

УДК 535.34

Н.К. Крамар<sup>2</sup>, В.М. Крамар<sup>1</sup>, Б.М. Ніцович<sup>1</sup>  
**Розрахунок ефективних мас електронів і дірок у шаруватому напівпровідниковому кристалі PbI<sub>2</sub>**

<sup>1</sup>Чернівецький Національний університет ім. Ю. Федьковича,  
вул. Коцюбинського 2, м. Чернівці, 58001, Україна

<sup>2</sup>Буковинський фінансово-економічний інститут, вул. Штерна 1, м. Чернівці, 58012, Україна

Методом псевдопотенціалу розраховано зонну структуру енергетичного спектра електронів у шаруватому кристалі PbI<sub>2</sub> (2H-політип). Розрахунок проведено на основі нелокального, що зберігає норму, “з перших принципів” псевдопотенціалу Башеле-Гамана-Шлютера з урахуванням ефектів екранування і кореляції. На основі одержаного закону дисперсії обчислено ефективні маси електронів і дірок. Встановлено істотну анізотропію ефективних мас електронів, що узгоджується з результатами експериментальних вимірювань.

**Ключові слова:** шаруватий кристал, напівпровідник, йодид свинцю, енергетичний спектр, ефективна маса.

*Стаття поступила до редакції 7.05.2001; прийнята до друку 11.05.2001*

## I. Вступ

Одним із пріоритетних напрямків сучасного розвитку фізики твердого тіла є дослідження кристалічних структур низької вимірності, що пояснюється можливістю створення на їх основі надграток, елементів ефективного енергозбереження, засобів запису та обробки оптичної інформації [1]. Першим на шляху від трьохвимірних кристалів до речовин з пониженою симетрією є клас шаруватих кристалів, в яких реалізується сильний іонно-ковалентний зв'язок між атомами шарового пакету і слабка ван-дер-ваальсова взаємодія між сусідніми пакетами. Внаслідок наявності сильного і слабого зв'язків слід очікувати неоднорідності силового поля, в якому знаходяться атоми, що призведе до особливостей електронного і коливного руху в таких кристалах.

Очікувана [2] сильна анізотропія законів дисперсії електронних і коливних станів,

може спричинити істотні відмінності механічних, електричних, кінетичних і оптичних властивостей в залежності від напрямку відносно структурного шару кристала, що і проявляється, наприклад, у спостережуваних анізотропії ефективних мас носіїв [3] та аномалії температурних зсувів екситонних смуг поглинання PbI<sub>2</sub> [4]. Останнє явище пояснюється [5] появою в акустичних модах коливань мембранного типу, обумовлених наявністю поперечної жорсткості шарового пакету. Це дозволяє розглядати такі системи в якості двовимірних моделей. Одночасно теоретичні розрахунки і численні експериментальні дані свідчать на користь того, що структура зонних спектрів і оптичні властивості таких кристалів краще описуються у рамках тривимірної моделі [6]. Співіснування властивостей дво- і тривимірних кристалічних структур істотно

ускладнює опис фізичних процесів у шаруватих кристалах. Це проявляється, наприклад, у відмінностях поведінки температурних зсувів екситонних смуг у різних шаруватих кристалах, пояснення чого вимагає припущення про відмінність співвідношень ефективних мас носіїв, відповідно до напрямку їх руху; зокрема, у випадку  $PbI_2$  повинні виконуватись умови:  $m_{\parallel}^e > m_{\parallel}^h$ ,  $m_{\perp}^e < m_{\perp}^h$  [5].

