

## НАСЛІДКИ НИЗЬКОЕНЕРГЕТИЧНОЇ НЕПАРАБОЛІЧНОСТІ ЗАКОНІВ ДИСПЕРСІЇ ДЛЯ ФІЗИЧНИХ ПАРАМЕТРІВ ТА ПРОЯВУ НОВИХ ЕФЕКТІВ У СИЛЬНО АНІЗОТРОПНИХ КРИСТАЛАХ

Д. М. Берча<sup>1,2</sup>, Л. Ю. Хархаліс<sup>1</sup>, М. Шнайдер<sup>2</sup>, К. З. Руцанський<sup>1</sup>, І. В. Сліпучіна<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Інститут фізики і хімії твердого тіла, Ужгородський національний університет,  
вул. Волошина, 54, Ужгород, 88000, Україна

<sup>2</sup>Інститут фізики, Університет Жешува, Рейтана, 16а, 35–310, Жешув, Польща

(Отримано 28 вересня 2007 р.; в остаточному вигляді — 11 листопада 2008 р.)

Досліджено прояви низькоенергетичної непараболічності законів дисперсії у фізичних параметрах (спектрах оптичного поглинання та аномальній анізотропії ефективних мас) і нових ефектах (формування квазічастинок нового типу) в шаруватих кристалах  $\text{In}_4\text{Se}_3$  та  $\text{InSe}$ . Досліджено вплив зсувних деформацій та домішок упровадження на трансформацію низькоенергетичної непараболічності в кристалі  $\text{In}_4\text{Se}_3$ .

**Ключові слова:** сильно анізотропні кристали, низькоенергетична непараболічність, ефективні маси, зсувні деформації, домішки впровадження, зонна структура.

PACS number(s): 61.72.Bb, 71.15.Mb, 71.20.-b, 71.20.Nr, 78.20.Ci

### ВСТУП

Як відомо, важливою особливістю сильно анізотропних кристалів є суттєва анізотропія хімічного зв'язку, яка приводить до анізотропії енергетичного спектра носіїв, фононів, потенціалів розсіювання і, відповідно, до анізотропії фізичних властивостей. Однак виявляється, що можлива певна неузгодженість формальних критеріїв анізотропії кристала з анізотропією фізичних параметрів. З одного боку, ефекти сильної анізотропії можуть проявлятися у властивостях кристалів, які взагалі є слабо анізотропними утвореннями, якщо в їхніх комірках спостерігаються просторово витягнуті групи атомів — “ланцюжки” або “шари”. З іншого боку, в сильно анізотропних кристалах можлива реалізація аномальної поведінки таких фізичних параметрів, як ефективна маса. Як свідчать експериментальні факти, для гексагонального кристала  $\text{InSe}$  [1, 2], який виявляє фізичні властивості, притаманні шаруватим кристалом, у напрямку слабого зв'язку зафіксовано меншу ефективну масу, ніж у напрямку сильного зв'язку. На нашу думку, причини такої аномалії анізотропії ефективних мас у цьому кристалі, яка не корелює з анізотропією його хімічного зв'язку і не характерна для інших кристалів із вираженою шаруватою структурою, слід шукати в складній енергетичній структурі розгляданого кристала, а саме, в наявних у його законі дисперсії для електронів і дірок компонент хвильового вектора четвертого степеня з великими коефіцієнтами [3, 4]. Ця особливість закону дисперсії вже була виявлена в результаті розрахунків з перших принципів зонної структури [2, 4] як деформованого, так і недеформованого кристала  $\text{InSe}$ . Треба відзначити, що вперше такий закон дисперсії ми одержали для ромбічного кристала  $\text{In}_4\text{Se}_3$  [5, 6]. Щобільше, дослідження причин подібності зонних структур кристала  $\text{In}_4\text{Se}_3$  (природна непараболічність) та деформованого кристала  $\beta\text{-InSe}$  (індукована непараболічність) в околі основних екстремумів шляхом моделювання кристала  $\text{In}_4\text{Se}_3$  як

деформованого кристала  $\text{InSe}$  з вакансією привело нас до важливого висновку, що зонну структуру кристала  $\beta\text{-InSe}$  можна розглядати як первісну до зонної структури  $\text{In}_4\text{Se}_3$  [4]. Одержані закони дисперсії з низькоенергетичною непараболічністю, які характерні для шаруватого кристала  $\text{In}_4\text{Se}_3$ , добре пояснюють виявлені аномалії в його кінетичних, пружних та механічних властивостях, а також, як буде показано в нашій роботі, особливості, що проявляються в оптичних спектрах. Адже наявна додаткова смуга на краю власного поглинання кристала  $\text{In}_4\text{Se}_3$  [7] не обов'язково повинна мати екситонну чи домішкову природу, а може бути пов'язана з пікоподібною густиною станів, зумовленою нестандартним законом дисперсії, який містить четверті степені компонент хвильового вектора.

