

Расчет эффективной массы электронов и дырок монокристалла TlGaTe_2 А.П. Абдуллаев,¹ Д.М. Кафарова^{1,*}¹ *Азербайджанский архитектурно-строительный университет, кафедра физики и химии
Азербайджан, Баку, ул. Айна Султановой, 11*

(Поступила в редакцию 23.01.2024; после доработки 22.02.2024; подписана в печать 24.02.2024)

На основе зонной структуры соединения TlGaTe_2 были определены экстремумы валентной зоны и зоны проводимости и рассчитан тензор компонентов обратной эффективной массы электронов и дырок.

PACS: 71.18.+y УДК: 538.915

Ключевые слова: монокристалл, атомные координаты, эффективная масса, дырки, псевдопотенциал.

DOI: [10.55959/MSU0579-9392.79.2420502](https://doi.org/10.55959/MSU0579-9392.79.2420502)

ВВЕДЕНИЕ

TlGaTe_2 являются представителями класса тройных соединений типа $\text{A}_3\text{B}_3\text{C}_{26}$ (где А–Тl; В–Ga, In; С–S, Se, Te), кристаллизующихся в тетрагональной сингонии (структурный тип TlSe, пространственная группа симметрии D_{4h}^{18} ($I4/mcm$)).

Цепочечная структура монокристалла TlGaTe_2 образована в основном атомами галлия и теллура (рис. 1). В этой цепочке каждый атом галлия тетраэдрически окружен атомами теллура. Цепочки расположены вдоль тетрагональной оси c . Атомы галлия локализованы между цепочками и октаэдрически окружены с атомами теллура [1].

Кристаллическая решетка TlGaTe_2 является объемноцентрированной, тетрагональной. Базис D_{4h} относительно голоэдрики не инвариантен и кристалл является не симморфным.

Эти соединения являются полупроводниками и их полупроводниковые свойства объясняются на основе модели химической связи Музера–Пирсона [2].

Электронные свойства TlGaTe_2 изучены недостаточно. Электропроводность и вольт-амперные характеристики (ВАХ) кристаллов TlGaTe_2 исследовались в работе [3], при этом из электрических измерений для ширины запрещенной зоны было получено значение 1.2 эВ. При исследовании нелинейной области ВАХ наблюдали вольтовые осцилляции, которые продолжались неопределенно долго. Частота осцилляций была в пределах нескольких герц, имела хаотический характер и менялась со временем.

Ширины запрещенной зоны TlGaTe_2 , определенные в работах [4, 5] с помощью электрических измерений, сильно различаются: 1.2 [5] и 2.3 эВ [4].

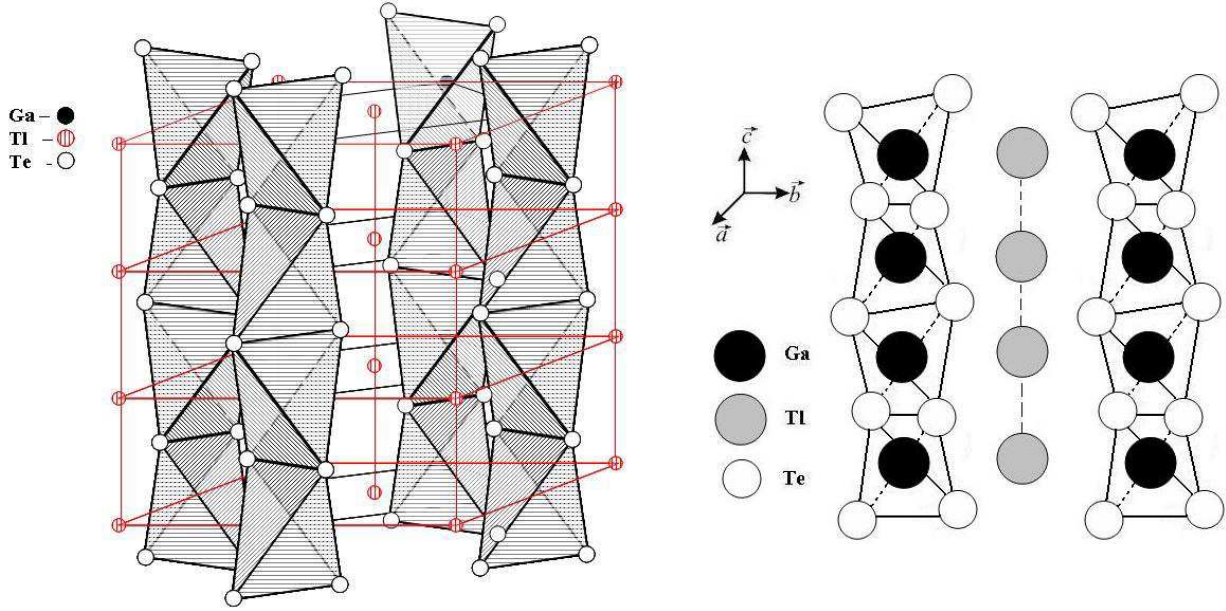
Зонная структура TlGaTe_2 впервые рассчитана в [6] методом эмпирического псевдопотенциала. Формфакторы атомных псевдопотенциалов были вычислены с использованием аналитического выражения, предложенного в работе [7]. Расчеты пока-