Метою даної роботи є обчислення ефективних мас носіїв струму в кристалі  $PbI_2$  на основі розрахунку енергетичного спектра електронної системи, оскільки компоненти тензора обернених ефективних мас

$$\frac{1}{m_{\alpha\beta}} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\vec{k}_0)}{\partial k_{\alpha} \partial k_{\beta}} \quad (1)$$

визначаються похідними другого порядку від енергії одноелектронного стану  $E(\vec{k})$  по декартових координатах хвильового вектора електрона  $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$  у точці

екстремуму  $\vec{k}_0$ . У системі координат головних осей кристала, де вісь Oz перпендикулярна до площини шарового пакету, маємо:

$$\frac{1}{m_{\parallel}} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(\vec{k}_0)}{\partial^2 k_z},$$

$$\frac{1}{m_{\perp}} = \frac{1}{\hbar^2} \left( \frac{\partial^2 E(\vec{k}_0)}{\partial^2 k_x} + \frac{\partial^2 E(\vec{k}_0)}{\partial^2 k_y} \right). \quad (2)$$

## II. Розрахунок зонного спектра

Розрахунок закону дисперсії одноелектронних станів проводився методом псевдопотенціалу з використанням нелокального “з перших принципів” псевдопотенціалу, що зберігає норму, запропонованого Башеле, Гаманом і Шлютером [7]. Без урахування спін-орбітальної взаємодії він може записуватись у формі

$$V_{ps}^{ion}(\vec{r}) = \sum_1 |1\rangle V_1^{ion}(\vec{r}) \langle 1| = \sum_1 |1\rangle (V_{core}(\vec{r}) + \Delta V_1^{ion}(\vec{r})) \langle 1|, \quad (3)$$

де

$$V_{core}(\vec{r}) = -\frac{Z_v}{r} \left| \sum_{i=1}^2 C_i^{core} \text{erf}(\sqrt{\alpha_i^{core}} r) \right| \quad (4)$$

далекодiюча кулонiвська ( $l$ -незалежна), а

$$\Delta V_1^{ion}(\vec{r}) = \sum_{i=1}^3 (A_i + r^2 A_{i+3}) \cdot \exp(-\alpha_i r^2) \quad (5)$$

близькодiюча ( $l$ -залежна) частини iонного псевдопотенціалу, параметри якого розрахованi в [7] для бiльшостi хiмiчних елементiв.

Енергiї зонних станiв  $E_n(\vec{k})$  ( $n$  – номер зони) знаходяться як власнi значення псевдогамiльтонiану

$$H_{ps}(\vec{r}) = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ps}(\vec{r}), \quad (6)$$

визначенi на системi псевдохвильових функцiй  $\Phi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} a_{n\vec{k}}(\vec{G}) \cdot \Psi_{\vec{k}+\vec{G}}(\vec{r})$  iз розв'язку секулярного рiвняння

$$\det \left\| \left[ \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{G})^2 - E(\vec{k}) \right] \delta_{\vec{G}, \vec{G}'} + \langle \vec{k} + \vec{G}' | V_{ps} | \vec{k} + \vec{G} \rangle \right\| = 0. \quad (7)$$

Тут  $\langle \vec{k} + \vec{G}' | V_{ps} | \vec{k} + \vec{G} \rangle = V_L(q) + V_{NL}(\vec{K}, \vec{K}')$  (8) матричнi елементи псевдопотенціалу

$V_{ps}(\vec{r})$ , визначенi у базисi плоских хвиль  $\Psi_{\vec{k}+\vec{G}}(\vec{r}) = \Omega^{-1/2} \exp[i(\vec{k} + \vec{G}) \cdot \vec{r}]$ , нормованих на об'єм кристала  $\Omega$ ,  $V_L(q)$  та  $V_{NL}(\vec{K}, \vec{K}')$  –

їх локальна та, відповідно, нелокальна частини [8];  $\vec{G}$  – вектор оберненої ґратки,  $\vec{K} = \vec{k} + \vec{G}$ ,  $q = |\vec{G}' - \vec{G}|$ .

