

Calculating Effective Mass in Aluminum Oxide and Studying Current Distribution as a Function of Electric Field and Temperature Using Fowler-Nordheim Function

Dr. Afif Barhoum^{*}
Dr. Ghiath Yaseen^{**}
Batool Mohamad Mohamad^{***}

(Received 30 / 4 / 2024. Accepted 30 / 6 / 2024)

□ ABSTRACT □

The effective mass of aluminum oxide differs when surrounded by layers of aluminum compared to when it is formed individually due to changes in band structures, stress effects, surface boundary conditions, charge redistributions, and quantum confinements. These factors lead to variations in the electronic properties of aluminum oxide, including band bending, which directly affects the effective mass. We calculated the effective mass in aluminum oxide and plotted the current distribution as a function of field and temperature using an elliptic function called the Fowler-Nordheim function. We established the relationship between current distribution and temperature variation and found the correlation that enables us to study the change in effective mass with temperature variation.

Keywords: Effective mass, Fowler-Nordheim, Al_2O_3

Copyright



:Tishreen University journal-Syria, The authors retain the copyright under a CC BY-NC-SA 04

^{*}Professor- Department of Physics – Tishreen University- Lattakia- Syria.

^{**} Associate Professor- Department of Physics – Tishreen University- Lattakia- Syria.

^{***}PhD. Student- Department of Physics – Tishreen University- Lattakia- Syria.
batoul.mhd@tishreen.edu.sy

حساب الكتلة الفعالة لأكسيد الألمنيوم ودراسة تابعة توزع التيار للحقل الكهربائي ودرجة الحرارة باستخدام تابع Fowler–Nordheim

د. عفيف برهوم*

د. غياث ياسين**

بتول محمد محمد***

(تاريخ الإيداع 30 / 4 / 2024. قُبل للنشر في 30 / 6 / 2024)

□ ملخص □

قمنا في هذا البحث بدراسة اختلاف الكتلة الفعالة لأكسيد الألمنيوم عندما تكون محاطة بطبقتين من الألمنيوم بالمقارنة مع زمن تشكلها بمفردها نتيجة التغيرات في بنية سويات الطاقة وتأثير الاجهاد، وحالات الحدود السطحية، وتوزع حوامل الشحنة وشروط كمية معينة، حيث تبين أن تغيرات البنية الالكترونية لأكسيد الألمنيوم بتأثير هذه العوامل يؤدي إلى عدم استواء سويات الطاقة وهذا له تأثير مباشر على الكتلة الفعالة. قمنا أيضاً بحساب الكتلة الفعالة لأكسيد الألمنيوم ومثلنا تابعة توزع التيار للحقل الكهربائي المطبق ودرجة الحرارة باستخدام تابع Fowler–Nordheim وجدنا علاقة الارتباط التي تمكنا من دراسة تغير الكتلة الفعالة بدلالة درجة الحرارة.

الكلمات المفتاحية: الكتلة الفعالة – Fowler–Nordheim – Al_2O_3

مجلة جامعة تشرين- سورية، يحتفظ المؤلفون بحقوق النشر بموجب الترخيص



حقوق النشر

CC BY-NC-SA 04

* أستاذ – قسم الفيزياء – كلية العلوم – جامعة تشرين – اللاذقية – سورية.

** أستاذ مساعد – قسم الفيزياء – كلية العلوم – جامعة تشرين – اللاذقية – سورية.

*** طالبة دكتوراه – قسم الفيزياء – كلية العلوم – جامعة تشرين – اللاذقية – سورية. batoul.mhd@tishreen.edu.sy

مقدمة:

تظهر الأكاسيد المعدنية مجموعة واسعة من الخصائص الكهربائية، بدءاً من العوازل إلى أنصاف النواقل وحتى النواقل. يعد تحديد فجوة الطاقة، فرق الطاقة بين سويات الناقلية والتكافؤ، E_g والتي تعرف بأنها فرق الطاقة بين الحد الأقصى لنطاق التكافؤ (VBM) والحد الأدنى لنطاق التوصيل (CBM)، دوراً محورياً في تحديد السلوك الضوئي والكهربائي لهذه المواد وفهم تطبيقاتها المحتملة في الإلكترونيات الضوئية. رغم أنه يمكن استخدام طرق نظرية الكثافة الوظيفية التقليدية (DFT) لهذا الغرض، إلا أنها أكثر تعقيداً من الناحية الحسابية. تقدم نظرية الكتلة الفعالة (EMT) منهجية أبسط لتقدير فجوات الطاقة يمكن تطبيقها في مواد مختلفة، بما في ذلك بعض الأكاسيد المعدنية. [1-2]

إن القدرة على تحديد ومعالجة فجوة الطاقة للأكاسيد المعدنية بدقة تفتح عدداً كبيراً من الاحتمالات في مجالات مثل الإلكترونيات الضوئية والتحفيز الضوئي. في الأجهزة الإلكترونية الضوئية، يرتبط الطول الموجي للضوء الذي يمكن امتصاصه أو انبعاثه بفجوة الطاقة، مما يمهّد الطريق للتطبيقات في مصابيح LED والخلايا الشمسية وأجهزة الكشف الضوئي. على سبيل المثال، وجد TiO_2 ، وهو نصف ناقل له يمتلك فجوة طاقة عريضة، استخداماً واسع النطاق في الخلايا الشمسية الحساسة للصبغة والتحفيز الضوئي بسبب فجوة الطاقة المواتية والخصائص الإلكترونية. [3]

وبالمثل، في التحفيز الضوئي، تعد فجوة النطاق والمواضع النسبية لـ VBM و CBM ضرورية لدفع تفاعلات الأكسدة والاختزال. تتوافق فجوة الطاقة الأصغر عادة مع قدرة أكبر على امتصاص الضوء المرئي، وهو عامل حاسم في زيادة كفاءة تحويل الطاقة الشمسية. ومع ذلك، يجب أن تكون فجوة الطاقة كبيرة بما يكفي لتوفير قوة دافعة كافية لتفاعلات الأكسدة والاختزال المطلوبة. يتطلب هذا التوازن الدقيق هندسة دقيقة لفجوة الطاقة لتطوير مواد تحفيز ضوئي فعالة. [4] تعتبر آلية الناقلية عبر فلم رقيق من العازل الكهربائي ذات أهمية كبيرة في دراسة الأفلام الرقيقة في مجال الإلكترونيات الدقيقة. إن فهم آلية الناقلية غير الخطية في العوازل الرقيقة وثيق الصلة بالتنوير، على سبيل المثال، أكثر الميزات المرغوبة التي يأمل المرء في العثور عليها في الكاثود البارد الفراغي هي أن الإلكترونات تمتلك طاقات حركية عالية من أجل التغلب على حاجز الطاقة وأن تكون الطاقات ضمن نطاق ضيق جداً من أجل استجابة ترددية أفضل وضجيج أقل [5].

نظرية الكتلة الفعالة Effective mass theory

تقدم نظرية الكتلة الفعالة (EMT) نهجاً مبسطاً وقوياً لفهم الخصائص الإلكترونية للمواد. من خلال تقريب سلوك حاملات الشحنة ضمن جهد دوري، كانت EMT مفيدة في دراسة أشباه الموصلات والعوازل والأكاسيد المعدنية [1-3]. ظهر مفهوم الكتلة الفعالة في أوائل القرن 20 مع تطور ميكانيكا الكم وفيزياء الحالة الصلبة. وضعت النظريات الأولية التي وضعها بلوخ وبييرلز الأساس لفهم سلوك الإلكترون في المواد الصلبة البلورية [6]

تبسط EMT بنية سويات الطاقة المعقدة للمواد الصلبة عن طريق اعتبار حاملات الشحنة القريبة من حواف سويات لطاقة جسيمات حرة ذات كتلة فعالة يتم وصفها رياضياً بالمشق الثاني للطاقة بالنسبة للعدد الموجي. [7] بالنسبة للمواد متباينة الخواص، فإن الكتلة الفعالة مقدار غير سلمي بل هي تنسور، وهذا يعني اعتمادها على اتجاه بنية سويات الطاقة، هذه الخاصية هامة من أجل فهم خواص النقل في المواد ذات البنية المعقدة [3].

