

# ВЛИЯНИЕ ДАВЛЕНИЯ НА ЭЛЕКТРОННУЮ ЗОННУЮ СТРУКТУРУ И ЦИРКУЛЯРНЫЙ ФОТОТОК В ТЕЛЛУРЕ

*М. М. Глазов, Е. Л. Ивченко, М. О. Нестоклон\**

*Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук  
194021, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 06 июня 2022 г.,  
после переработки 09 июня 2022 г.  
Принята к публикации 09 июня 2022 г.

Развита шестизонная *кр*-модель для описания зонной структуры теллура. В рамках эффективного гамильтониана, а также в методе функционала плотности (DFT) проанализировано влияние гидростатической деформации на структуру зон. Определена параметризация *кр*-гамильтониана. В *кр*-методе прослежена трансформация зон при закрытии щели. Показано, что в DFT-подходе с нелокальным гибридным обменно-корреляционным функционалом на основе функционала PBE при давлениях  $p \lesssim 4$  ГПа щель в спектре теллура не закрывается. Выполнен расчет спектров междузонного поглощения света и циркулярного фототока при прямых междузонных переходах в деформированном теллуре.

*Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 95-летию Э. И. Рашба*

DOI: 10.31857/S0044451022100157

EDN: JUDFNW

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Теллур является одним из классических полупроводников, насчитывающим давнюю и богатую историю исследований. Кристаллы теллура киральные и существуют в виде двух энантиомеров с пространственными группами симметрии  $D_3^4$  и  $D_3^6$  в обозначениях Шенфлиса, или  $P3_121$  и  $P3_221$  в международной системе обозначений. Как и другие киральные вещества, теллур обладает естественной оптической активностью [1, 2] и магнитокиральной анизотропией [3], на нем впервые были обнаружены циркулярный фотогальванический эффект [4, 5] и оптическая активность, индуцированная током [6].

В последние годы изучение теллура возобновилось с новой силой. Это связано с повышенным интересом к эффектам ориентации спинов электрическим током в теллуре [7–10], фотогальваническим эффектам и эффектам увлечения электронов фотонами [11], к спиновой структуре электронных состояний в этом материале [12], а также возможно-

стью реализации так называемых вейлевских точек в зонной структуре теллура [13–15]. Изучаются также возможности создания устройств микроэлектроники на основе Te [16], а также электронная структура и оптические свойства монослоев Te [17–19].

Зонная структура теллура в значительной мере обусловлена спин-орбитальным взаимодействием [20]. В эффективном гамильтониане, описывающем состояние зоны проводимости, имеются линейные по волновому вектору электрона спин-зависимые слагаемые, наподобие членов, предсказанных Э. И. Рашба для вюрцитных кристаллов [21, 22]. Примечательно, что спин-орбитальное взаимодействие полностью снимает спиновое вырождение состояний в двух верхних валентных подзонах, причем энергетическое расстояние между ними сопоставимо с шириной запрещенной зоны.

Изучение влияния гидростатического давления на электронную зонную структуру кристаллов теллура берет начало в 1930-х годах [23], см. также [24–29]. С ростом давления кристаллическая структура теллура претерпевает ряд структурных превращений [30]. Первое из них — переход от тригональной фазы Te(I) с точечной группой симметрии  $D_3$  к моноклинной фазе Te(II), причем при комнатной температуре переход происходит при давлении примерно  $p_c = 4$  ГПа, что установлено во многих ра-

\* E-mail: glazov@coherent.ioffe.ru

ботах:  $p_c=3.6$  ГПа [23], 4.3 ГПа [31], 4.04 ГПа [32], 4 ГПа [33–35]; в статье [36] указано, что в исследованных образцах теллура в интервале давлений 4–4.5 ГПа фазы Te(I) и Te(II) сосуществуют. Также не оспаривается снижение ширины запрещенной зоны теллура  $E_g$  с ростом давления при  $p < p_c$  [37–39]. В отличие от консенсуса относительно критического значения  $p_c$  и знака производной  $\partial E_g/\partial p < 0$ , нет однозначности в ответе на вопрос о том, происходит ли переход полупроводник–металл еще в тригональной фазе, т.е. при  $p < p_c$ , или в результате превращения Te(I)  $\rightarrow$  Te(II). Так, в экспериментальных работах [40, 41] утверждается, что с ростом давления ширина запрещенной зоны уменьшается, но остается конечной вплоть до критического значения  $p_c$ . Напротив, в двух других экспериментальных работах указано, что схлопывание запрещенной зоны в теллуре с ростом давления происходит при  $p = 2$  ГПа [42] или  $p = 3.5$  ГПа [43]. Согласно недавно опубликованной работе [38] ширина запрещенной зоны уменьшается от  $E_g = 0.3$  эВ при  $p = 0$  до 0.14 эВ при  $p = 2.205$  ГПа, а асимптотическая прямая  $E_g = a + bp$  при  $p = 4$  ГПа принимает значение меньше 0.03 эВ. Расчеты *ab initio* показывают, что запрещенная зона схлопывается и в зоне Бриллюэна формируются вейлевские точки при  $p = 1.6$  ГПа [13] или  $p \approx 2.18$  ГПа [14]. Таким образом, вопрос о переходе теллура в металлическое состояние при  $p < p_c$  сохраняет актуальность и предполагает дальнейшее экспериментальное и теоретическое исследование.

В настоящей работе зонная структура теллура исследуется в рамках шестизонной **кp**-модели, включающей две спиновые подзоны проводимости и четыре валентных подзоны. Ранее **кp**-анализ для недеформированного теллура проводился для четырех подзон валентной зоны [20, 44]. Кроме того, мы провели расчет зонной структуры теллура в методе функционала плотности (DFT) и сравнили его с результатами, полученными в **кp**-модели. На основе сопоставления двух подходов определена параметризация **кp**-гамильтониана, а также исследована зависимость параметров эффективного гамильтониана от гидростатического давления. В **кp**-модели главным параметром, на который влияет давление, является ширина запрещенной зоны  $E_g$ .

Мы также проанализировали роль обменно-корреляционного функционала в DFT-подходе. Для этого мы сравнили расчёты зонной структуры, выполненные с использованием модифицированного функционала Беке–Джонсона (mBJ) [45] и нелокального гибридного потенциала YSPBE0 (гибрид-

ный потенциал на основе PBE с экранировкой Юкавы [46]). Результаты, полученные с использованием потенциала mBJ, качественно повторяют результаты работы [13]. Однако этот подход сильно недооценивает ширину запрещенной зоны объемного Te без приложенного давления. Поэтому мы также выполнили расчёты зонной структуры с использованием гибридного функционала YSPBE0. Этот функционал, аналогичный функционалу HSE06 [47], считается на данный момент максимально точным для описания зонной структуры полупроводниковых материалов. К сожалению, он также обладает достаточно большой вычислительной сложностью, и до недавнего времени его реализация в основных пакетах для DFT-расчётов твёрдых тел была ограничена.

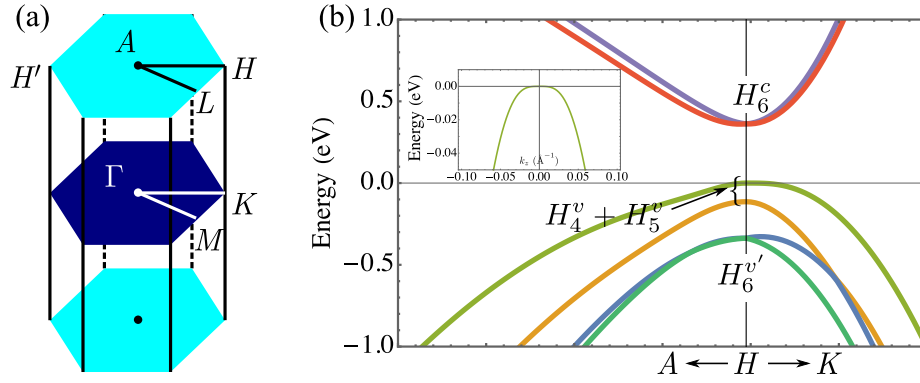
Развитая теория использована для расчета влияния давления на спектральную зависимость циркулярного фотогальванического эффекта в кристаллах теллура в рамках шестизонного **кp** подхода.

План статьи таков. В разд. 2 излагается шестизонная **кp**-модель для описания энергетического спектра теллура вблизи *H*-точек зоны Бриллюэна. Раздел 3 содержит анализ электронной дисперсии в находящемся под давлением кристалле теллура с малым значением  $E_g$ , когда применима упрощенная трехзонная модель, в которой учитываются две спиновые ветви зоны проводимости и ближайшая к ней ветвь валентной зоны. Далее в разд. 4 в рамках **кp**-подхода обсуждается закрытие щели и трансформация спектра при наличии гидростатического давления. Затем в разд. 5 приводятся расчеты спектров поглощения и циркулярного фотогальванического эффекта. Раздел 6 посвящен результатам DFT-расчетов и параметризации **кp**-гамильтониана. Основные результаты работы приведены в разд. 7.

## 2. ШЕСТИЗОННАЯ **кp**-МОДЕЛЬ

Напомним, что в недеформированном теллуре прямая запрещенная зона реализуется в точке *H* зоны Бриллюэна, см. рис. 1(а). Фактор-группа волнового вектора в этой точке  $D_3$  совпадает с точечной группой симметрии кристалла.