форм-факторів атомних псевдопотенціалів для Pb та J, записаних для випадку  $q \cdot K \cdot K' \neq 0$  у формі (3) – (5):

Нами встановлено аналітичний вигляд

$$v_L(q) = \frac{1}{\Omega_a} \left[ -4\pi Z_v \sum_{i=1}^2 \frac{C_i^{\text{core}}}{q^2} e^{-\frac{q^2}{4\alpha_i^{\text{core}}}} + \sqrt{\pi^3} \sum_{i=1}^3 \left( \frac{A_i}{\alpha_i^{3/2}} + \frac{A_{i+3}}{\alpha_i^{5/2}} \left( 3 - \frac{q^2}{2\alpha_i} \right) e^{-\frac{q^2}{\alpha_i}} \right) \right], \quad (9)$$

$$v_{NL}(\vec{K}, \vec{K}') = \frac{3\sqrt{\pi^3} \cos \theta}{\Omega_a} \left\{ \left[ \sum_{i=1}^3 \frac{A_i}{\sqrt{KK'\alpha_i}} \cdot I_{3/2}(K, K') \cdot e^{-\frac{K^2 + K'^2}{4\alpha_i}} + A_{i+3} \times \right. \right. \\ \times \left( \frac{J_1(K - K') - J_1(K + K')}{(KK')^2} + \frac{J_2(K - K') + J_2(K + K')}{KK'} - \right. \\ \left. \left. - \frac{J_3(K - K') + J_3(K + K')}{K^2K} + \frac{J_3(K - K') - J_3(K + K')}{K'^2K} \right) \right]_{l=1} - [\dots]_{l=0} \right\}, \quad (10)$$

де  $\theta$  – кут між векторами  $\vec{G}$  і  $\vec{G}'$ ,  $I_{3/2}(z)$  – модифікована сферична функція Бесселя, а

$$J_1(z) = \frac{1}{\sqrt{\alpha_i}} \cdot \exp\left(-\frac{z^2}{4\alpha_i}\right),$$

$$J_2(z) = \frac{2\alpha_i - z^2}{4\alpha_i^{5/2}} \cdot \exp\left(-\frac{z^2}{4\alpha_i}\right),$$

$$J_3(z) = \frac{z}{2\alpha_i^{3/2}} \cdot \exp\left(-\frac{z^2}{4\alpha_i}\right).$$

Використовуючи (9) і (10) будується іонний кристалічний псевдопотенціал

$$\langle \vec{k} + \vec{G}' | V_{ps}^{\text{ion}} | \vec{k} + \vec{G} \rangle = \sum_{\alpha} S_{\alpha} (\vec{G} - \vec{G}') [v_L^{\alpha}(q) + v_{NL}^{\alpha}(\vec{K}, \vec{K}')], \quad (11)$$

де  $S_{\alpha} (\vec{G} - \vec{G}') = N_{\alpha}^{-1} \sum_j e^{-i(\vec{G} - \vec{G}') \cdot \vec{\tau}_j}$  –

структурний фактор (індекс  $j$  нумерує атоми сорту  $\alpha$  всередині елементарної комірки, позиції яких визначаються векторами  $\vec{\tau}_j$ ;

$N_{\alpha}$  – їх кількість) за допомогою якого із (7) можна знайти енергії зонних станів  $E_n(\vec{k})$  без урахування ефектів екранування і обмінно-кореляційної взаємодії.

В рамках лінійної теорії екранування у наближенні локальної густини заряду [9] до (11) слід додати потенціал Хартрі

$$V_H(\vec{q}) = \frac{4\pi \epsilon^2}{q^2} \rho(\vec{q}), \quad (12)$$

а обмінно-кореляційна взаємодія може бути описана введенням відповідного потенціалу, наприклад у формі Слетера [9]:

$$V_x^S(\vec{r}) = -\frac{3\epsilon^2}{2} \left( \frac{3\rho(\vec{r})}{\pi} \right)^{1/3}, \quad (13)$$

де  $\rho(\vec{q})$  – Фур'є-образ щільності розподілу

$$\rho(\vec{r}) = 2 \sum_{n, \vec{k}} |\phi_{n\vec{k}}(\vec{r})|^2,$$

(підсумовування проводиться по усіх заповнених зонах  $n$  та станах  $\vec{k}$  першої зони

Бріллюена),  $\epsilon^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$ .