зали, что потолок валентной зоны расположен в высокосимметричной точке T ($0, 2\pi/a, 0$) на границе зоны Бриллюэна (ЗБ), а дно зоны проводимости — на линии D ($\pi/a, \pi/a, k$) также на границе ЗБ. Авторы пришли к выводу, что для соединения TlGaTe_2 прямой переход является запрещенным согласно правилам отбора.

В работе [8] были исследованы структурные и электронные свойства сплавов $\text{TlGa}_{1-x}\text{In}_x\text{Te}_2$ с использованием метода полного потенциала линейаризованных присоединенных плоских волн (FP-LAPW) в рамках теории функционала плотности (DFT). Авторы показали, что энергия запрещенной зоны зависит от индекса состава сплава x . Расчет энергии запрещенной зоны показал, что все исследованные сплавы являются узкозонными полупроводниками. В [9] методом уравнений Бете–Солпитера, были изучены электронные и оптические свойства дихалькогенида TlGaTe_2 , где, используя гибридную функциональную модель, показали, что, хотя TlGaTe_2 имеет непрямую запрещенную зону 1.109 эВ, он также демонстрирует фундаментальную прямую запрещенную зону 1.129 эВ. В работе [10] нами проведен расчет зонной структуры соединения TlGaTe_2 методом псевдопотенциала и определены происхождения валентной зоны и зоны проводимости. Потолок валентной зоны находился в высокосимметричной точке T на поверхности ЗБ и соответствует неприводимому представлению T_3 , а дно зоны проводимости на линии D посередине между точками P ($\pi/a, \pi/a, \pi/c$) и N ($\pi/a, \pi/a, 0$) отвечает неприводимому представлению $D1$. Наименьший по энергии прямой переход осуществляется между состояниями T_3 и T_4 , который запрещен в дипольном приближении. Ширина запрещенной зоны 0.86 эВ получена из расчетов.

Нелокальные ионные псевдопотенциалы в конфигурационном пространстве строились по схеме предложенной в работе [11]. При расчете зонной структуры данного соединения экранирование ионного заряда, а также обменно-корреляционные эффекты учитывались в рамках диэлектрического формализма по модели Хаббарда–Шэма с некото-

* E-mail: dgafarova14@gmail.com


 Рис. 1. Структура кристалла TlGaTe_2

рым выборочным распределением заряда вокруг каждого иона. Использовано около 1800 плоских волн в разложении волновой функции. При этом максимальная кинетическая энергия учитываемых плоских волн составляло 16 Rydb. Наши результаты о происхождении зон согласуются с данными работы [3], где изучены фотоэмиссионные спектры. Также методом присоединенных плоских волн рассчитана зонная структура TlGaTe_2 , но в этой зонной картине имеет место перекрытие валентной зоны с зоной проводимости, которое противоречит экспериментальным фактам.

