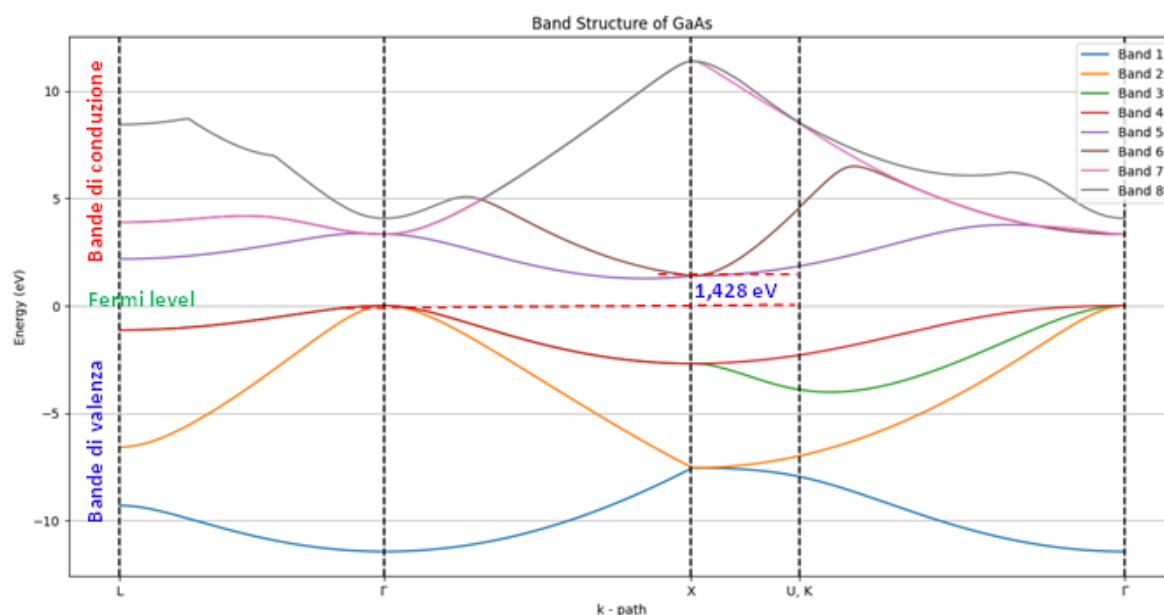


Figura 3.7: Grafico della struttura a bande del GaAs ottenuto dal modello di calcolo

Il valore del band gap ricavato per il GaAs è di 1,428 eV in linea con il valore di 1,424 eV riportato in letteratura mostrando come il codice generato è applicabile a diversi tipi di materiali.

4 Conclusioni

Nel secondo anno dell'attività di ricerca prevista nella LA 4.8 del WP4 MI-IEMAP, si è studiato e formulato un modello teorico che consente di calcolare il diagramma a bande dei materiali/composti utilizzati per la realizzazione di celle fotovoltaiche in InGaP su Silicio. Questo modello è stato codificato in Python (vers.3.9) ed è in grado di risolvere il complesso set di equazioni previsto per il modello equipotenziale al fine di ottenere il diagramma a bande del materiale preso in esame.

Il software è stato testato utilizzando il Silicio (Si) come materiale test poiché è presente molta letteratura relativa al Si e quindi facilmente confrontabile con i risultati ottenuti dal modello di calcolo.

Infine, lo stesso modello di calcolo è stato applicato al composto binario Arseniuro di Gallio (GaAs) per verificarne l'uso anche per materiali più complessi rispetto al singolo elemento.