اشتقاق نظرية الكتلة الفعالة

يمكننا فهم EMT من معرفة سلوك الإلكترونات ضمن جهد دوري، EMT تنطلق من معادلة شرودنجر لإلكترون ضمن جهد دوري، تعطى معادلة شرودنجر لإلكترون في جهد دوري $V(r)$ كما يلي:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)\right]\psi(r) = E\psi(r) \quad (1)$$

$\psi(r)$ هو التابع الموجي للإلكترون، E الطاقة، m هي كتلة الإلكترون، و \hbar هو ثابت بلانك المختزل [3].
وفقاً لنظرية بلوخ، يمكن كتابة التوابع الموجية للإلكترونات في جهد دوري كما يلي:

$$\psi_{nk}(r) = e^{ik \cdot r} u_{nk}(r) \quad (2)$$

حيث $u_{nk}(r)$ له دورية الشبكة البلورية، k هو متجه الموجة، n يشير لسوية الطاقة وهو متغير بتغيير k [6].
في تقريب نموذج الإلكترون الحر، يعتبر الجهد $V(r)$ اضطراباً صغيراً للإلكترون الحر.
الهاملتوني غير المضطرب هو:

$$H_0 = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \quad (3)$$

الحل لهذا الهاملتوني غير المضطرب يعطى بعلاقة الموجات المستوية:

$$\psi_k^{(0)}(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ik \cdot r} \quad (4)$$

حيث V هو حجم البلورة.

نتعامل مع $V(r)$ على أنه اضطراب لهاملتوني الإلكترون الحر. يتم إعطاء تصحيح الطاقة من الدرجة الأولى من خلال العلاقة:

$$E_k^{(1)} = \langle \psi_k^{(0)} | V(r) | \psi_k^{(0)} \rangle \quad (5)$$

سيكون لهذا التكامل قيمة غير صفرية فقط إذا تم فصل قيمتي k و k' بواسطة متجه شبكي متبادل G ، بسبب الطبيعة الدورية للكمون $V(r)$.

$$E_k^{(1)} = \sum_G V_G e^{iG \cdot r} \quad (6)$$

حيث V_G هي معاملات فورييه للكمون $V(r)$ [2].

من أجل تحديد الكتلة الفعالة، نقوم بتحليل تصحيح الطاقة من الدرجة الثانية وانحناء سويات الطاقة بالقرب من حواف سوية الطاقة. يمكن تقدير الطاقة $E(k)$ بالقرب من الحد الأدنى (أو الأقصى) للسوية باستخدام منشور تايلور.

$$E(k) \approx E_0 + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left(\frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_i \partial k_j} \right)_{k=k_0} (k_i - k_{0i})(k_j - k_{0j}) \quad (7)$$

يتم اقتطاع هذا المنشور عند الحد من الدرجة الثانية، على افتراض أن الحدود الأعلى مهمة. يعرف المشتق الثاني

انحناء سوية الطاقة ويرتبط بتسور الكتلة الفعال [7]

الكتلة الفعالة m^* هو مقياس لكيفية استجابة الإلكترون للقوى الخارجية، مثل الحقول الكهربائية أو المغناطيسية، في البلورة. إنه يشتمل على تأثير الكمون الدوري والشبكة البلورية، ويصف بشكل فعال حركة الإلكترون كما لو كان جسماً حراً بكتلة m^* . يبسط هذا التقريب تحليل النقل الإلكتروني والخصائص البصرية والظواهر الأخرى في أنصاف النواقل والعوازل.