У цій статті, крім розгляду ефектів прояву низькоенергетичної непараболічності в аномальній поведінці анізотропії ефективних мас для гексагонального кристала  $\beta\text{-InSe}$  й аномалії краю оптичного поглинання для кристала  $\text{In}_4\text{Se}_3$ , ми також дослідили вплив зсувних деформацій на закони дисперсії для електронів та дірок в околі забороненої зони кристала  $\text{In}_4\text{Se}_3$ . Зміни, які виникають при врахуванні зсувних деформацій, дадуть змогу зрозуміти природу виявлених при розрахунках із перших принципів трансформацій низькоенергетичної непараболічності, викликаних інтеркальованою у вандерваальсівський простір кристала  $\text{In}_4\text{Se}_3$  домішкою. Для цього ж кристала проаналізовано можливості формування квазічастинок нового типу, які зумовлені низькоенергетичною непараболічністю.

### I. АНОМАЛІЯ АНІЗОТРОПІЇ ЕФЕКТИВНИХ МАС ЯК ПРОЯВ НИЗЬКОЕНЕРГЕТИЧНОЇ НЕПАРАБОЛІЧНОСТІ В КРИСТАЛІ $\beta\text{-InSe}$

Експериментальні факти [1, 2], які вказують на “аномальну” поведінку ефективних мас у гексагональному кристалі  $\text{InSe}$ , спонукали нас докладно до-

слідити його енергетичний спектр. У зв'язку з цим ми розраховували зонну структуру як деформованого, так і недеформованого гексагонального кристала  $\beta$ -InSe ( $D_{6h}^4$ ) та з використанням методу найменших квадратів підібрали таку аналітичну залежність,

$$E(k) = A + Bk^2 + Ck^4, \quad (1)$$

яка найточніше описує дисперсійні залежності в околі забороненої зони для основних напрямків  $\Gamma$ -K,  $\Gamma$ -M,  $\Gamma$ -A зони Бріллюена гексагональної системи і вказує на істотну роль у їх формуванні компонент хвильового вектора четвертого степеня  $k^4$  (див. таблицю 1). Таке дослідження дало змогу оцінити компоненти тензора ефективних мас електронів і дірок, які наведені в таблиці 1 (а) і (б). Одержана з перших принципів зонна структура кристала представлена в роботі [4].

напрямок	$\Gamma$ -K	$\Gamma$ -M	$\Gamma$ -A
B(eV)	327.88	116.85	10.51
C(eV)	-32720	-6017.45	-151.77
$B_{\text{parabolic}}$ (eV)	265.71	104.51	9.35
$\alpha^2$	$(\frac{4}{3})^2$	$\frac{4}{3}$	1
$\frac{m_{\Gamma-(K,M,A)}^{*c}}{m_0}$	0.015	0.028	0.0139

а)

напрямок	$\Gamma$ -K	$\Gamma$ -M	$\Gamma$ -A
B(eV)	28.15	-8.13	-11.41
C(eV)	-358.98	-169.26	152.49
$B_{\text{parabolic}}$ (eV)	-30.85	-9.44	-10.24
$\alpha^2$	$(\frac{4}{3})^2$	$\frac{4}{3}$	1
$\frac{m_{\Gamma-(K,M,A)}^{*v}}{m_0}$	0.131	0.321	0.0127

б)

Таблиця 1. Параметри закону дисперсії  $E(k) = A + Bk^2 + Ck^4$  для зони провідності (а) і валентної зони (б) в околі точки  $\Gamma$ ,  $m_{\Gamma-(K,M,A)}^*/m_0 = 3.8 (\frac{x}{x})^2 \alpha^2 / B_{\text{parabolic}}$ , де  $x = a$  для  $k_{\perp}$  і  $x = c$  для  $k_{\parallel}$ ;  $B_{\text{parabolic}}$  оцінено для  $E(k) = A + Bk^2$ .