Для расчета эволюции зонной структуры теллура с ростом давления  $p$  мы воспользуемся **кp**-методом, аналогичным модели Кейна для полупроводников  $A_3B_5$  и  $A_2B_6$ , см., например, [48]. В эффективном матричном гамильтониане  $\mathcal{H}$  размерности  $6 \times 6$  учтено **кp** смешивание состояний



**Рис. 1.** (а) Зона Бриллюэна теллура в тригональной фазе. (б) Схематическая дисперсия зон при нулевом давлении в двух направлениях  $H \rightarrow A$  и  $H \rightarrow K$ . Указаны неприводимые представления в точке  $H$  зоны Бриллюэна, по которым преобразуются соответствующие базисные функции, см. (1). На вставке к панели (б) показана дисперсия электронов в валентной зоне в увеличенном масштабе для  $\mathbf{k} \parallel z$ . Параметры  $\mathbf{k}\mathbf{p}$ -модели приведены в табл. 1 ( $p = 0$ )

зоны проводимости  $H_6^c$  и валентных зон  $H_4^v$ ,  $H_5^v$  и  $H_6^{v'}$ . Напомним, что спинорное представление  $H_6$  группы  $D_3$  — двумерное, а представления  $H_4$  и  $H_5$  — одномерные. В пренебрежении спин-орбитальным взаимодействием с далекими зонами базисные спинорные функции в вершине зоны Бриллюэна  $H$  в выделенных зонах представляют собой произведения спиновых столбцов  $\alpha \equiv \uparrow$ ,  $\beta \equiv \downarrow$  на орбитальные функции  $S$ ,  $X$  и  $Y$ , рассчитанные в пренебрежении спин-орбитальным взаимодействием, а именно:

$$\begin{aligned} \text{представление } H_6^c: & \left|c, \frac{1}{2}\right\rangle = \zeta\alpha S, \\ & \left|c, -\frac{1}{2}\right\rangle = \zeta\beta S, \\ \text{представления } H_4^v + H_5^v: & \left|v, \frac{3}{2}\right\rangle = \alpha \frac{X + iY}{\sqrt{2}}, \\ & \left|v, -\frac{3}{2}\right\rangle = \beta \frac{X - iY}{\sqrt{2}}, \\ \text{представление } H_6^{v'}: & \left|v', \frac{1}{2}\right\rangle = \beta \frac{X + iY}{\sqrt{2}}, \\ & \left|v', -\frac{1}{2}\right\rangle = \alpha \frac{X - iY}{\sqrt{2}}, \end{aligned} \quad (1)$$

где  $\zeta$  — фазовый множитель, выбираемый так, чтобы междузонный матричный элемент  $P$  (см. ниже) был вещественным. Несмотря на то, что функции  $S$ ,  $X$  и  $Y$  преобразуются по проективным представлениям пространственных групп  $D_3^4$  или  $D_3^6$ , при расчете матричных элементов можно считать, что они эффективно характеризуются симметрией инварианта ( $S$ ) или пары координат  $x, y$  ( $X$  и  $Y$ ) (ось  $z$  направлена вдоль оси третьего порядка). Отметим, что по представлениям  $H_4$ ,  $H_5$  преобразуются базис-

ные функции

$$\begin{aligned} |H_4^v\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \left|v, \frac{3}{2}\right\rangle + \left|v, -\frac{3}{2}\right\rangle \right), \\ |H_5^v\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \left|v, \frac{3}{2}\right\rangle - \left|v, -\frac{3}{2}\right\rangle \right), \end{aligned} \quad (2)$$

но мы при записи эффективного  $\mathbf{k}\mathbf{p}$ -гамильтониана будем использовать именно базисные функции  $|v, 3/2\rangle$ ,  $|v, -3/2\rangle$ . Отметим, что симметрия по отношению к инверсии времени связывает две долины  $H$  и  $H'$ , рис. 1(а). При этом функции  $S$ ,  $X$ ,  $Y$  в долине  $H$  комплексно сопряжены с аналогичными функциями в долине  $H'$ .

Эффективный гамильтониан  $6 \times 6$  представим в виде суммы основного вклада  $\mathcal{H}$  и малой поправки  $\delta\mathcal{H}$ . Оператор  $\mathcal{H}$  — это блочная матрица

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} H_{cc} & H_{cv} & H_{cv'} \\ H_{vc} & H_{vv} & H_{vv'} \\ H_{v'c} & H_{v'v} & H_{v'v'} \end{bmatrix} \quad (3)$$

с блоками  $H_{mn}$  ( $m, n = c, v, v'$ ) размерности  $2 \times 2$ :

$$\begin{aligned} H_{cc} &= (E_g + \varepsilon_{c\mathbf{k}})I, \\ \varepsilon_{c\mathbf{k}} &= A_c k_z^2 + B'_c k_{\perp}^2, \\ k_{\perp}^2 &= k_x^2 + k_y^2, \end{aligned} \quad (4)$$

$$H_{vv} = -(\Delta_2 + \varepsilon_{v\mathbf{k}})I + \begin{bmatrix} \beta k_z & \Delta_2 \\ \Delta_2 & -\beta k_z \end{bmatrix}, \quad (5)$$

$$\varepsilon_{v\mathbf{k}} = A k_z^2 + B' k_{\perp}^2,$$

$$H_{v'v'} = -(\Delta_1 + \Delta_2 + \varepsilon_{v\mathbf{k}})I + \begin{bmatrix} \beta k_z & 0 \\ 0 & -\beta k_z \end{bmatrix}, \quad (6)$$

$$\begin{aligned}
H_{cv} &= \begin{bmatrix} Pk_+ & 0 \\ 0 & Pk_- \end{bmatrix}, \\
H_{cv'} &= \begin{bmatrix} 0 & Pk_- \\ Pk_+ & 0 \end{bmatrix}, \\
H_{vv'} &= \begin{bmatrix} 0 & Qk_+ \\ Qk_- & 0 \end{bmatrix}.
\end{aligned} \tag{7}$$

Здесь  $I$  — единичная матрица  $2 \times 2$ ,  $\Delta_1$  и  $\Delta_2$  — константы спин-орбитального расщепления валентной зоны, а квадратичные по  $\mathbf{k}$  диагональные слагаемые возникают во втором порядке теории возмущений с учетом далеких зон, введены вещественные мат-

**Таблица 1.** Параметры  $\mathbf{kr}$ -гамильтониана, полученные путем подгонки расчетов в методе DFT

| $p$ , ГПа                                   | 0       | 1       | 2       | 3       |
|---|---------|---------|---------|---------|
| $E_g$ , эВ                                  | 0.346   | 0.217   | 0.146   | 0.097   |
| $\Delta_2$ , эВ                             | 0.057   | 0.064   | 0.069   | 0.071   |
| $\Delta_1$ , эВ                             | 0.278   | 0.267   | 0.253   | 0.253   |
| $\Delta_{cv'}$ , эВ                         | -0.040  | —       | —       | —       |
| $A_c$ , эВ $\cdot \text{Å}^2$               | 62.000  | 62.580  | 78.850  | 94.000  |
| $A'_{v'}$ , эВ $\cdot \text{Å}^2$           | -40.000 | -48.000 | -69.000 | -74.660 |
| $A$ , эВ $\cdot \text{Å}^2$                 | 35.690  | 53.500  | 72.600  | 80.700  |
| $B'_c$ , эВ $\cdot \text{Å}^2$              | 2.000   | —       | —       | —       |
| $B'$ , эВ $\cdot \text{Å}^2$                | 12.480  | —       | —       | —       |
| $B'_{v'}$ , эВ $\cdot \text{Å}^2$           | -6.774  | -7.000  | -7.580  | -12.000 |
| $P$ , эВ $\cdot \text{Å}$                   | 3.309   | —       | —       | —       |
| $Q$ , эВ $\cdot \text{Å}$                   | 0.010   | —       | —       | —       |
| $\beta_{\parallel}^c$ , эВ $\cdot \text{Å}$ | 0.371   | 0.260   | 0.230   | 0.150   |
| $\beta$ , эВ $\cdot \text{Å}$               | 2.000   | 2.000   | 2.320   | 2.350   |
| $\beta'_{\parallel}$ , эВ $\cdot \text{Å}$  | 1.248   | —       | —       | —       |
| $\beta'_{\perp}$ , эВ $\cdot \text{Å}$      | -0.180  | -0.250  | -0.400  | -0.500  |
| $\beta'_{\perp}$ , эВ $\cdot \text{Å}$      | -0.544  | —       | —       | —       |

*Примечание.* Значения, которые не менялись при подгонке, приведены один раз для  $p = 0$ . Параметр линейного по  $k_z$  смешивания зон  $c$  и  $v'$  (гамильтониан (10))  $Q_{\parallel} = 0$ ; параметр, описывающий релятивистское смешивание зон  $v$  и  $v'$  в (10),  $\tilde{Q} = 0$ . При подгонке учитывалось различие дисперсии зон  $v$  и  $v'$ , параметры затравочной дисперсии зоны  $v'$  (представление  $H_6^{v'}$ )  $\varepsilon_{v',\mathbf{k}} = A'_{v'}k_z^2 + B'_{v'}k_{\perp}^2$  также приведены в таблице. Величина  $A'_{v'}$  близка к параметру  $A$ , описывающему зону  $v$ , а величина параметра  $B'_{v'}$  слабо влияет на спектр зоны  $v'$ .