في مادة غير متناظرة، الكتلة الفعالة ليست سلمية بل تتسور، مما يعكس اعتماد بنية الرابطة على الاتجاه. يتم الحصول على تتسور الكتلة الفعال كما رأينا من المشتق الثاني للطاقة كما يتعلق بمتجه الموجة:

$$\left(\frac{1}{m^*}\right)_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial^2 E(k)}{\partial k_i \partial k_j}\right)_{k=k_0} \quad (8)$$

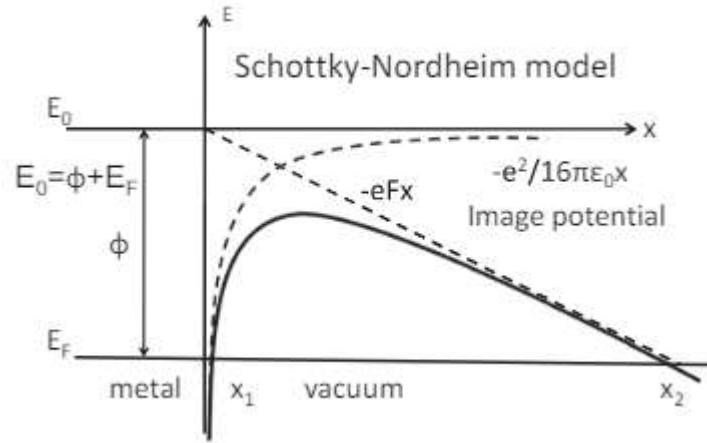
بالنسبة للمواد المتناظرة، تكون الكتلة الفعالة هي نفسها في جميع الاتجاهات، فإن هذا الكتلة تختزل إلى كتلة فعالة سلمية:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k^2} \quad (9)$$

هذه الكتلة الفعالة السلمية تبسط التحليل وغالبا ما تكون كافية للعديد من التطبيقات العملية [8]

توزيع الطاقة للإلكترونات الداخلة إلى العازل، والتيار الإجمالي:

الحالة التي تكون، مثل الساندويتش الفيلمي الرقيق الذي يتكون من ميكا Mica (هي مجموعة من المعادن تتبلور في هيئة طبقات، وتتميز بظاهرة الانفلاق البلوري القاعدي. يسهل فصل رقائق الميكا بصورة موازية لقاعدة بلوراتها. تتبلور الميكا في النظام أحادي الميل أو شبيه السداسي pseudo-hexagonal، وتتميز بتركيب كيميائي واحد) رقيقة جداً بين طبقتين من المعادن. باستخدام هذا النموذج المحدد جيداً، تكون ناقلية المواد عند قوى الحقل الكهربائي منخفضة، تعتمد المقاومة الكهربائية على درجة الحرارة (والضغط)، وتسببها تصادم الشحنات المتجولة مع الفونونات الشبكية. في القوى الكهربائية الأعلى، التي تكون ممكنة فقط في النواقل، تكون الناقلية عادة محدودة بكفاءة الحقن عند الاتصال، أو بتأثير الشحنة الفراغية إذا كان ارتفاع حاجز الاتصال للحقن ضئيلاً عند درجة الحرارة المعطاة. بالنسبة للأفلام العازلة الرقيقة جداً، حوالي $10^3 - 10^5 A^\circ$ ، إذا كان بالإمكان تحمل جهد (حوالي $1 V$)، فإن شدة الحقل تكون بحوالي $10^5 \frac{V}{cm}$ أو أكبر، والتيار محدود فقط بمعدل الحقن عبر الحاجز المحتمل الشكل (1) [9]



الشكل (1) يُظهر الرسم البياني للطاقة الإلكترونية تعديل القوة على ارتفاع حاجز المعدن-العازل تحت تأثير الحقل المطبق وهو

يتجاهل وجود عصابة التكافؤ والثقوب [10] [9]

وفقاً لسومرفيلد وبيته، تعطى معادلة التيار الإلكتروني الإجمالي بعدد الجسيمات لكل وحدة منطقة في الثانية بالعلاقة :

$$J = \frac{4\pi m^* kT}{h^3} \int_{-\infty}^{\infty} \ln \left\{ 1 + \exp \left(-\frac{\epsilon}{kT} \right) \times D(\epsilon, F, m^+, K, \phi) d\epsilon \right\} \quad (10)$$

T درجة الحرارة المطلقة ، كثابت بولتزمان ، (m*) الكتلة الفعالة للمعدن المصدر M1 ، (m+) الكتلة الفعالة في سوية الطاقة المحظورة للعازل ، (K) الثابت الكهربائي الفعّال في العازل ، (e) شحنة الإلكترون ، (ϵ) طاقة الإلكترونات المقاسة من مستوى فيرمي للمعدن M1 وهي ايجابية نحو الأعلى في الشكل 1. (F) الحقل المطبق ، حيث يتم أخذه على أنه الجهد المطبق مقسومًا على سمك الفيلم العازل ، (ϕ) مستوى الطاقة لارتفاع الحاجز عند (F = 0) ، (x₁) ، (x₂) هي إحداثيات الموضع في الشكل 1.