Як впливає з таблиць, оцінені ефективні маси для  $B_{\text{parabolic}}$  (eV) мають найменші величини в  $\Gamma$ -A напрямку, тобто в напрямку слабого зв'язку. Ці висновки добре узгоджуються з результатами роботи [3]. Спостережуване в [3] зміщення екстремуму для  $\gamma$ -InSe в Z-H напрямку під тиском, виходячи з нашої інтерпретації, є результатом збільшення від'ємних коефіцієнтів при квадратичних членах компонент  $k$ -вектора і можливого зменшення коефіцієнтів при

вищих степенях. Наші першопринципні розрахунки зонної структури [4] для прикладеного тиску також указують на те, що форма вершини валентної зони  $\beta$ -InSe, а також  $\gamma$ -InSe [3], стає схожою на форму валентної зони і зони провідності кристала  $\text{In}_4\text{Se}_3$  в  $k_x$ -напрямку [4]. Отже, ми однозначно вияснили природу аномальної анізотропії ефективних мас для електронів і дірок кристала  $\beta$ -InSe, походження якої зумовлене наявністю в законах дисперсії четвертих ступенів хвильового вектора, тобто непараболічності. Встановлена різниця між анізотропією хімічного зв'язку та анізотропією фізичних параметрів приводить нас до нового розуміння поняття анізотропії ефективних мас у класично шаруватих кристалах.

Слід також відзначити, що закон дисперсії (1), який ми одержали в безспіновому випадку [4-6], при врахуванні спіну не змінюється. Це зв'язано з тим, що енергетичні стани в загальних точках зони Бріллюена в кристалах із центром симетрії [8,9], до яких належить кристал  $\text{In}_4\text{Se}_3$ , подвоюються без їх спінового розщеплення.

## II. ВПЛИВ ЗСУВНИХ ДЕФОРМАЦІЙ ТА ДОМШОК УПРОВАДЖЕННЯ НА ЗАКОНИ ДИСПЕРСІЇ КРИСТАЛІВ $\text{In}_4\text{Se}_3$

Дослідження впливу зсувних деформацій на трансформацію низькоенергетичної непараболічності зонного спектра в околі забороненої зони кристала  $\text{In}_4\text{Se}_3$  ми проводили в межах теоретико-групового аналізу в поєднанні з методом інваріантів Пікуса [10, 11]. Згідно з цим методом [11], секулярну матрицю, побудовану для одержання закону дисперсії в недеформованому кристалі  $\text{In}_4\text{Se}_3$ , доповнюємо аналогічними симетрійно-еквівалентними членами, зв'язаними з компонентами тензора деформації  $\tilde{\epsilon}$ . Відзначимо, що в межах  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -моделі взаємодіючих двох підзон (верхньої підзони валентної зони й нижньої підзони зони провідності) можна одержати низькоенергетичну непараболічність закону дисперсії тільки в напрямку  $k_x$  зони Бріллюена [4], що не узгоджується з нашими першопринципними розрахунками зонної структури кристала  $\text{In}_4\text{Se}_3$  [4]. Щоб відбулося таке узгодження, ми в [4] розширили до чотирьох кількість взаємодіючих зон, проте в напрямку  $k_z$ , як і в обчисленнях із перших принципів, одержуємо параболічний закон дисперсії. Покажемо, що зсувні деформації в моделі двох взаємодіючих підзон і в цьому напрямку можуть привести до появи низькоенергетичної непараболічності. Це пов'язано з тим, що зсувні деформації  $\epsilon_{xz}$  приводять до додаткових членів у секулярній матриці і, як наслідок, до зміщення екстремумів  $E(\mathbf{k})$  в близьке оточення точки  $\Gamma$ . У результаті маємо такий закон дисперсії [12]:

$$E_{\pm}(k) \sim \frac{E_g}{2} \pm \frac{E_g}{2} \left( 1 + \frac{2b^2 k_z^4}{E_g^2} + \frac{2(f^2 \epsilon_{xz}^2 - |b| E_g) k_z^2}{E_g^2} \right). \quad (2)$$