У першому порядку теорії збурень у базисі плоских хвиль

$$\varphi_{n\vec{k}}(\vec{r}) = a_{n\vec{k}}(0) \cdot \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) + \sum_{\vec{G} \neq 0} a_{n\vec{k}}(\vec{G}) \cdot \psi_{\vec{k}+\vec{G}}(\vec{r}), \quad (14)$$

де  $a_{n\vec{k}}(0)$  та

$$a_{n\vec{k}}(\vec{G}) = \frac{\langle \vec{k} + \vec{G} | V_{ps} | \vec{k} \rangle}{T_{\vec{k}} - T_{\vec{k}+\vec{G}}} a_{n\vec{k}}(0) \quad (\vec{G} \neq 0) \quad (15)$$

члени, відповідно, нульового та першого

порядків, а  $T_{\vec{k}} = \hbar^2 k^2 / 2m$  – енергія вільного електрона, причому  $T_{\vec{k}} \neq T_{\vec{k}+\vec{G}}$ . Тоді у першому порядку по  $\langle \vec{k} + \vec{G} | V_{ps} | \vec{k} \rangle$

$$\rho(\vec{r}) = \frac{2}{\Omega} \sum_{n,\vec{k}} \left[ |a_{n\vec{k}}(0)|^2 + 2a_{n\vec{k}}(0) \sum_{\vec{G} \neq 0} a_{n\vec{k}}(\vec{G}) e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}} \right], \quad (16)$$

$$\rho(\vec{q}) = \frac{1}{\Omega} \int \rho(\vec{r}) e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} d^3\vec{r} = \frac{4}{\Omega} \sum_{n,\vec{k}} |a_{n\vec{k}}(0)|^2 \frac{\langle \vec{k} + \vec{q} | V_{ps} | \vec{k} \rangle}{T_{\vec{k}} - T_{\vec{k}+\vec{q}}} \quad (\vec{q} \neq 0), \quad (17)$$

а

$$V_H(\vec{q}) = \frac{4\pi\epsilon^2}{q^2} = \frac{16\pi\epsilon^2}{q^2\Omega} \sum_{n,\vec{k}} |a_{n\vec{k}}(0)|^2 \frac{\langle \vec{k} + \vec{q} | V_{ps} | \vec{k} \rangle}{T_{\vec{k}} - T_{\vec{k}+\vec{q}}}. \quad (18)$$

Для встановлення Фур'є-образу потенціалу (13) представимо його у вигляді

$$V_x^S(\vec{r}) = -\frac{3\epsilon^2}{2} \left( \frac{6}{\pi\Omega} \sum_{n,\vec{k}} |a_{n\vec{k}}(0)|^2 \right)^{1/3} \times \\ \times \left( 1 + 2 \sum_{n,\vec{k}} a_{n\vec{k}}(0) \sum_{\vec{G} \neq 0} a_{n\vec{k}}(\vec{G}) e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}} / \sum_{n,\vec{k}} |a_{n\vec{k}}(0)|^2 \right)^{1/3} \approx -\frac{3\epsilon^2}{2} \left( \frac{6}{\pi\Omega} \sum_{n,\vec{k}} |a_{n\vec{k}}(0)|^2 \right)^{1/3} \times \\ \times \left( 1 + \frac{2}{3} \sum_{n,\vec{k}} a_{n\vec{k}}(0) \sum_{\vec{G} \neq 0} a_{n\vec{k}}(\vec{G}) e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}} / \sum_{n,\vec{k}} |a_{n\vec{k}}(0)|^2 \right) \quad (19)$$