ричные элементы

$$\begin{aligned}
P &= -\frac{\hbar^2 \zeta^*}{\sqrt{2}m_0} \langle S | \frac{\partial}{\partial x} | X \rangle, \\
Q &= -i \frac{\hbar^2}{m_0} \langle X | \frac{\partial}{\partial x} | X \rangle, \\
\beta &= \frac{\hbar^2}{m_0} \text{Re} \left\{ \langle X | \frac{\partial}{\partial z} | Y \rangle \right\},
\end{aligned} \tag{8}$$

и  $m_0$  — масса свободного электрона. Мы придерживаемся обозначения констант  $\Delta_1$ ,  $\Delta_2$ ,  $A_c$ ,  $A$ ,  $\beta$  согласно публикациям [20, 49]. В отличие от константы  $B$  (или  $B_c$ ) в [49] константа  $B'$  ( $B'_c$ ) не содержит  $\mathbf{kr}$ -вклада от нижней зоны проводимости  $H_6^c$  (от валентных подзон  $H_4^v$ ,  $H_5^v$  и  $H_6^{v'}$ ).

Поправки к гамильтониану (1) можно назвать релятивистскими, они включают линейные по  $\mathbf{k}$  члены в зонах  $H_6^c$  и  $H_6^{v'}$

$$\begin{aligned}
\delta \mathcal{H}_{cc} &= \begin{bmatrix} \beta_{\parallel}^c k_z & \beta_{\perp}^c k_{-} \\ \beta_{\perp}^c k_{+} & -\beta_{\parallel}^c k_z \end{bmatrix}, \\
\delta \mathcal{H}_{v'v'} &= \begin{bmatrix} \beta'_{\parallel} k_z & \beta'_{\perp} k_{-} \\ \beta'_{\perp} k_{+} & -\beta'_{\parallel} k_z \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{9}$$

и междузонные вклады

$$\begin{aligned}
\delta \mathcal{H}_{cv'} &= \begin{bmatrix} \Delta_{cv} + Q_{\parallel} k_z & 0 \\ 0 & \Delta_{cv} - Q_{\parallel} k_z \end{bmatrix}, \\
\delta \mathcal{H}_{vv'} &= \begin{bmatrix} \tilde{Q} k_{-} & 0 \\ 0 & \tilde{Q} k_{+} \end{bmatrix},
\end{aligned} \tag{10}$$

смешивающие зоны  $H_6^c$  и  $H_6^{v'}$  и  $H_4^v$ ,  $H_5^v$  и  $H_6^{v'}$ , соответственно. Гамильтониан  $\mathcal{H}_{cv'}$  содержит как не зависящий от  $\mathbf{k}$  вклад спин-орбитального смешивания ( $\Delta_{cv}$ ), так и линейные по  $k_z$  члены ( $Q_{\parallel} k_z$ ). Параметр  $\Delta_{cv}/\sqrt{2}$  совпадает с матричным элементом оператора спин-орбитального взаимодействия  $\langle H_1 | T_x | H_{31} \rangle$  из статьи [44], а параметр  $\beta_{\parallel}^c$  — с параметром  $\beta_c$  в [49]. В отличие от коэффициента  $\beta$  в (7) коэффициент  $\beta'_{\parallel}$  имеет релятивистскую малость.

Вследствие симметрии к инверсии времени параметр  $P$  и параметры, описывающие линейные по  $\mathbf{k}$  спин-зависимые вклады в дисперсию носителей заряда ( $\beta$ ,  $\beta_{\parallel}^c$  и т. д.), имеют один и тот же знак в долинах  $H$  и  $H'$ , а параметры  $\Delta_2$  и  $Q$  различаются знаками.

### 3. ЧАСТНЫЙ СЛУЧАЙ: ЗОНА ПРОВОДИМОСТИ $H_6^c$ БЛИЗКА К ВАЛЕНТНОЙ ПОДЗОНЕ $H_4^v$

Пусть энергетический зазор между зоной проводимости и верхней валентной подзоной мал по срав-

нению с расстояниями до нижних валентных подзон. Такая модель адекватна для описания кристалла с малой  $E_g$ . Тогда валентные зоны  $H_5^v$  и  $H_6^v$  мож-

но исключить из рассмотрения, и в базисе  $|c, 1/2\rangle$ ,  $|c, -1/2\rangle$ ,  $|H_4^v\rangle$  получим гамильтониан  $3 \times 3$

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} E_g + \tilde{\varepsilon}_{c\mathbf{k}} + \beta_{\parallel}^c k_z & \beta_{\perp}^c k_{-} & P_{+} k_{+} \\ \beta_{\perp}^c k_{+} & E_g + \tilde{\varepsilon}_{c\mathbf{k}} - \beta_{\parallel}^c k_z & P_{-} k_{-} \\ P_{+} k_{-} & P_{-} k_{+} & -\Delta_2 - \tilde{\varepsilon}_{v\mathbf{k}} + \sqrt{\Delta_2^2 + (\beta k_z)^2} \end{bmatrix}, \quad (11)$$

где  $\tilde{\varepsilon}_{c\mathbf{k}} = \Delta_{cv'}^2 / (E_g + \Delta + \Delta_2) + A_c k_z^2 + \tilde{B}'_c k_{\perp}^2$  и учтен энергетический сдвиг дна зоны проводимости за счет спин-орбитального смешивания с далекой валентной зоной,  $\tilde{\varepsilon}_{v\mathbf{k}} = A k_z^2 + \tilde{B}'_c k_{\perp}^2$ ;  $\tilde{B}'_c$  — коэффициент, подправленный с учетом **кp**-смешивания с нижними валентными зонами  $H_5^v$  и  $H_6^v$ ;  $\tilde{B}'$  — коэффициент, подправленный с учетом **кp**-смешивания с нижней валентной зоной  $H_6^{v'}$ :

$$\begin{aligned} \tilde{B}'_c &= B'_c + \frac{P^2}{2} \left( \frac{1}{E_g + 2\Delta_2} + \frac{2}{E_g + \Delta_1 + \Delta_2} \right), \\ \tilde{B}' &= B' - \frac{Q^2}{\Delta_1 + \Delta_2}, \end{aligned}$$

и перенормированные матричные элементы оператора импульса

$$P_{+} = c_{+} P, \quad P_{-} = c_{-} P$$

с учетом линейного по  $k_z$  смешивания состояний в валентной зоне, характеризуемого коэффициентами

$$c_{\pm} = \sqrt{\frac{1}{2} \left( 1 \pm \frac{\beta k_z}{\sqrt{\Delta_2^2 + (\beta k_z)^2}} \right)}.$$

Общие выражения для энергетического спектра, описываемого гамильтонианом (11), весьма громоздки, поэтому мы остановимся на важных частных случаях. При  $k_z = 0$ ,  $\mathbf{k}_{\perp} \neq 0$  имеем

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} E_g + \frac{\Delta_{cv'}^2}{E_g + \Delta + \Delta_2} + \tilde{B}'_c k_{\perp}^2 & \beta_{\perp}^c k_{-} & P k_{+} / \sqrt{2} \\ \beta_{\perp}^c k_{+} & E_g + \frac{\Delta_{cv'}^2}{E_g + \Delta + \Delta_2} + \tilde{B}'_c k_{\perp}^2 & P k_{-} / \sqrt{2} \\ P k_{-} / \sqrt{2} & P k_{+} / \sqrt{2} & -\tilde{B}'_c k_{\perp}^2 \end{bmatrix}.$$

Тогда три собственных значения энергии удовлетворяют уравнению

$$(\varepsilon_{c\mathbf{k}_{\perp}} - E) [(\varepsilon_{c\mathbf{k}_{\perp}} - E)(\varepsilon_{v\mathbf{k}_{\perp}} - E) - P^2] - \beta_{\perp}^c k_{\perp}^2 (\varepsilon_{v\mathbf{k}_{\perp}} - E) + P^2 \beta_{\perp}^2 \cos 3\varphi = 0, \quad (12)$$

где  $\varepsilon_{c\mathbf{k}_{\perp}} = E_g + \Delta_{cv'}^2 / (E_g + \Delta + \Delta_2) + \tilde{B}'_c k_{\perp}^2$ ,  $\varepsilon_{v\mathbf{k}_{\perp}} = -\tilde{B}'_c k_{\perp}^2$  и  $\varphi$  — угол между двумерным вектором  $\mathbf{k}_{\perp}$  и осью  $x$ . Это уравнение третьей степени при  $\varphi = 0$  распадается на линейное и квадратное уравнения, решения которых имеют вид

$$\begin{aligned} E_1 &= \varepsilon_{c\mathbf{k}_{\perp}} - \beta_{\perp}^c k_x, \\ E_{2,3} &= \frac{\varepsilon_{c\mathbf{k}_{\perp}} + \beta_{\perp}^c k_x + \varepsilon_{v\mathbf{k}_{\perp}}}{2} \pm \sqrt{\left[ \frac{\varepsilon_{c\mathbf{k}_{\perp}} + \beta_{\perp}^c k_x - \varepsilon_{v\mathbf{k}_{\perp}}}{2} \right]^2 + P^2 k_x^2}. \end{aligned} \quad (13)$$

Аналогичной дисперсией обладает энергетический спектр при  $\varphi = 2\pi/3, 4\pi/3$ . При других направлениях вектора  $\mathbf{k}_{\perp}$  простого разделения кубического уравнения (12) на линейное и квадратное не происходит, но угловая зависимость собственных энергий  $E_j$  ( $j = 1, 2, 3$ ) сохраняет тригональную симметрию.