Одержані результати ми використали для інтерпретації зміни низькоенергетичної непараболічності в інтеркальованих кристалах  $\text{In}_4\text{Se}_3$ . Наявність чужорідних атомів у вандерваальсівській щільності в шаруватих матеріалах приводить до суттєвого спотворення структури кристала в околі дефекту та деформації його ґратки в цілому, а це своєю чергою приводить до істотних змін у зонному спектрі кристала-матриці. Пов'язуючи виниклі деформаційні ефекти в спектрі кристала з деформаціями зсуву, можна передбачити

зміни топології законів дисперсії носіїв заряду з низькоенергетичною непараболічністю, зумовленою домішками впровадження. Це підтверджується нашими першопринципними розрахунками [12]. На рис. 1 наведено розраховані з перших принципів у надкомірковому наближенні зонні спектри кристала  $\text{In}_4\text{Se}_3$ , інтеркальованого домішками міді з концентраціями  $\sim 3.57\%$  (елементарна комірка містить 29 атомів, (а)) та  $\sim 1.79\%$  (модель надкомірки  $1 \times 1 \times 2 \text{ In}_4\text{Se}_3:\text{Cu}$ , (б)).

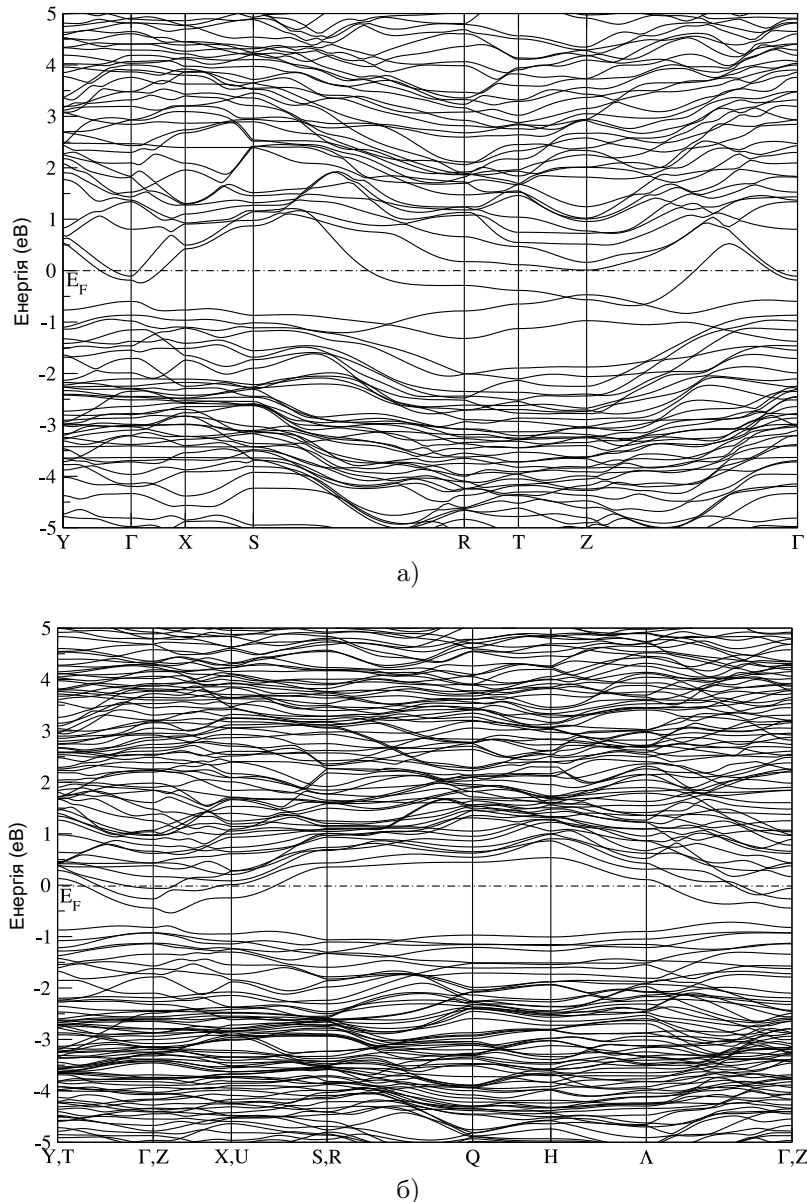


Рис. 1. Зонний спектр  $\text{In}_4\text{Se}_3:\text{Cu}$  при концентрації міді 3.57% (а) і концентрації міді 1.79% (б).