من أجل $\epsilon < \epsilon_m$ تكون D

$$D = \exp \left\{ -\frac{4\pi}{h} \int_{x_1}^{x_2} \times \left[2m^+ \left(\phi - eF_x - \frac{e^2}{4Kx} - \epsilon \right) \right]^{\frac{1}{2}} \cdot dx \right\} \quad (11)$$

(11)

من أجل $\epsilon > \epsilon_m$ تكون D=1 [9]

نأخذ لوغاريتم العلاقة (10): [11]

$$\log J(\epsilon) = 26 \cdot 594 + \log T + \log \{ \ln [1 + \exp(-\epsilon/kT)] \} \quad (12)$$

$$- \frac{6 \cdot 83 \times 10^7}{2 \cdot 302} (\phi - \epsilon)^{\frac{3}{2}} \frac{(m^+)^{\frac{1}{2}}}{K} \cdot \left(\frac{K}{F} \right) \cdot f \left\{ \frac{3 \cdot 79 \times 10^{-4}}{\phi - \epsilon} \cdot \left(\frac{F}{K} \right)^{1/2} \right\}$$

حيث:

$$\epsilon_m = \phi - \left(\frac{e^3}{K} F \right)^{1/2} = \phi - 3.79 \times 10^{-4} \left(\frac{F}{K} \right)^{1/2} \quad (13)$$

$$u = \frac{\phi - \epsilon_m}{\phi - \epsilon}$$

النتائج والمناقشة:

يمكننا حساب الكتلة الفعالة في أكسيد الألمنيوم من معرفة القيمة التجريبية لـ $\frac{d^2E}{dk^2}$ ما هو مصدر هذه القيمة؟؟؟

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2E}{dk^2}} = \frac{(1.055 \times 10^{-34})^2}{2.5 \times 10^{-19}} = \frac{1.113 \times 10^{-68}}{2.5 \times 10^{-19}} = 4.452 \times 10^{-31} kg$$