При  $k_z \neq 0$ ,  $\mathbf{k}_{\perp} = 0$  уравнение (12) распадается на три линейных:

$$\begin{aligned} E_{1,2} &= E_g + \frac{\Delta_{cv'}^2}{E_g + \Delta + \Delta_2} + A_c k_z^2 \pm \beta_{\parallel}^c k_z, \\ E_3 &= -\Delta_2 - A k_z^2 + \sqrt{\Delta_2^2 + (\beta k_z)^2}. \end{aligned} \quad (14)$$

На рис. 2 представлено сравнение дисперсии носителей заряда в рамках шестизонной модели (3)

и упрощенного гамильтониана (11). Расчеты производились для разных величин «затравочной» ширины запрещенной зоны, т.е. параметра  $E_g$  в эффективном гамильтониане. Видно хорошее согласие между расчетами в полной и упрощенной моделях.

#### 4. ЗАКРЫТИЕ ЩЕЛИ В ЭЛЕКТРОННОМ СПЕКТРЕ ТЕЛЛУРА ПОД ДАВЛЕНИЕМ

Перейдем теперь к анализу эффектов, связанных с закрытием щели в теллуре под давлением. Для модельных **кp**-расчетов будем считать, что гидростатическое давление приводит к уменьшению величины  $E_g$  в эффективных гамильтонианах (3) и (11), а другие исходные параметры модели (такие как матричные элементы импульса и величины спин-орбитальных расщеплений зон) не меняются. Такое приближение позволяет по меньшей мере качественно понять суть эффекта, а результаты DFT-расчетов, представленных в разд. 6, в целом подтверждают данные выводы, хотя и ставят под сомнение возможность закрытия щели до перехода  $\text{Te(I)} \rightarrow \text{Te(II)}$ .

Результаты численных расчетов ширины запрещенной зоны в зависимости от затравочной величины  $E_g$  представлены на рис. 3(a). Видно, что при выбранной параметризации **кp**-гамильтониана схождение запрещенной зоны происходит при затравочной  $E_g \approx -5$  мэВ. На панелях (b) и (c) рис. 3 показаны дисперсионные зависимости электрона в случаях, когда запрещенная зона схлопнулась (b) и нет (c).

Аналитически эффект можно описать в рамках упрощенной трехзонной модели для случая  $\mathbf{k}_\perp = 0$ . Рассмотрим для иллюстрации простейшую ситуацию, когда  $|\beta k_z| \ll \Delta_2$ , и пренебрежем для начала спин-орбитальным смешиванием зон. Тогда ветви 2 и 3 дисперсии пересекутся при условии

$$E_g < E_0 = \frac{(\beta_{\parallel}^c)^2}{4(A_c + A - \beta^2/2\Delta_2^2)}, \quad (15)$$

при

$$|k_{z;1,2}| = \frac{2E_0}{\beta_{\parallel}^c} \left( 1 \pm \sqrt{1 - \frac{E_g^2}{E_0^2}} \right). \quad (16)$$

Здесь предполагается, что  $A_c, A, \beta_{\parallel}^c > 0$ . Критическое значение  $E_g = E_0$ , найденное по формуле (15), составляет около 1.5 мэВ, оно отмечено стрелкой на рис. 3(a). В численном расчете с используемой нами параметризацией **кp**-модели, полученной в методе DFT (см. разд. 6), однако, оказывается важнее сдвиг вверх по энергии дна зоны проводимости

за счет спин-орбитального смешивания с валентной зоной, и щель закрывается примерно при

$$E_g < E_0^\Delta = -\Delta_{cv}^2/(\Delta + \Delta_2). \quad (17)$$

В используемой параметризации  $E_0^\Delta \approx -4.5$  мэВ.

Для ряда параметризаций **кp**-гамильтониана, однако, более важную роль могут играть квадратичные по  $k_z$  члены в валентной зоне. Проанализируем ответ в нулевом порядке по  $\beta_c$ . Для этого введем характерную энергию

$$\bar{E} = \frac{\beta^2}{2(A_c + A)}. \quad (18)$$

Касание зон осуществится при

$$k_0 = \sqrt{\frac{\bar{E}^2 - \Delta_2^2}{\beta^2}}, \quad (19)$$

причем вещественное решение возможно лишь при выполнении неравенства

$$\bar{E} = \frac{\beta^2}{2(A_c + A)} > \Delta_2. \quad (20)$$

При этом запрещенная зона схлопнется при

$$E'_0 = \frac{(\bar{E} - \Delta_2)^2}{2\bar{E}}. \quad (21)$$

Отметим, что при используемой нами параметризации условие (20) не выполнено.

#### 5. ОПТИЧЕСКИЕ ПЕРЕХОДЫ И ЦИРКУЛЯРНЫЙ ФОТОГАЛЬВАНИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ

Перейдем теперь к исследованию междозонных оптических переходов и циркулярного фотогальванического эффекта в рамках шестизонной **кp**-модели. Мы ограничимся расчетами в случае, когда в спектре имеется запрещенная зона, и будем рассматривать лишь прямые междозонные переходы. Коэффициент поглощения кристалла

$$\alpha(\omega) = \frac{e^2}{\pi c n \omega} \sum_{ij} \int d^3 k |\mathbf{e} \cdot \mathbf{v}_{ij}|^2 \delta[E_i(\mathbf{k}) - E_j(\mathbf{k}) - \hbar\omega]. \quad (22)$$

Здесь  $\omega$  — частота падающего излучения; напомним, что  $m_0$  — масса свободного электрона,  $n$  — показатель преломления кристалла,  $\mathbf{e}$  — комплексный вектор поляризации света,  $\mathbf{v}_{ij}$  — матричные элементы

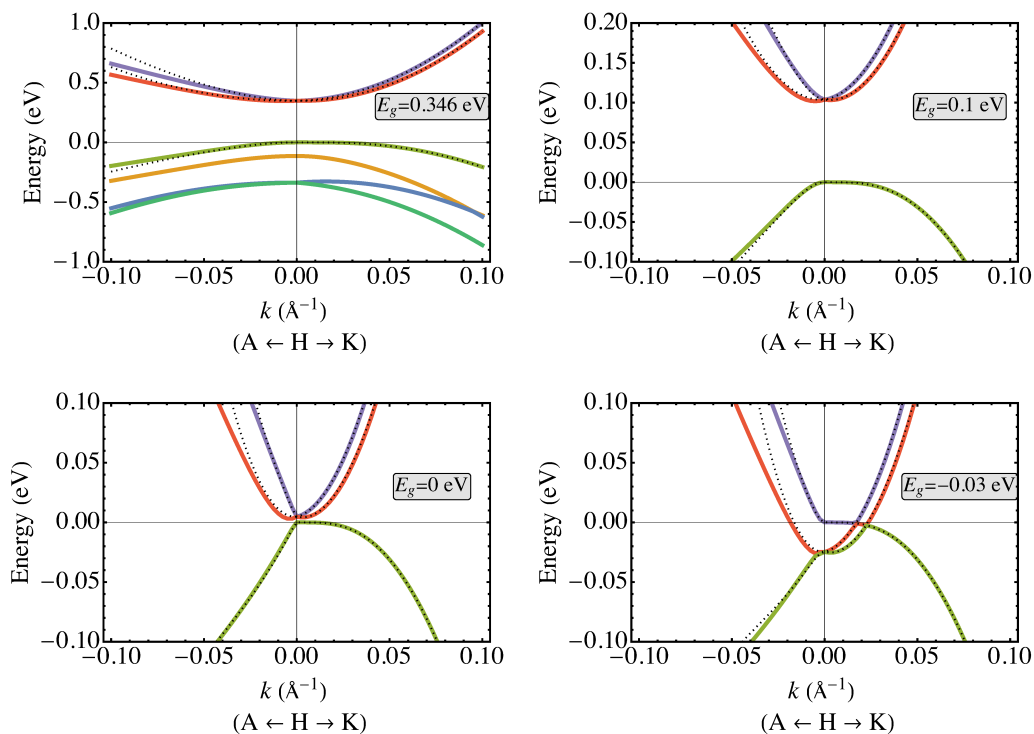


Рис. 2. Дисперсионные кривые для объемного теллура, рассчитанные при разных величинах «затравочной» ширины запрещенной зоны  $E_g$  (указаны на панелях) в рамках шестизонного кр-гамильтониана (3) (сплошные кривые) и упрощенной модели  $3 \times 3$ , формула (11). Параметры кр-модели приведены в табл. 1 ( $p = 0$ ), менялась лишь ширина запрещенной зоны