оскільки, внаслідок слабкості псевдопотенціалу, очікується, що

$a_{n\vec{k}}(\vec{G}) < a_{n\vec{k}}(0)$  при  $\vec{G} \neq 0$ . Це дозволяє знайти

$$V_x^S(\vec{q}) = -\frac{\sqrt[3]{6}\epsilon^2}{\sqrt[3]{\pi\Omega} \left[ \sum_{n,\vec{k}} |a_{n\vec{k}}(0)|^2 \right]^{2/3}} \sum_{n,\vec{k}} |a_{n\vec{k}}(0)|^2 \frac{\langle \vec{k} + \vec{q} | V_{ps} | \vec{k} \rangle}{T_{\vec{k}} - T_{\vec{k}+\vec{q}}}. \quad (20)$$

Таким чином, псевдопотенціал визначається як самоузгоджений по

величині  $\sum_{n,\vec{k}} |a_{n\vec{k}}(0)|^2$  розв'язок рівняння

$$\langle \vec{K}' | V_{ps} | \vec{K} \rangle = \langle \vec{K}' | V_{ps}^{ion} | \vec{K} \rangle + \left( \frac{16\pi}{q^2 \Omega} - \frac{\sqrt[3]{6}}{\sqrt[3]{\pi \Omega} [\sum_{n,\vec{k}} |a_{n\vec{k}}(0)|^2]^{2/3}} \right) \sum_{n,\vec{k}} |a_{n\vec{k}}(0)|^2 \frac{\langle \vec{K}' | V_{ps} | \vec{K} \rangle}{T_{\vec{K}} - T_{\vec{K}'}} \quad (21)$$

з нульовим наближенням  $\langle \vec{K}' | V_{ps} | \vec{K} \rangle^{(0)} = \langle \vec{K}' | V_{ps}^{ion} | \vec{K} \rangle$ . Величини коефіцієнтів  $a_{n\vec{k}}(0)$  знаходяться у кожній точці  $\vec{k}$  на кожному етапі ітераційної процедури пошуку розв'язків секулярного рівняння (7), що містить їх у якості параметрів самоузгодження як компоненти відповідних власних векторів одноелектронного псевдогамільтоніану у базисі плоских хвиль. Енергії зонних станів  $E_n(\vec{k})$  є власними значеннями секулярної задачі (7).

### III. Розрахунок ефективних мас

На основі одержаного таким чином енергетичного спектра можна проводити подальший розрахунок компонентів тензора обернених ефективних мас, які визначаються частинними похідними вектора  $\text{grad}_{\vec{k}} E(\vec{k})$  по декартових

координатах вектора  $\vec{k}$ . Проте  $\text{grad}_{\vec{k}} E_n(\vec{k}) = \hbar \vec{u}_n(\vec{k})$ , де  $\vec{u}_n(\vec{k})$  - швидкість електрона, що знаходиться у стані  $\vec{k}$  n-ї зони:

$$\vec{u}_n(\vec{k}) = \int \psi_{n\vec{k}}^*(\vec{r}) \frac{\hbar}{im_0} \vec{\nabla}_{\vec{k}} \psi_{n\vec{k}}(\vec{r}) d^3\vec{r}. \quad (22)$$

У базисі плоских хвиль [12]

$$\vec{u}_n(\vec{k}) = \frac{\hbar}{m_0} \sum_{\vec{G}} (\vec{k} + \vec{G}) |a_{n\vec{k}}(\vec{G})|^2, \quad (23)$$

отже

$$\text{grad} E_n(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{m_0} \sum_{\vec{G}} (\vec{k} + \vec{G}) |a_{n\vec{k}}(\vec{G})|^2, \quad (24)$$

$$a \quad \frac{\partial^2 E_n(\vec{k})}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} = \frac{\hbar^2}{m_0} \sum_{\vec{G}} \{ |a_{n\vec{k}}(\vec{G})|^2 \delta_{\alpha\beta} + (k_\alpha + G_\alpha) \frac{\partial}{\partial k_\beta} |a_{n\vec{k}}(\vec{G})|^2 \} \quad (25)$$