5 Appendice: Codice Python modello di calcolo “Pseudo potenziale”

```

1 import numpy as np
2 import matplotlib.pyplot as plt
3 from tqdm import tqdm
4 import scipy . constants as const
5 a = 5.431e -10
6
7
8 tau = (1 / 8) * np. ones (3)
9
10
11
12 basis = np. array (
13 [[ -1 , 1 , 1], [1, -1, 1], [1, 1, -1]]
14 )
15
16
17 J_to_eV = 6.2415 e18
18 Ry_to_eV = 13.6057039763
22 def V_ps (G):
23
24 if np. isclose (np. dot (G, G), 3, atol =1e -5):
25 return -0.2241 * Ry_to_eV
26 elif np. isclose (np. dot (G, G), 8, atol =1e -5):
27 return 0.0551 * Ry_to_eV
28 elif np. isclose (np. dot (G, G), 11, atol =1e -5):
29 return 0.0724 * Ry_to_eV
30 else:
31 return 0
34 def V_ps_TOT (G):
35
36 S = np.cos (2 * np.pi * np. dot (G, tau))
37 V = V_ps (G) * S
38 return V
41 def T(G, k):
42
43 T_const = const . hbar **2 / (2 * const .m_e)
44 T = (
45 T_const * (np. linalg . norm (k + G) * (2 * np.pi / a))
46 ** 2 * J_to_eV
47 )
48 return T
50 def index_generator (m, states ):
51
52 n = ( states **3) // 2
53 s = m + n
54 floor = states // 2
55 h = s // states **2 - floor
56 k = s % states **2 // states - floor
57 l = s % states - floor
58 return h, k, l
60
61 def vector_matrix ( states , basis ):
62
63 n = states **3
64
65
66 G_matrix = np. zeros ( shape =(n, n), dtype = object )
67
68 for i in range (n):
69
70 G_matrix [i][i] += index_generator (i - n // 2, states )
71 @ basis
72
73 G_matrix [i][j] += index_generator (i - j, states )
74 @ basis
75 return G_matrix
77 def H_fill ( G_matrix , k):
78

```

```

79
80 l = np. shape ( G_matrix ) [0]
81
82
83 H = np. zeros ((l, l), dtype =np. float64 )
84
85
86 for i in range (l):
87 for j in range (l):
88
89 if i == j:
90
91 H[i][i] = T( G_matrix [i][i], k)
92 else :
93
94 H[i][j] = V_ps_TOT ( G_matrix [i][j])
95
96 return H
99 if __name__ == " __main__ ":
100
101
102 L = np. array ([1 / 2, 1 / 2, 1 / 2])
103 Gamma = np. array ([0 , 0, 0])
104 X = np. array ([0 , 0, 1])
105 U = np. array ([1 / 4, 1 / 4, 1])
106 K = np. array ([3 / 4, 3 / 4, 0])
107
108
109 k_path = np. concatenate (
110 [
111 np. linspace (L, Gamma , 100 , endpoint = False ),
112 np. linspace (Gamma , X, 116 , endpoint = False ),
113 np. linspace (X, U, 41, endpoint = False ),
114 np. linspace (K, Gamma , 123) ,
115 ]
116 )
117
118 G = vector_matrix (7, basis = basis )
119
120
121 E = []
122 for k in tqdm ( k_path , desc =" Calculating energy
eigenvalues "): # P r o g r e s s bar
123 e = np. linalg . eigvalsh (
124 H_fill (G, k)
125 )
126 E. append (e)
127
128
129 E_F = max (np. array (E).T [3])
130 E -= E_F
131
132
133 plt . figure ( figsize =(10 , 6))
134 for i, band in enumerate (np. array (E).T [:8]) :
135 plt . plot (np. linspace (0, 1, len ( k_path )), band , label =
f" Band {i+1}")
136
137
138 high_symmetry_points = [0, 100 , 216 , 257 , 380]
139 labels = ["L", " Γ ", "X", "U,K", " Γ "]
140
141 for point in high_symmetry_points :
142 plt . axvline (x= point / len ( k_path ), color ="k",
linestyle ="--")
143 plt . xticks ([ point / len( k_path ) for point in
high_symmetry_points ], labels )
144
145 plt . xlabel ("k- path ")
146 plt . ylabel (" Energy (eV)")

```

```
147 plt . title (" Band Structure of Silicon ")
148 plt . legend ()
149 plt . grid ( True )
150
151 plt . savefig (" BandStructure .png")
152 plt . show ()
```

6 Bibliografia

- [1] The Editors of Encyclopaedia, *band theory* Encyclopedia Britannica, Apr. 2021
- [2] J. Thijssen, *Computational Physics*, 2a ed. (Cambridge University Press, 2007)
- [3] M. Tinkham, *Group Theory and Quantum Mechanics*, Dover Books on Chemistry (Dover Publications, 2012)
- [4] J. M. Carlsson, *Pseudopotentials: from Ultrahard to Ultrasoft*
- [5] M. L. Cohen e T. K. Bergstresser, *Band Structures and Pseudopotential Form Factors for Fourteen Semiconductors of the Diamond and Zinc-blende Structures*, Physical Review 141, 789-796 (1966)
- [6] F. Giustino, *Materials Modelling Using Density Functional Theory: Properties and Predictions* (Oxford University Press, 2014).
- [7] W. M. Medlar, *Pseudopotential-Derived Band Structure of Silicon*