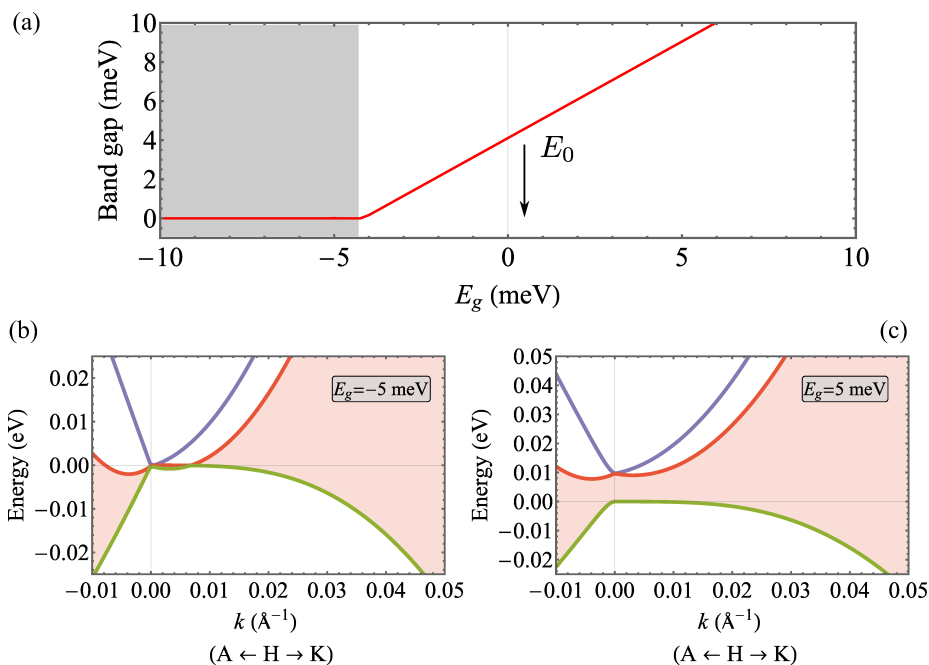


Рис. 3. (а) Зависимость ширины запрещенной зоны от параметра  $E_g$ . Стрелкой обозначена энергия  $E_0$ , найденная по формуле (15) в рамках упрощенной модели. (b,c) Дисперсия электронов в бесщелевом случае при затравочной  $E_g = -5$  мэВ (b) и в системе со щелью при  $E_g = 5$  мэВ (c). Параметры расчета те же, что на рис. 2

оператора скорости  $\hat{\mathbf{v}} = \hbar^{-1} \partial \mathcal{H} / \partial \mathbf{k}$  между состояниями валентной зоны  $j$  и зоны проводимости  $i$ ,  $E_i(\mathbf{k})$ ,  $E_j(\mathbf{k})$  — соответствующие дисперсии. В (22) предполагается, что кристалл не легирован.

Циркулярный фотогальванический эффект состоит в генерации постоянного электрического тока, направление которого меняется на противоположное при смене знака циркулярной поляризации, и описывается псевдотензором второго ранга  $\gamma_{\alpha\beta}$ , где  $\alpha, \beta$  — декартовы компоненты,

$$j_{\alpha\beta} = \gamma_{\alpha\beta} \kappa_{\beta} I, \quad (23)$$

введена интенсивность света в кристалле  $I$  и вектор  $\boldsymbol{\kappa} = i[\mathbf{e} \times \mathbf{e}^*] \equiv P_{circ} \mathbf{n}$ ,  $P_{circ}$  — степень циркулярной поляризации излучения,  $\mathbf{n}$  — единичный вектор в направлении распространения света. При распространении света вдоль главной оси возникает продольный ток, причем соответствующую компоненту тензора  $\gamma_{zz}$  можно представить в виде [49, 50]

$$\gamma_{zz}(\omega) = e \frac{\alpha(\omega)}{\hbar\omega} (\bar{v}_e \tau_e - \bar{v}_h \tau_h), \quad (24)$$

где  $\tau_e$  и  $\tau_h$  — времена релаксации по импульсу соответственно фотоэлектронов и фотодырок, а

$$\bar{v}_e \propto \sum_{ij} \int d^3k v_{ii,z} |\mathbf{e}_+ \mathbf{v}_{ij}|^2 \delta[E_i(\mathbf{k}) - E_j(\mathbf{k}) - \hbar\omega], \quad (25a)$$

$$\bar{v}_h \propto \sum_{ij} \int d^3k v_{jj,z} |\mathbf{e}_+ \mathbf{v}_{ij}|^2 \delta[E_i(\mathbf{k}) - E_j(\mathbf{k}) - \hbar\omega] \quad (25b)$$

— их средние скорости,  $\mathbf{e}_+$  — орт правоциркулярной поляризации. В приведенных здесь и далее расчетах мы используем для нахождения матричных элементов оператора скорости и энергетического спектра шестизонный  $\mathbf{kp}$ -гамильтониан, в отличие от подхода [51, 52], где для расчета оптического отклика Те использовались волновые функции и энергии, найденные в методе DFT.

На рис. 4 представлены спектры поглощения кристалла при различных ширинах запрещенной зоны, панели (а–с), и зависимости скоростей  $\bar{v}_e$  и  $\bar{v}_h$  в (25а), (25б) от  $\hbar\omega$ , панели (д–ф). При  $E_g = 0.346$  эВ спектр поглощения имеет характерный для объемного полупроводника вид  $\propto \sqrt{\hbar\omega - E_g}$ , вторая корневая особенность в спектре возникает при  $\hbar\omega = E_g + 2\Delta_2$ , когда начинаются оптические переходы из нижней подзоны  $H_5^v$  (отмечено стрелкой). Спектральная зависимость скоростей для

электронов  $\bar{v}_e$  и дырок  $\bar{v}_h$  различная. Для дырок при малых отстройках от края поглощения,  $\hbar\omega - E_g \ll \Delta_2$ , скорость линейно растет с отстройкой, а для электронов наблюдается заметная немонотонность и смена знака. Это обусловлено наличием значительных линейных по  $k_z$  членов в эффективном гамильтониане зоны проводимости в используемой нами параметризации, при этом в валентной зоне двугорбая структура выражена не очень явно (см. вставку к рис. 1). Это приводит, в частности, к  $\bar{v}_e, \bar{v}_h \neq 0$  на краю поглощения; этот эффект наиболее ярко выражен для электронов и проявляется еще ярче при уменьшении ширины запрещенной зоны.

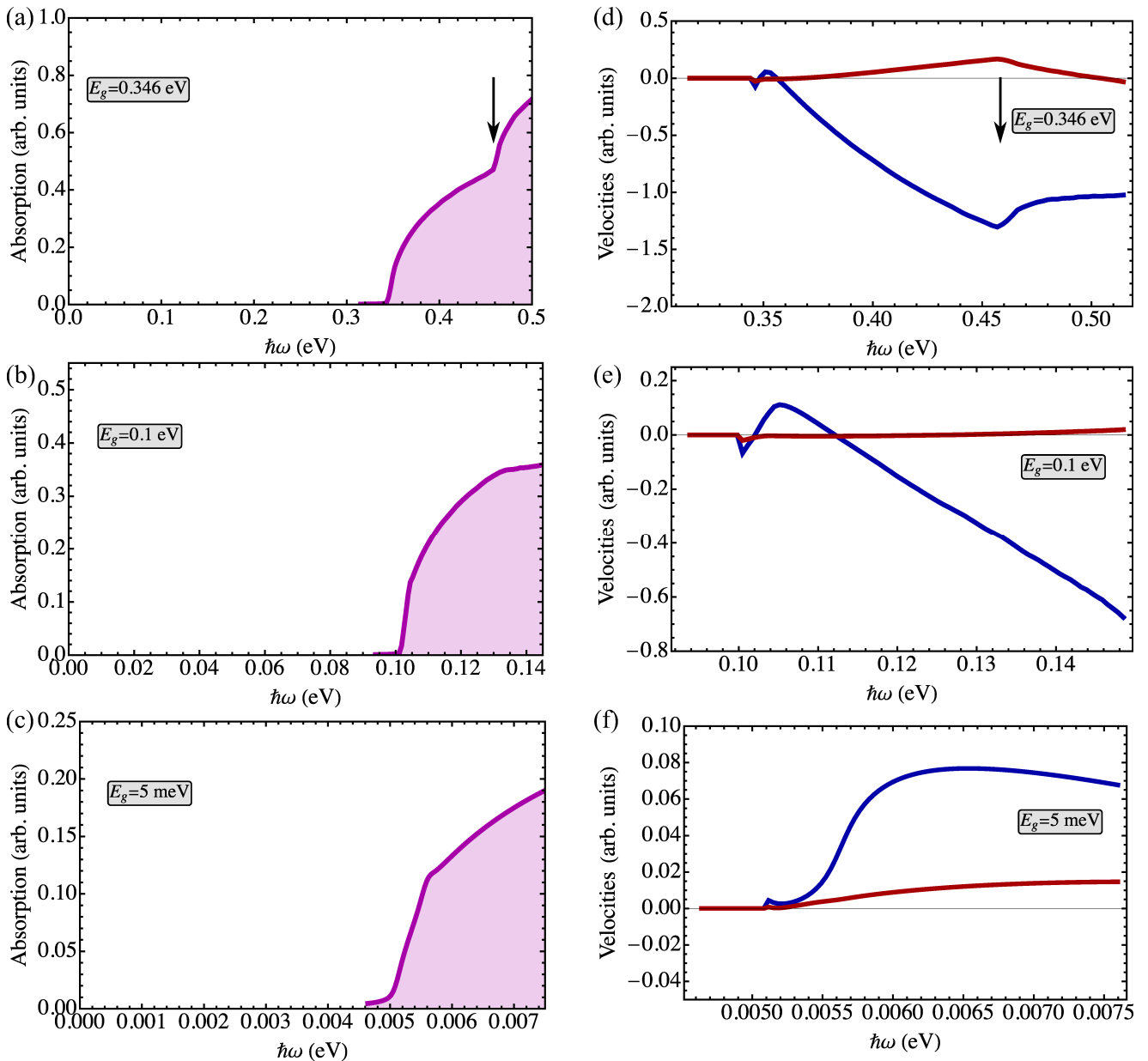
Отметим, что в кристаллах с линейной дисперсией электронов и дырок, в частности, в полуметаллах Вейля, ожидается универсальная зависимость циркулярного фототока от частоты [53]. С уменьшением  $E_g$  спектр электронов и дырок вблизи точки  $H$  в теллуре становится близким к линейному, см. рис. 2, однако эффективный гамильтониан не может быть сведен к вейлевскому гамильтониану без наклона (tilt), поэтому в нашем случае и в согласии с работами [54, 55] универсальная спектрально-независимая величина фототока не наблюдается.