Теоретический вывод работы [6] о том, что в верхней части валентной зоны полупроводникового соединения TlGaTe_2 имеется изолированная группа из двух зон, в настоящей работе, а также в работе [3], не подтвержден. По-видимому, это связано с некорректным учетом экранирования псевдопотенциала присущего эмпирическому методу. Зонная структура монокристалла TlGaTe_2 рассчитанная методом псевдопотенциала [10] позволяет рассчитать некоторые параметры, в том числе и эффективную массу электронов и дырок, что и является целью настоящей работы.

1. МЕТОДЫ И РАСЧЕТЫ

Параметры решетки TlGaTe_2 : $a = 8.429 \text{ \AA}$, $c = 6.865 \text{ \AA}$, в атомных единицах $a = 15.935$, $c = 12.978$. Атомные координаты взяты из [12]. Базисные векторы прямой решетки (в атомных единицах) равны $a_1(-7.95; 7.95; 6.476)$, $a_2(7.95; -7.95; 6.476)$, $a_3(7.95; 7.95; -6.476)$.

Базисные векторы обратной решетки (в декартовых координатах, в атомных единицах) представляют следующим образом: $b_1(0; 0.394; 0.484)$,

$b_2(0.394; 0; 0.484)$, $b_3(0.394; 0.394; 0)$

На основе зонной структуры этого соединения были определены экстремумы валентной зоны и зоны проводимости и рассчитан тензор компонентов обратной эффективной массы электронов и дырок. Расчеты проводились с использованием следующего выражения [13]:

$$\left[\frac{m_0}{m^*} \right]_{ij} = \delta_{ij} + \frac{2}{m_0} \sum_{n' \neq n} \frac{\langle n, \mathbf{k}_0 | \mathbf{P}_i | n', \mathbf{k}_0 \rangle \langle n', \mathbf{k}_0 | \mathbf{P}_j | n, \mathbf{k}_0 \rangle}{E_n(\mathbf{k}_0) - E_{n'}(\mathbf{k}_0)}.$$

Здесь m_0 — масса электрона; δ_{ij} — символ Кронекера; $\langle n, \mathbf{k}_0 | \mathbf{P}_i | n', \mathbf{k}_0 \rangle$ — матричный элемент оператора импульса $\mathbf{P}_i = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}$, рассчитанный в точке экстремума \mathbf{k}_0 ; n — нумерует данную зону; n' — другие зоны:

$$\langle n, \mathbf{k}_0 | \mathbf{P}_i | n', \mathbf{k}_0 \rangle = \int \psi_{n\mathbf{k}_0}^*(\mathbf{r}) \mathbf{P}_i \psi_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}.$$

Интегрирование проводится по объему элементарной ячейки. Энергетический спектр электрона (дырки) $E_n(\mathbf{k}_0)$ и соответствующая волновая функция $\psi_n \mathbf{k}(\mathbf{r})$ в точке экстремума определяется из псевдодолгового уравнения

$$\left[\frac{\mathbf{P}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) \right] \psi_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}_0) \psi_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}).$$

2. ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Было выявлено, что минимум в зоне проводимости расположен в точке $\mathbf{k}_0 = 0.125\mathbf{b}_1 + 0.125\mathbf{b}_2 + 0.375\mathbf{b}_3$; волновая функция состояния соответствует неприводимому

представлению D_1 . Компоненты тензора обратной эффективной массы электрона рассчитаны с точностью до $0.01m_0$.

$$\left(\frac{m_0}{m_e^*}\right) = \begin{pmatrix} 3.09 & 0 & 0 \\ 0 & 3.09 & 0 \\ 0 & 0 & 4.59 \end{pmatrix}.$$

Основной максимум валентной зоны расположен в точке $\mathbf{k}_0 = 0.5\mathbf{b}_1 - 0.5\mathbf{b}_2 + 0.5\mathbf{b}_3$; ($\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2, \mathbf{b}_3$) — базисные трансляции обратной решетки; волновая функция состояния соответствует неприводимому представлению T_3 .