Як впливає із цих результатів, відбувається суттєва зміна топології енергетичного спектра в околі точки  $\Gamma$ , яка проявляється у трансформації непараболічності й у зміні енергетичного положення додаткової долини в напрямку  $\Gamma$ -Z. При концентрації домішки міді, рівній 3.57%, наявне перекриття станів зони провід-

ності та валентної зони в околі забороненої зони, що приводить до появи металічних властивостей системи згідно з результатами експериментальних робіт [13]. Отже, з одержаних результатів *ab initio* досліджень інтеркальованого міддю  $\text{In}_4\text{Se}_3$  можна робити висновки про те, що істотні деформації локальної структури

дефекту при введенні в міжшаровий простір кристала домішки Cu є основною причиною зміни низькоенергетичної непараболічності в інтеркальованому матеріалі.

### III. ВПЛИВ НИЗЬКОЕНЕРГЕТИЧНОЇ НЕПАРАБОЛІЧНОСТІ НА ОПТИЧНІ ПАРАМЕТРИ КРИСТАЛА $\text{In}_4\text{Se}_3$

Як відомо, спектри поглинання та відбивання для кристалів  $\text{InSe}$  та  $\text{In}_4\text{Se}_3$  характеризуються складною й сильно поляризованою структурою. Для  $\text{In}_4\text{Se}_3$  виявлено додаткове поглинання у вигляді смуги з різко вираженим максимумом при енергії 0.72–0.74 eV [7], природа якого до кінця залишилася не в'ясною. Не відкидаючи екситонної природи піків, яка очевидна, особливо для кристала  $\text{InSe}$ , не можна ігнорувати вплив низькоенергетичної непараболічності та пікоподібної густини станів на форму та положення цих піків. Оскільки інтенсивність піків сильно залежить від взаємного розташування енергії зон і, відповідно,

від форми зон, а також визначається комбінованою густиною станів, то слід очікувати, що оптичні характеристики для кристала  $\text{In}_4\text{Se}_3$  будуть виявляти особливості завдяки нестандартним дисперсійним залежностям в околі забороненої зони.

На рис. 2 представлені проведені *ab initio* розрахунки уявної частини діелектричної проникності  $\varepsilon_2(E)$  для кристала  $\text{In}_4\text{Se}_3$  для різних напрямків поляризації світла. Як видно, одержані спектри  $\varepsilon_2(E)$  виявляють структуру з незначними осциляціями піків в області енергій  $\sim 1$ –7.5 eV, що в основному корелює з експериментальними даними. При поляризації світла  $\mathbf{E} \parallel \mathbf{a}$  в напрямку слабого зв'язку одержано інтенсивний пік на краю зони. Ця особливість пояснюється пікоподібною густиною станів, яка реалізується в кристалі  $\text{In}_4\text{Se}_3$  завдяки низькоенергетичній непараболічності закону дисперсії. Як ми дослідили в роботах [6, 14], при енергіях, де переважають четверті степені, функція густини станів спадає за законом  $E^{-\frac{1}{4}}$  для співвідношення параметрів, що відповідають реальному закону дисперсії для кристала  $\text{In}_4\text{Se}_3$ .

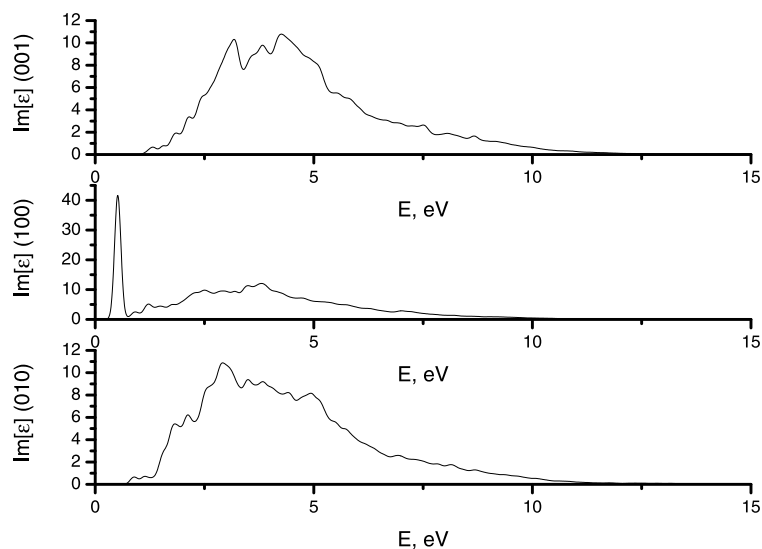


Рис. 2. Залежність уявної частини діелектричної проникності  $\varepsilon_2(E)$  від енергії для кристала  $\text{In}_4\text{Se}_3$ .