Циркулярный фотогальванический эффект в недеформированном теллуре был рассчитан в рамках трехзонного  $\mathbf{kp}$ -гамильтониана в работах [49, 56]. Для того чтобы продемонстрировать связь с ранними работами [49, 50, 56], где в используемой параметризации гамильтониана линейные по  $\mathbf{k}$  члены в зоне проводимости были пренебрежимо малы, мы на рис. 5 представляем результаты расчета циркулярного фототока в такой параметризации, где  $\beta_c = 0$ , а  $\beta$  взята в 1.25 раза больше, чем значение, приведенное в табл. 1. Остальные параметры взяты, как и в расчете на рис. 4, из таб. 1 при давлении  $p = 0$ . Поведение кривых для  $\bar{v}_e, \bar{v}_h$  при  $0 < \hbar\omega - E_g \lesssim \Delta_2$  согласуется с результатами расчета в [56].

## 6. ЗОННАЯ СТРУКТУРА ТЕЛЛУРА В МЕТОДЕ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

Для расчетов с помощью метода функционала плотности использовался пакет WIEN2k [57]. Для исследования релаксации решетки и упругих свойств — обменно-корреляционный функционал SCAN [58]. Для расчета электронного спектра мы брали два обменно-корреляционных функционала:



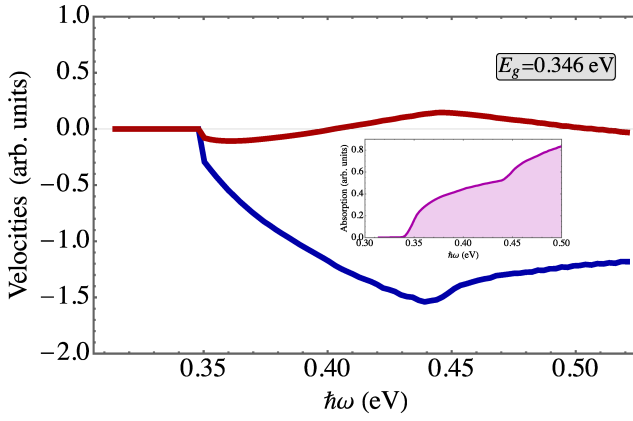


**Рис. 4.** (а–с) Коэффициент поглощения, обусловленный прямыми междозонными переходами и рассчитанный по золотому правилу Ферми (22) для разных ширины запрещенной зоны. Рассматривается циркулярно поляризованный свет, падающий вдоль оси третьего порядка. Параметры расчета те же, что на рис. 2. (d–f) Спектр возбуждения циркулярного фототока: зависимости скоростей  $\bar{v}_e$  (синие кривые) и  $\bar{v}_h$  (красные кривые) от энергии падающего фотона рассчитаны по формулам (25). В численных расчетах  $\delta$ -функция, описывающая закон сохранения энергии, заменена на лоренциан с шириной  $\Gamma = E_g/1000$ , кроме панелей (с) и (f), где  $\Gamma = E_g/150$ . На панелях (с, f) затравочная ширина запрещенной зоны 1 мэВ. Шероховатости кривых связаны с погрешностью численного расчета

модифицированный функционал Беке–Джонсона (modified Becke–Johnson meta-GGA) [45], далее мы его называем mBJ, а также гибридный функционал на основе функционала Пердью–Берка–Эрнцгерофа (PBE) с экранировкой Юкавы (Yukawa screened PBE0 hybrid functional) [46], далее — YSPBE0.

### 6.1. Постоянные решетки и уравнение состояния

Обратимся сначала к основным свойствам кристаллической решетки теллура. Расчеты с параметром  $R_{MT} = 2.4$  (значение по умолчанию) показывают, что значения постоянных решетки полно-



**Рис. 5.** Спектр возбуждения циркулярного фототока: зависимости скоростей  $\bar{v}_e$  (синие кривые) и  $\bar{v}_h$  (красные кривые) от энергии падающего фотона при  $E_g = 0.346$  эВ. На вставке показан спектр поглощения. В численных расчетах  $\delta$ -функция, описывающая закон сохранения энергии, заменена на лоренциан с шириной  $\Gamma = E_g/1000$ . Шероховатости кривых связаны с погрешностью численного расчета. Параметры расчета такие же, как и на рис. 4, но  $\beta^c = 0$ ,  $\beta = 2.5$  эВ  $\cdot$   $\text{\AA}$

стью сходятся при следующих параметрах базиса:  $R_{MTK_{max}} = 9.5$ ,  $L_{vns} = 6$ , и улучшенная с фактором 4 сетка для быстрого преобразования Фурье. В  $\mathbf{k}$ -пространстве сетка была  $12 \times 12 \times 8$ . При этих параметрах для Те без внешнего давления постоянные решетки составляют  $a = 8.42$  ат.ед. и  $c = 11.20$  ат.ед., что отличается от экспериментальных данных менее, чем на 0.1%.

Для расчета зонной структуры при заданном давлении необходимо уравнение состояния теллура, т.е. зависимость энергии  $E(V, r)$  кристалла от объема элементарной ячейки  $V$  и отношения параметров решетки  $r = c/a$ , а также зависимость давления от этих параметров. При заданном объеме элементарной ячейки  $V_i$  определялось равновесное отношение  $r_0(V_i)$ , соответствующее минимуму  $E_0(V_i) = E(V_i, r_0(V_i))$ , рассчитанному в DFT (отметим, что соответствующая зависимость энергии от  $r$  при фиксированном объеме хорошо описывается параболой). Получившаяся зависимость  $E_0(V_i)$  подгонялась формулой Берча–Мурнагана [59, 60]

$$E(V) = E_0 + \frac{9}{16} \frac{B}{14703.6} \times V_0 [(\eta^2 - 1)^3 B' + (\eta^2 - 1)^2 \cdot (6 - 4\eta^2)], \quad (26a)$$

$$\eta = \left(\frac{V_0}{V}\right)^{1/3}$$

$$p(V) = \frac{3}{2} B(\eta^7 - \eta^5) \left(1 + \frac{3}{4} (B' - 4)(\eta^2 - 1)\right) \quad (26b)$$

и формулой Роза–Вине [61]

$$E(V) = E_0 + 2 \frac{B}{14703.6} \frac{V_0}{(B' - 1)^2} \times \left[2 - (5 + 3B'(\eta_2 - 1) - 3\eta_2) \times \exp\left(-\frac{3}{2}(B' - 1)(\eta_2 - 1)\right)\right], \quad (27a)$$

$$\eta_2 = \left(\frac{V}{V_0}\right)^{1/3}$$

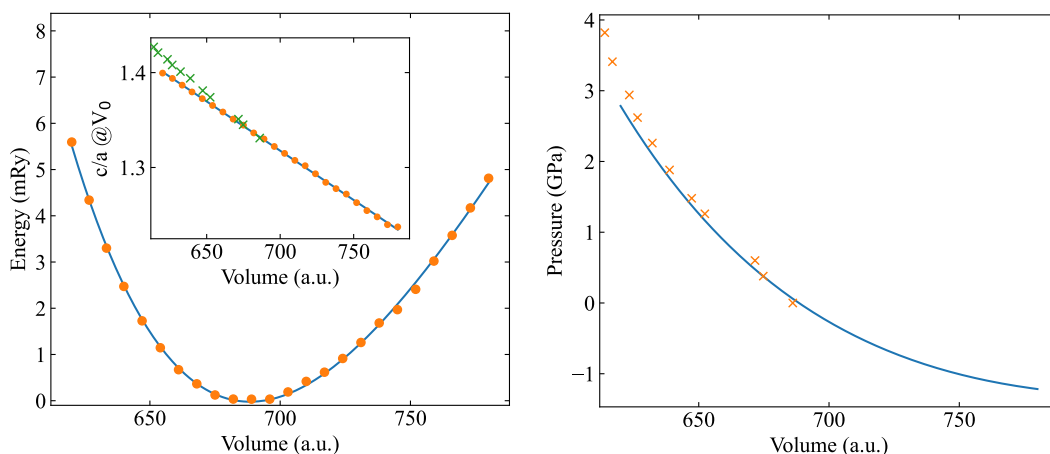
$$p(V) = 3B \frac{1 - \eta_2}{\eta_2^2} \exp\left[\frac{3}{2}(B' - 1)(1 - \eta_2)\right]. \quad (27b)$$

В этих формулах давление задается в ГПа, а энергии — в Ry. Из подгонки  $E(V)$ , приведенной на рис. 6(a), были определены параметры  $V_0 = 688.44$  ат.ед.,  $B = 17.26$  ГПа,  $B' = 8.6$  (для уравнения Берча–Мурнагана) и  $V_0 = 688.31$  ат.ед.,  $B = 17.15$  ГПа,  $B' = 8.79$  (для уравнения Роза–Вине). На вставке приведено отношение  $r = c/a$  в зависимости от объема элементарной ячейки и результат подгонки линейной зависимостью  $r_0(V) = 1.401 - 0.00104(V - 620)$ . Это позволяет рассчитывать  $p(V)$ , т.е. связать гидростатическое давление с параметрами элементарной ячейки.