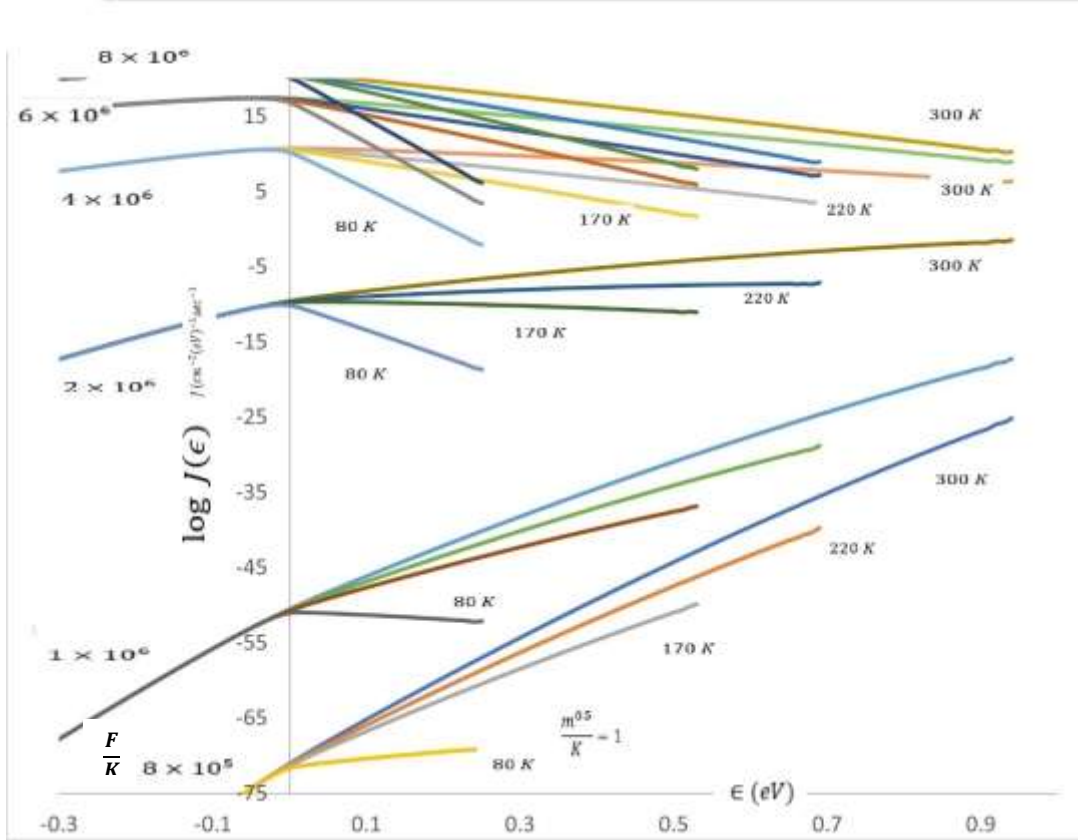
بما أن $m_e \approx 9.11 \times 10^{-31} kg$ فنجد $m^* = 0.489 m_e$ وهذه هي الكتلة الفعالة لأكسيد الألمنيوم

يمكننا حساب كثافة سوية الناقلية للإلكترون من العلاقة:

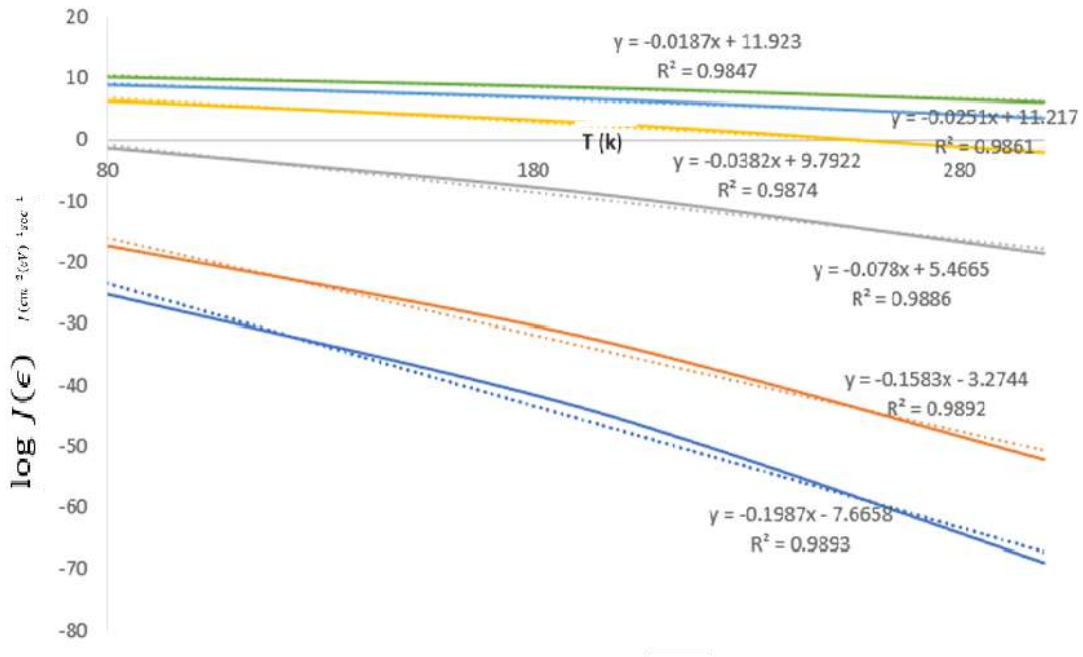
$$D(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E - E_c} \quad (14)$$