( $m_0$  – маса вільного електрона). Для плоских хвиль:

$$\sum_{\vec{G}} |a_{n\vec{k}}(\vec{G})|^2 = 1, \quad (26)$$

так що

$$\frac{1}{m_{\alpha\beta}} = \frac{1}{m_0} \{ \delta_{\alpha\beta} + \sum_{\vec{G}} (k_\alpha + G_\alpha) \frac{\partial}{\partial k_\beta} |a_{n\vec{k}}(\vec{G})|^2 \}. \quad (27)$$

Таблиця 1

Параметри для визначення атомних псевдопотенціалів.

	Pb		I	
$\alpha_1^{core}$	1,92		2,52	
$\alpha_2^{core}$	0,76		1,01	
$C_1^{core}$	6,544		3,0856	
$C_2^{core}$	-5,544		-2,0856	
$l$	0	1	0	1
$\alpha_1$	1,40	0,95	2,08	1,80
$\alpha_2$	1,98	1,21	2,47	2,11
$\alpha_3$	3,58	1,77	3,18	2,63
$A_1$	34,22	15,17	98,45	89,86
$A_2$	-13,61	-3,13	-92,20	-93,15
$A_3$	8,29	7,54	22,45	26,33
$A_4$	-0,38	-0,07	-0,16	-0,07
$A_5$	-0,12	-0,03	-0,01	-0,01
$A_6$	-0,15	0,02	0,04	0,01

Псевдопотенціал [7] є таким, що зберігає норму псевдохвильових функцій, отже, умова (26) для них задовольняється. Тоді для розрахунку ефективних мас можна використовувати (27), розуміючи під  $a_{n\vec{k}}(\vec{G})$  відповідні компоненти власного

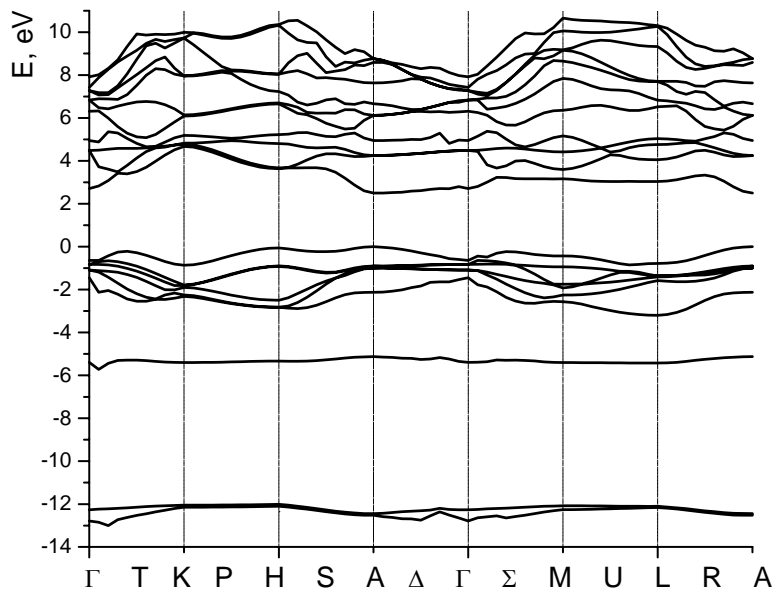
вектора псевдогамільтоніану (6). Нарешті, для визначення похідних у (27) можна [13] використати методи чисельного диференціювання, наприклад, з точністю до  $(\Delta k_x)^2$ :

$$\frac{\partial}{\partial k_x} |a_{n\vec{k}}(\vec{G})|_{(k_x, k_y, k_z)}^2 \approx -\frac{1}{2\Delta k_x} \left\{ 3 |a_{n\vec{k}}(\vec{G})|_{(k_x, k_y, k_z)}^2 - 4 |a_{n\vec{k}}(\vec{G})|_{(k_x + \Delta k_x, k_y, k_z)}^2 + |a_{n\vec{k}}(\vec{G})|_{(k_x + 2\Delta k_x, k_y, k_z)}^2 \right\}. \quad (28)$$