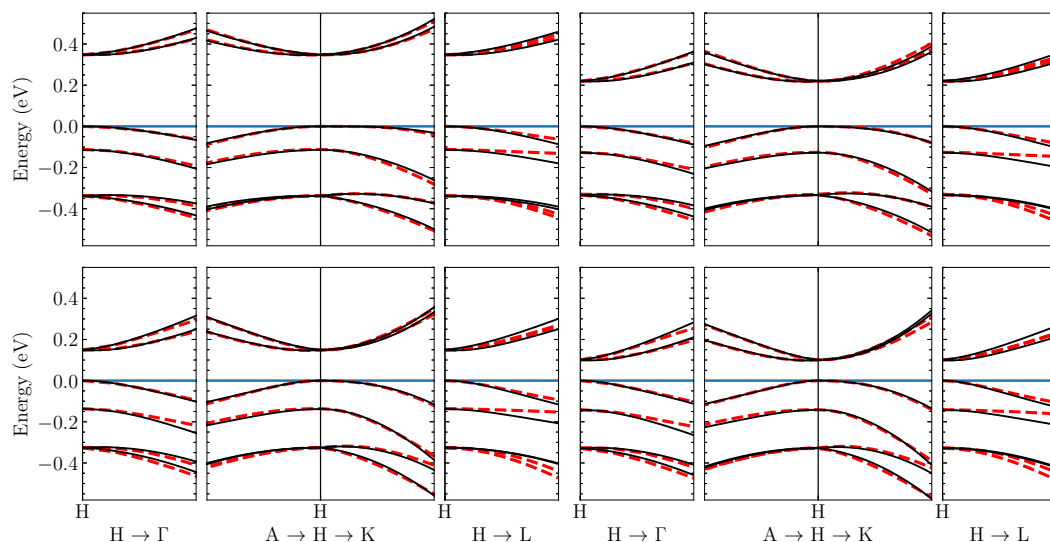
Уравнения состояния позволяют рассчитать давление в зависимости от объема элементарной ячейки; обращая соответствующую зависимость, мы нашли  $V$  и  $c/a$  для теллура в зависимости от давления, рис. 6(b). Разные уравнения состояния дают совпадающие (в пределах численной погрешности) зависимости энергии от объема элементарной ячейки и давления от объема элементарной ячейки. Полученные результаты неплохо соответствуют данным эксперимента [62].

Мы также выполнили соответствующие расчеты с использованием функционала PBE, они приводят к несколько другим параметрам:  $V_0 = 709.32$  ат.ед.,  $B = 17.78$  ГПа,  $B' = 9.80$  для уравнения состояния Берча–Мурнагана и  $V_0 = 709.38$  ат.ед.,  $B = 17.58$  ГПа,  $B' = 9.74$  для уравнения состояния Роза–Вине. Таким образом, PBE существенно преувеличивает значение постоянной решетки по сравнению с экспериментальными значениями.

Интересно отметить, что при изменении давления постоянная решетки  $c$  (вдоль оси третьего порядка) практически не меняется, а постоянная решетки  $a$  меняется примерно на 4% при давлении 2 ГПа. При этом, поскольку атомы Те в решетке формируют своего рода спирали (правовинтовые для пространственной группы  $D_3^4$ ), то с увеличением давления уменьшается как расстояние



**Рис. 6.** (а) Рассчитанная энергия основного состояния  $E_0(V_i) - E_0(V_0)$  в зависимости от объема элементарной ячейки (точки) и подгонка по формулам (26) (кривая). На вставке приведено отношение  $c_0(V)/a_0(V)$  (точки), линейная аппроксимация (сплошная линия) и экспериментальные данные из работы [62] (зеленые крестики). (б) Связь между давлением и объемом элементарной ячейки определяется формулой (26b) (кривая). Кресты — экспериментальные данные из работы [62]



**Рис. 7.** Зонная структура  $\text{Te}$  при давлениях  $p = 0$  ГПа (верхняя левая панель),  $p = 1$  ГПа (верхняя правая панель),  $p = 2$  ГПа (нижняя левая панель),  $p = 3$  ГПа (нижняя правая панель). Красные штриховые кривые — расчет по методу DFT, черные сплошные кривые — кр-модель с параметрами из табл. 1. На рисунке показана окрестность точки  $\text{H}$  в различных направлениях. Диапазон изменения длины волнового вектора, отсчитанного от точки  $\text{H}$ , составляет  $0.05 \text{ \AA}^{-1}$

между спиралями (описываемое постоянной решетки  $a$ ), так и расстояние между атомами в спирали. В табл. 2 приведены значения параметров решетки для некоторых давлений.

### 6.2. Электронный спектр и параметры кр-модели

Расчет зонной структуры  $\text{Te}$  проводился с использованием нелокального гибридного функцио-

нала YSPBE0 [46]. Использовались следующие параметры метода DFT:  $R_{MT} = 2.4$ ,  $R_{MT}K_{max} = 8.0$ ,  $L_{vns} = 10$ , сетка в обратном пространстве  $12 \times 12 \times 8$ . Для расчета спин-орбитальных эффектов использовались параметры по умолчанию, кроме  $E_{max} = 7.0$  [57]. Для данных параметров расчет зонной структуры хорошо сходится. На рис. 7 представлены результаты DFT-расчета зонной структуры при давлениях  $p = 0, 1$  ГПа, 2 ГПа и 3 ГПа (красные штриховые линии) и их подгонка

**Таблица 2.** Параметры решетки Те  $a$ ,  $c$  в зависимости от гидростатического давления

| $p$ , ГПа | $a$ , а. е. | $c$ , а. е. |
|-----------|-------------|-------------|
| 0.0       | 4.4579      | 5.9275      |
| 1.0       | 4.3521      | 5.9311      |
| 1.5       | 4.3122      | 5.9306      |
| 2.0       | 4.2776      | 5.9294      |
| 2.5       | 4.2469      | 5.9277      |
| 3.0       | 4.2194      | 5.9256      |

в **кp**-методе (черные сплошные линии). Параметры **кp**-модели, полученные путем подгонки, приведены в табл. 1.

Отметим, что как и ожидается из общих соображений, наиболее сильная зависимость от гидростатического давления наблюдается у ширины запрещенной зоны  $E_g$ . С разумной точностью зависимость  $E_g$  от постоянной решетки  $a$  может быть описана линейной функцией

$$E_g \approx 0.346 + 0.548(a - 4.4579). \quad (28)$$

Квадратичный вклад мал, его величина близка к ошибке численного расчета.

Подчеркнем, что при всех давлениях, используемых в расчете, запрещенная зона не закрывается при постоянной  $a \approx 3.8265$  ат. ед., что соответствует нереалистично большому давлению  $p \gg 4$  ГПа.

Мы также выполнили расчеты с обменно-корреляционным потенциалом mBJ (аналогичные расчетам в работе [13]). Такой расчет дает ширину запрещенной зоны примерно на 50 % меньше, чем расчет с функционалом YSPBE0, при этом щель схлопывается при давлении около 2.5 ГПа. Этот результат, однако, гораздо хуже согласуется с экспериментальными данными по ширине запрещенной зоны недеформированного Те, и мы не использовали его результаты в нашем анализе.

## 7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе построена зонная теория теллура при наличии гидростатического давления. В рамках метода эффективного гамильтониана предложена шестизонная **кp**-модель зонной структуры, включающей две спиновые подзоны проводимости и четыре валентных подзоны. Основным параметром, на который влияет давление — ширина запрещенной

зоны. В рамках предложенной **кp**-модели исследовано изменение спектра кристалла при наличии гидростатического давления, рассчитаны спектры поглощения и циркулярный фотогальванический эффект в деформированном теллуре.

Также в рамках метода функционала плотности определены параметры кристаллической решетки теллура, уравнение состояния и энергетический спектр. Выполнена параметризация **кp**-гамильтониана. Показано, что в DFT-подходе с гибридным обменно-корреляционным функционалом YSPBE0 при давлениях  $p \lesssim 4$  ГПа щель в спектре теллура не закрывается.

**Фининсирование.** Работа поддержана Российским научным фондом (грант № 19-12-00051).

## ЛИТЕРАТУРА

1. K. C. Nomura, Phys. Rev. Lett. **5**, 500 (1960).
2. Л. С. Дубинская, И. И. Фарбштейн, ФТТ **20**, 753 (1978).
3. G. L. J. A. Rikken and N. Avarvari, Phys. Rev. B **99**, 245153 (2019).
4. В. М. Аснин, А. А. Бакун, А. М. Данишевский, Е. Л. Ивченко, Г. Е. Пикус, А. А. Рогачев, Письма в ЖЭТФ **28**, 80 (1978).
5. V. M. Asnin, A. A. Bakun, A. M. Danishevskii, E. L. Ivchenko, G. E. Pikus, and A. A. Rogachev, Sol. Such that. Commun. **30**, 565 (1979).
6. Л. Е. Воробьев, Е. Л. Ивченко, Г. Е. Пикус, И. И. Фарбштейн, В. А. Шалыгин, А. И. Штурбин, Письма в ЖЭТФ **29**, 485 (1979).
7. В. А. Шалыгин, А. Н. Софронов, Л. Е. Воробьев, И. И. Фарбштейн, ФТТ **54**, 2045 (2012).
8. Tetsuya Furukawa, Yuri Shimokawa, Kaya Kobayashi, and Tetsuaki Itou, Nature Communications **8**, 954 (2017).
9. Tetsuya Furukawa, Yuta Watanabe, Naoki Ogasawara, Kaya Kobayashi, and Tetsuaki Itou, Phys. Rev. Research **3**, 023111 (2021).
10. C. Şahin, J. Rou, J. Ma, and D. A. Pesin, Phys. Rev. B **97**, 205206 (2018).
11. V. A. Shalygin, M. D. Moldavskaya, S. N. Danilov, I. I. Farbshtein, and L. E. Golub, Phys. Rev. B **93**, 045207 (2016).