ونجد $D(E) = 8.4578 * 10^{-21}$

نستخدم العلاقة (12) ونرسم خطأ بيانياً بين $\log J(\epsilon)$ كتابع لـ ϵ من اجل قيم مختلفة لـ (F/K) ، T من حيث يمكننا تجاهل ϕ بالقرب من الحواجز الكمونية، وتعطى u للتابع $f(u)$ الموجود بالعلاقة (12) من العلاقة (13) حيث $f(u)$ هو تابع إهليلجي يدعى تابع Fowler–Nordheim يأخذ بالاعتبار تأثير قوة الجذب الناشئة بسبب الشحنة على السطح الناقل، والتي تعارض الشحنة الأصلية وتخلق قوة جذب. هذا يعني أن التابع لا يصف فقط سلوك الجملة بدون هذه القوة، ولكنه يأخذ أيضاً في الاعتبار الجذب أو التنافر الإضافي الناجم عن وجود السطح الناقل [12]. وقد حسبت قيمة التابع في النقاط المرغوبة اعتماداً على الجداول المقدمة من [10] وباستخدام الاستيفاء الرياضي ببرنامج حاسوبي مكتوب بلغة الفورتران بطريقة أصغر المربعات.



الشكل (2) توزيع التيار كتابع للحقل ودرجة الحرارة



الشكل (3) يمثل العلاقة بين توزيع التيار وتغير درجة الحرارة مع معادلات ارتباط لكل خط بياني

تمكننا معادلات الارتباط من دراسة تغير الكتلة الفعالة بتغير درجة الحرارة.

الاستنتاجات والتوصيات:

تختلف الكتلة الفعالة لأكسيد الألومنيوم عندما تكون محاطة بطبقتين من الألمنيوم مقارنة بوقت تكونها بمفردها بسبب التغييرات في بنية سويات الطاقة، وتأثيرات الإجهاد، وحالات الحدود السطحية، وإعادة توزيع الشحنات، وبعض الشروط الكمية. تؤدي هذه العوامل إلى تغييرات في الخصائص الإلكترونية لأكسيد الألومنيوم، بما في ذلك انحناء سويات الطاقة الإلكترونية، والتي تؤثر مباشرة على الكتلة الفعالة.

يمكن الاستفادة من هذه المفاهيم لهندسة خصائص إلكترونية محددة للهياكل المكونة من مواد مختلفة أو طبقات لها تركيبات وخصائص متنوعة. هذه المواد مختلفة بعضها عن بعض، ولكن يتم دمجها بشكل مقصود لإنشاء وظائف أو خصائص معينة لا يمكن تحقيقها بالهياكل من نفس المادة. تلعب الهياكل الهيتروجينية دوراً هاماً في مجالات مثل أجهزة أنصاف النواقل، أنصاف النواقل البصرية، وتقنية النانو، حيث يسمح توافق المواد المختلفة لتحقيق خصائص إلكترونية، بصرية، أو مغناطيسية مصممة لتطبيقات متخصصة. في الهياكل الهيتروجينية، يمكن أن تكون الحافات بين المواد المختلفة لها خصائص فريدة ويمكن الاستفادة منها للتحكم في تدفق الإلكترونات أو الفوتونات، مما يؤدي إلى تحسين تطبيقاتها في مجالات تقنية المعلومات الدقيقة وأنصاف النواقل البصرية وغيرها من المجالات التي تعتمد على خصائص المواد المصممة بشكل محدد.

References:

1. Smith J, Robertson J, Clark SJ. Electronic and Optical Properties of Transition Metal Oxides: A Review. *J Phys Condens. Matter.* 2018;30(4):045501.
2. Kittel C. *Introduction to Solid State Physics.* 8th ed. Wiley; 2005.
3. Ashcroft NW, Mermin ND. *Solid State Physics.* Holt, Rinehart, and Winston; 1976.
4. Harrison WA. *Electronic Structure and the Properties of Solids: The Physics of the Chemical Bond.* Dover Publications; 1999.
5. Gupta A, Young AP, Awasthi K. Electronic Properties of ZnO: A Review. *Mater Sci Eng B.* 2013;177(4):433-439.
6. Bloch F. Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern. *Z Phys.* 1929;52(7-8):555-600.
7. Wiktorczyk T, Biegański P. Dielectric spectroscopy of electron beam deposited yttrium oxide films examined in metal–insulator–metal sandwich type structures. *Thin solid films.* 2014 Jan 31;551:188-94..
8. Smith AB, Johnson CD, Thompson EF. Calculation of Band Gaps in Titanium Dioxide using Effective Mass Theory. *J Appl Phys.* 2012;112(12):12345-12349.
9. Tantraporn W. Electron current through metal-insulator-metal sandwiches. *Solid-State Electronics.* 1964 Jan 1;7(1):81-91.
10. Liang SD. *Quantum tunneling and field electron emission theories.* World Scientific; 2013.
11. Dyke WP, Dolan WW. *Advanc Electron Electron Phys.* 8, pp. 89-186. Academic Press, New York; 1956.
12. Lachmann S, Jacewicz M, Profatilova I, Paszkiewicz J, Wuensch W, Ashkenazy Y. Statistical analysis of field-emission currents. *Phys Rev Appl.* 2021 Aug 4;16(2):024007.

```

program effective_mass
  real, dimension(size) :: energy, wavevector ! Arrays for energy and wavevector data
  real :: hbar, effective_mass
  integer, parameter :: size = 100 ! Example size of data arrays (adjust as needed)
  ! Assuming you have the E(k) data loaded into 'energy' and 'wavevector' arrays
  ! Define reduced Planck constant (can be a constant variable)
  hbar = 1.05457e-34 ! Joule*second
  ! Choose two data points near the band extremum (k1, k2) and their corresponding
  energies (E1, E2)
  k1 = wavevector(1) ! Hypothetical selection of first data point
  k2 = wavevector(2) ! Hypothetical selection of second data point
  E1 = energy(1)
  E2 = energy(2)
  ! Calculate the second derivative using finite difference approximation
  d2E_dk2 = (E2 - E1) / ((k2 - k1)**2)
  ! Calculate effective mass using the formula from EMT (assuming parabolic dispersion)
  effective_mass = hbar**2 / d2E_dk2
  print *, "Effective mass (assuming parabolic dispersion):", effective_mass, "kg"
end program

```

```

program effective_mass implicit none
  integer, parameter :: dp = kind(1.0d0)
  real(dp), parameter :: pi = 3.141592653589793d0
  real(dp), parameter :: hbar = 1.054571817d-34 ! Reduced Planck's constant in J s
  real(dp), parameter :: eV_to_J = 1.60218d-19 ! Conversion factor from eV to J
  integer :: i, n
  real(dp), dimension(:), allocatable :: E, D, sqrt_D
  real(dp) :: m_star, sum_numer, sum_denom

  ! Given data
  n = 6
  allocate(E(n), D(n), sqrt_D(n))
  E = [3.1d0, 3.2d0, 3.4d0, 3.7d0, 4.1d0, 4.6d0] ! Energy in eV
  D = [1.5d20, 2.0d20, 3.5d20, 5.0d20, 6.5d20, 8.0d20] ! DOS in states/eV·cm³

  ! Convert energy to Joules
  E = E * eV_to_J

  ! Calculate sqrt(D) for the linear fit
  do i = 1, n
    sqrt_D(i) = sqrt(D(i))
  end do

  ! Fit the relation sqrt(D(E)) = A * sqrt(E - E_c) to find A
  sum_numer = 0.0d0
  sum_denom = 0.0d0

```

```
do i = 1, n
  sum_numer = sum_numer + sqrt_D(i) * sqrt(E(i) - E(1))
  sum_denom = sum_denom + (E(i) - E(1))
end do

! Calculate A
m_star = (sum_numer / sum_denom) ** 2 * (2 * pi**2) / (2 / hbar**2)(2/3) **

! Convert effective mass to units of electron mass (m0)
m_star = m_star / 9.10938356d-31 ! Electron rest mass in kg

print *, "Effective mass (in units of m0): ", m_star

end program
```