#### IV. Результати розрахунку

2H-політип йодиду свинцю характеризується кристалічною граткою типу CdI<sub>2</sub>, елементарна комірка якої - гексагональна призма, побудована на векторах  $\vec{a}_1 = (a\sqrt{3}/2, -a/2, 0)$ ,  $\vec{a}_2 = (0, -a, 0)$ ,  $\vec{a}_3 = (0, 0, c)$ , з параметрами  $a=4,56 \text{ \AA}$ ,  $c=6,98 \text{ \AA}$  і містить атом Pb у

позиції (0,0,0) та два атоми I у позиціях (1/3, 2/3, u) і (2/3, 1/3, -u) з  $u \approx 0,265$  [14]. Обернена гратка будується на векторах  $\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}(2, 0, 0)$ ,  $\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}(1, \sqrt{3}, 0)$ ,  $\vec{b}_3 = \frac{2\pi}{c}(0, 0, 1)$ , перша зона Бріллюена також являє собою гексагональну призму; її незвідна частина становить 1/12 загального об'єму.



**Рис. 1.** Зонна структура  $\text{PbI}_2$  вздовж напрямків високої симетрії зони Бріллюена.

Остаточні матричні елементи псевдопотенціалу визначалися шляхом, що обговорювався вище, з використанням значень (табл. 1). нелінійних коефіцієнтів  $\alpha_i^{\text{core}}$  ( $i=1,2$ ),  $\alpha_i$  ( $i=1,2,3$ ) та лінійних коефіцієнтів  $C_i^{\text{core}}$  ( $i=1,2$ ), обчислених у [7]; величини  $A_i$  ( $i=1,2,\dots,6$ ) розраховувались спеціальною процедурою, описаною в [7]. Підсумовування по  $\vec{k}$ -станах першої зони Бріллюена здійснювалось методом спеціальних точок [11], вибираючи у якості таких точки

$$\vec{k}_i = \left\{ \left(0, 0, \frac{1}{4}\right), \left(\frac{1}{3}, 0, \frac{1}{4}\right), \left(\frac{1}{3}, 0, \frac{\bar{1}}{4}\right), \left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{4}\right), \left(\frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{\bar{1}}{4}\right) \right\}$$

незвідної частини з відповідними ваговими

множниками  $w_i = \left\{ \frac{1}{9}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{9}, \frac{1}{9} \right\}$

( $i=1,2,3,4,5$ ). Розрахований таким чином енергетичний спектр  $\text{PbI}_2$  (рис. 1) узгоджується з результатами розрахунків методами емпіричного псевдопотенціалу [15] та сильного зв'язку [16]. Обчислені на його основі ефективні маси електрона з найнижчої зони провідності та дірки з найвищої валентної зони разом з експериментально визначеними в [3] значеннями наведені в таблиці 2. Як видно із співставлення, теоретичні значення ефективних мас дірки істотно занижені порівняно з експериментальними, проте відзначені у [5] співвідношення виконуються; має місце також сильна анізотропія ефективних мас електрона.

Таблиця 2

Розраховані і експериментально визначені [3] (в дужках) значення ефективних мас електрона і дірки.