Тензорные компоненты обратной эффективной массы дырок

$$\left(\frac{m_0}{m_h^*}\right) = \begin{pmatrix} -2.31 & 0 & 0 \\ 0 & -2.31 & 0 \\ 0 & 0 & -0.11 \end{pmatrix}.$$

Эффективные массы дырок обладают сильной

анизотропией т.е.

$$\left(\frac{m_{h,нар}^*}{m_{h,пер}^*}\right) = 21,$$

где $m_{h,нар}^*$ и $m_{h,пер}^*$ — соответственно эффективные массы дырок в направлении параллельной и перпендикулярной тетрагональной оси c .

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выявлено, что на основе зонной структуры кристаллов $TlGaTe_2$ эффективная масса дырок монокристалла $TlGaTe_2$ обладает сильной анизотропией. Тензоры обратной эффективной массы для дырок и электронов имеют диагональный вид, т.е. вокруг экстремумов изоэнергетические поверхности являются эллипсоидами вращения.

-
- [1] Abdullayev A.P., Rzayev R.M., Naghiyev T.G. et al. // *International Journal of Modern Physics B*. **37**, N 28. 2350248. (2023).
- [2] Mooser E., Pearson W.B. // *J. Electronics*. **1**, N 6. 629 (1956).
- [3] Okazaki K., Tanaka K., Matsuno J. et al. // *Phys. Rev. B*. **64**. 045210. (2001).
- [4] Guseinov G.D., Abdullaev G.B., Bidzinova S.M. et al. // *Phys. Lett. A* **33**, N 27. 421 (1970).
- [5] Guseinov G.D., Ramazanov A.M., Kerimova E.M., Ismailov H.Z. // *Phys. Stat. Sol.* **22**, 2. 117 (1967).
- [6] Гашишмаде Ф.М., Оруджев Г.С. // Доклад АН Азерб. ССР. **36**, № 12. 18 (1980).
- [7] Константинов О.В., Насибуллаев Ш.К., Панахов М.М. // *ФТП*. **11**, № 5. 881 (1977).
- [8] Yücel I., Zekmak S. // *Suleyman Demirel Univ. J. Sci.* N 12. 30 (2017).
- [9] Murugesan Rasukkannu, Dhayalan Velauthapillai, Ponniah Vajeeston. // *Materials* **12**. 2667. (2019).
- [10] Godzhayev E.M., Orudzhev G.S., Gafarova D.M. // *Physics of the solid state*. **46**. N 5. (2004).
- [11] Bachelet G.B., Hamann D.R., Schluter M. // *Phys. Rev.* **B26**, N 8. 4199 (1982).
- [12] Müller D., Eulenberger G., Hahn H. // *Z. anorg. allg. chem.* **398**, N 2. 207 (1973).
- [13] Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников. М., 1978.

Calculation of the effective mass of electrons and holes of $TlGaTe_2$ compound

A.P. Abdullaev, D.M. Gafarova^a

¹ *Azerbaijan Architecture and Construction University, Department of Physics and Chemistry
Azerbaijan, Baku, st. Ayna Sultanova 11
E-mail: ^adgafarova14@gmail.com*

Based on the band structure of $TlGaTe_2$ compound, the extrema of the valence and conduction bands were determined and the tensor of the components of the inverse effective mass of electrons and holes was calculated.

PACS: 71.18.+y.

Keywords: single crystal, atomic coordinates, effective mass, holes, pseudopotential.

Received 23 January 2023.

English version: *Moscow University Physics Bulletin*. 2024. **79**, No. 2. Pp. .

Сведения об авторах

- Абдуллаев Адиль Полад — доктор физ.-мат. наук, профессор, зав. кафедрой; тел.: (+994) 5383504, e-mail: adilabdullayev@rambler.ru.
- Кафарова Диляра Микаил — канд. физ.-мат. наук, доцент; тел.: (+994) 773260646, e-mail: dgafarova14@gmail.com.