12. M. Sakano, M. Hirayama, T. Takahashi, S. Akebi, M. Nakayama, K. Kuroda, K. Taguchi, T. Yoshikawa, K. Miyamoto, T. Okuda, K. Ono, H. Kumigashira, T. Ideue, Y. Iwasa, N. Mitsuiishi, K. Ishizaka, S. Shin, T. Miyake, S. Murakami, T. Sasagawa, and T. Kondo, *Phys. Rev. Lett.* **124**, 136404 (2020).
13. L. A. Agapito, N. Kioussis, W. A. Goddard III, and N.P. Ong, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 176401 (2013).
14. M. Hirayama, R. Okugawa, S. Ishibashi, S. Murakami, and T. Miyake, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 206401 (2015).
15. K. Nakayama, M. Kuno, K. Yamauchi, S. Souma, K. Sugawara, T. Oguchi, T. Sato, and T. Takahashi, *Phys. Rev. B* **95**, 125204 (2017).
16. Yifei Yang, Mingkun Xu, Shujing Jia, Bolun Wang, Lujie Xu, Xinxin Wang, Huan Liu, Yuanshuang Liu, Yuzheng Guo, Lidan Wang, Shukai Duan, Kai Liu, Min Zhu, Jing Pei, Wenrui Duan, Dameng Liu, and Huanglong Li, *Nature Commun.* **12**, 6081 (2021).
17. Zhili Zhu, Xiaolin Cai, Seho Yi, Jinglei Chen, Yawei Dai, Chunyao Niu, Zhengxiao Guo, Maohai Xie, Feng Liu, Jun-Hyung Cho, Yu Jia, and Zhenyu Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **119**, 106101 (2017).
18. GangQiu, Yixiu Wang, Yifan Nie, Yongping Zheng, Kyeongjae Cho, Wenzhuo Wu, and Peide D. Ye, *Nano Lett.* **18**, 5760 (2018).
19. Jinjin Wang, Yanrong Guo, Hong Shen, Yu-Yo Chen, Rongjun Zhang, Yuxiang Zheng, Liangyao Chen, Songyou Wang, Yu Jia, Hong-Yi Chen, and Wan-Sheng Su, *RSC Adv.* **9**, 41703 (2019).
20. М. С. Бреслер, В. Г. Веселаго, Ю. В. Косичкин, Г. Е. Пикус, И. И. Фарбштейн, С. С. Шалыт, *ЖЭТФ* **57**, 1479 (1969).
21. Э. И. Рашба, *ФТТ* **1** 407 (1959).
22. Э. И. Рашба, В. И. Шека, *ФТТ (сборник статей II)*, 162 (1959).
23. P. W. Bridgman, *Polymorphism*, *Phys. Rev.* **48**, 893 (1935).
24. Th. Starkloff and J. D. Joannopoulos, *J. Chem. Phys.* **68**, 579 (1978).
25. U. Steigenberger, M. I. Eremets, S. G. Lapin, M. von Ortenberg, A. M. Shirokov, and Y. V. Kosichkin, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **17** 427 (1984).
26. A. Coker, T. Lee, and T.P. Das, *Phys. Rev. B* **22**, 2968 (1980).
27. Y. Ohmasa, I. Yamamoto, M. Yao and H. Endo, *J. Phys. Soc. Jpn* **64**, 4766 (1995).
28. I. Yamamoto, Y. Ohmasa, H. Ikeda, and H. Endo, *J. Phys.: Condens. Matter* **7**, 4299 (1995).
29. C. Hejny and M. I. McMahon, *Phys. Rev. B* **70**, 184109 (2004).
30. V. V. Braznkin, R. N. Voloshin, S. V. Popova, and A. G. Umnov, *J. Phys.: Condens. Matter* **4**, 141 (1992).
31. F. A. Blum and B. C. Deaton, *Phys. Rev. A* **137**, 1410 (1965).
32. S. N. Vaidya and G. C. Kennedy, *J. Phys. Chem. Solids* **33**, 1377 (1972).
33. G. Parthasarathy and W. B. Holzapfel, *Phys. Rev. B* **37**, 8499 (1988).
34. A. K. Bandyopadhyay and D. B. Singh, *Pramana — J. Phys.* **52**, 303 (1999).
35. C. Hejny and M. I. McMahon, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 215502 (2003).
36. C. Marini, D. Chermisi, M. Lavagnini, D. Di Castro, C. Petrillo, L. Degiorgi, S. Scandolo, and P. Postorino, *Phys. Rev. B* **86**, 064103 (2012).
37. A. Koma, T. Tani, and S. Tanaka, *Phys. Stat. Solidi (b)* **66**, 669 (1974).
38. J. F. Oliveira, M. B. Fontes, M. Moutinho, S. E. Rowley, E. Baggio-Saitovitch, M. B. Silva Neto, and C. Enderlein, *Commun. Mater.* **2**, 1 (2021).
39. V. B. Anzin, M. I. Eremets, Yu. V. Kosichkin, A. I. Nadezhdinskii, and A. M. Shirokov, *Phys. Stat. Solidi (b)* **42**, 385 (1977).
40. В. В. Щенников, *ФТТ* **42**, 626 (2000).
41. K. Akiba, K. Kobayashi, T. C. Kobayashi, R. Kozuka, A. Miyake, J. Gouchi, Y. Uwatoko, and M. Tokunaga, *Phys. Rev. B* **101**, 245111 (2020).
42. T. Ideue, M. Hirayama, H. Taiko, T. Takahashi, M. Murase, T. Miyake, S. Murakami, T. Sasagawa, and Y. Iwasa, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **116**, 25530 (2019).
43. D. Rodriguez, A. A. Tsirlin, T. Biesner, T. Ueno, T. Takahashi, K. Kobayashi, M. Dressel, and E. Uykur, *Phys. Rev. B* **101**, 174104 (2020).
44. T. Doi, K. Nakao, and H. Kamimura, *J. Phys. Soc. Jpn* **28**, 36 (1970).
45. F. Tran and P. Blaha, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 226401 (2009).

46. F. Tran and P. Blaha, *Phys. Rev. B* **83**, 235118 (2011).
47. J. Heyd and G. E. Scuseria, *J. Chem. Phys.* **118**, 8207 (2003); Erratum *J. Chem. Phys.* **124**, 219906 (2006).
48. E. L. Ivchenko, *Optical Spectroscopy of Semiconductor Nanostructures*, Alpha Science Int., Harrow, UK (2005), Sect. 2.1.3.
49. Е. Л. Ивченко, Г. Е. Пикус, *Письма в ЖЭТФ* **27**, 640 (1978).
50. Н. С. Аверкиев, В. М. Аснин, А. А. Бакун, А. М. Данишевский, Е. Л. Ивченко, Г. Е. Пикус, А. А. Рогачев, *ФТП* **18**, 639 (1984).
51. S. S. Tsirkin, P. A. Puente, and I. Souza, *Phys. Rev. B* **97**, 035158 (2018).
52. S.C. Liebscher, M. K. Hagen, J. Hader, J. V. Moloney, and S. W. Koch, *Phys. Rev. B* **104**, 165201 (2021).
53. F. de Juan, A. G. Grushin, T. Morimoto, and J. E. Moore, *Nature Commun.* **8**, 15995 (2017).
54. Л. Е. Голуб, Е. Л. Ивченко, Б. З. Спивак, *Письма в ЖЭТФ* **105**, 744 (2017).
55. Н. В. Лепшенен, Е. Л. Ивченко, Л. Е. Голуб, *ЖЭТФ* **156**, 167 (2019).
56. Е. Л. Ивченко, Г. Е. Пикус, Ф в сб. *Проблемы современной физики* под ред. В. М. Тучкевича и В. Я. Френкеля, Наука, Москва (1980).
57. P. Blaha, K. Schwarz, F. Tran, R. Laskowski, G. K. H. Madsen, and L. D. Marks, *J. Chem. Phys.* **152**, 074101 (2020).
58. J. Sun, A. Ruzsinszky, and J. P. Perdew, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 036402 (2015).
59. F. Birch, *Phys. Rev.* **71**, 809 (1947).
60. F. D. Murnaghan, *Proceed. Nat. Acad. Sci.* **30**, 244 (1944).
61. P. Vinet, J. R. Smith, J. Ferrante, and J. H. Rose, *Phys. Rev. B* **35**, 1945 (1987).
62. R. Keller, W. B. Holzapfel, and H. Schulz, *Phys. Rev. B* **16**, 4404 (1977).