$m_{\parallel}^e / m_0$	$m_{\perp}^e / m_0$	$m_{\parallel}^h / m_0$	$m_{\perp}^h / m_0$
1,12 (1,25)	0,18 (0,25)	0,22 (1,1)	0,46 (1,1)

- [1] М.С. Бродин, И.В., И.В. Блажнив, И.В. Блонский и др. Оптическая бистабильность в области экситонного поглощения кристаллов HgI<sub>2</sub> // *УФЖ*, **34**(2), сс.178-181 (1989).
- [2] T.J. Wieting, D. Schlüter. *Electrons and Phonons in layered Crystal structures*. Publishing Company, Boston-London (1979).
- [3] R. Minder, G. Ottaviani. Transport in Layer Semiconductors // *J. Phys. Chem. Sol.*, **37**(2), pp.417-424, (1976).
- [4] М.С. Бродин, И.В. Блонский. *Экситонные процессы в слоистых кристаллах*. Наук. думка, К. (1986).
- [5] Б.М. Ніцович. Электрон-фононное взаимодействие в слоистых полупроводниках // *ФТТ*, **28**(8), сс.2424-2427 (1986).
- [6] *Широкозонные слоистые кристаллы и их физические свойства* / Под ред. А.Б. Лысковича, Виша школа. Изд – во при Львов. ун – те, Львов (1982).
- [7] G.V. Bachelet, D.R. Hamann, M. Schlüter. Pseudopotentials that work: From H to Pu // *Phys. Rev. B*, **26**(8), pp.4199- 4228 (1982).
- [8] M.L. Cohen, J.R. Chelikowsky. *Electronic Structure and Optical Properties of Semiconductors*. Heidelberg: Springer-Verlag, Berlin (1988).
- [9] *Достижения электронной теории металлов* // Под ред. П. Цише, Г. Леманна, Мир, М. (1984).
- [10] А. Анималу. *Квантовая теория кристаллических твердых тел*. Мир, М. (1981).
- [11] R.A. Evarestov, V.P. Smirnov. Special Points of the Brillouin Zone and Their Use in the Solid State Theory // *Phys. stat. sol. (B)*, **119**(1), pp.9-40 (1983).
- [12] В.В. Немошкаленко, В.В. Антонов. *Методы вычислительной физики в теории твердого тела: Зонная теория металлов*. Наук. думка, К. (1985).
- [13] І.С. Собчук. Ефективні маси електронів і дірок у кремнії, отримані методом апріорного псевдопотенціалу // *Вісник ДУ “Львівська політехніка”*: Елементи теорії та приклади твердотільної мікроелектроніки, **326**, сс.119-121 (1999).
- [14] R.W.G. Wyckoff. *Crystal Structure*, 2nd ed. **1**, Interscience, New York (1965).
- [15] M. Schlüter, I.Ch. Schlüter. Electronic structure and optical properties of PbI<sub>2</sub> // *Phys. stat. sol. (B)*, **57**(4), pp.1652-1663 (1973).
- [16] J. Bordas, J. Robertson, A. Jakobsson. Ultraviolet properties and band structure of SnS<sub>2</sub>, SnSe<sub>2</sub>, CdI<sub>2</sub>, PbI<sub>2</sub>, BiI<sub>3</sub>, and BiOI crystals // *J. Phys. C: Solid State Phys*, **11**(12), pp.2607-2621 (1978).

N.K. Kramar<sup>2</sup>, V.M. Kramar<sup>1</sup>, B.M. Nitsovych<sup>1</sup>

## Calculations of Effective Masses of the Electrons and Holes in the Layer Semiconductor Crystal PbI<sub>2</sub>

<sup>1</sup>Chernivtsi National University, 2 Kotsyubinskogo Str., 58012, Chernivtsi, Ukraine  
<sup>2</sup>Bukovinian State Institute of Economics and Finances, 1 Shterna Str., 58001, Chernivtsi, Ukraine

The structure of the electrons energy bands in the layer semiconductor crystal PbI<sub>2</sub> (2H-polytype) are calculated using the pseudopotential method. A calculation has been performed by use norm- conserving nonsocial “ab initio” pseudopotential by Bachelet-Hamann-Schlüter. Effects of the screening and correlation are taken into account. Effective masses of the electrons and holes were computed on the grounds of energies dispersion law. The presence of essential anisotropy of the electrons effective masses has been found, what is agreed with an experimental data.