### IV. МОЖЛИВІСТЬ РЕАЛІЗАЦІЇ СТАЦІОНАРНИХ СОЛІТОНІВ У КРИСТАЛІ $\text{In}_4\text{Se}_3$

Традиційно солітони у фізиці конденсованого стану вивчали на основі нелінійних диференціальних рівнянь із просторовими похідними другого порядку. У цій статті ми показали, що завдяки незвичайному закону дисперсії (1) у кристалі  $\text{In}_4\text{Se}_3$  в наближенні ефективних мас із урахуванням електрон-фононої взаємодії в межах довгохвильового наближення можна одержати нелінійне рівняння Шредингера з просторовими похідними четвертого порядку

$$-B_i \frac{\partial^2 \varphi(x)}{\partial x^2} + C_i \frac{\partial^4 \varphi(x)}{\partial x^4} + G|\varphi(x)|^2 \varphi(x) = \varepsilon \varphi(x), \quad (3)$$

розв'язком якого можуть бути при певних параметрах закону дисперсії відокремлені просторово-

локалізовані збудження — солітони. Параметр  $G = \frac{\sigma^2}{\lambda a^3}$  описуватиме нелінійність середовища. Вибираючи пробну функцію, яку вперше отримано в роботі [15], а потім використав Косевич у [16], у вигляді

$$\varphi(x) = A \frac{\text{sh}(\kappa x)}{\text{ch}^2(\kappa x)} \quad (4)$$

і підставляючи її у (3), легко бачити, що це рівняння має розв'язок, якщо  $\varepsilon = \frac{11}{100} \frac{B_i^2}{C_i}$ ,  $\kappa = \sqrt{\frac{-B_i}{10C_i}}$ ,  $A = \sqrt{\frac{6}{5} \frac{B_i^2}{C_i G}}$ . Аналіз функції (4) для різних  $B_i$  і  $C_i$ , які є параметрами закону дисперсії (1) і значення яких наведені в роботах [6, 14], показує, що ця функція (4) має гострий пік і швидко спадає при великих значеннях  $x$  (рис. 3). Отже, її вигляд визначається властивостями закону дисперсії. Експериментально соліто-

ни можуть проявитися в явищах індукованого випромінювання або спектрах фотопоглинання при певних значеннях енергії.

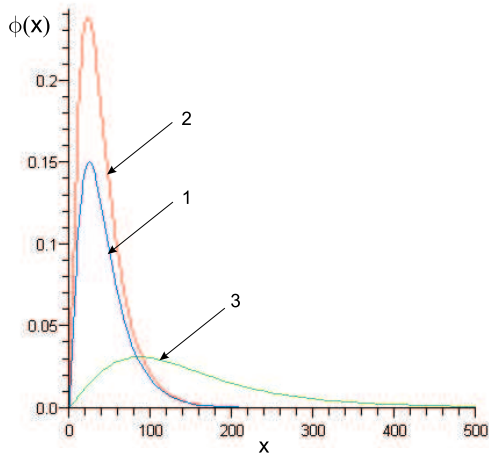


Рис. 3. Функція  $\varphi(x)$  для різних параметрів  $B_i$  і  $C_i$  закону дисперсії (1) для кристала  $\text{In}_4\text{Se}_3$  1) —  $B_1 = -5.7$  eV,  $C_1 = 479.8$  eV ; 2) —  $B_2 = -13$  eV,  $C_2 = 888.0$  eV ; 3) —  $B_3 = -3.1$  eV,  $C_3 = 2957.0$  eV .

## V. ВИСНОВКИ

Однозначно встановлено природу аномалії анізотропії ефективних мас у кристалі  $\text{InSe}$  та аномалії краю оптичного поглинання в кристалі  $\text{In}_4\text{Se}_3$ , яка обумовлена наявністю в законі дисперсії для електронів і дірок компонент хвильового вектора четвертого степеня. Показано, що зсувні деформації істотно впливають на трансформацію низькоенергетичної непараболічності в кристалі  $\text{In}_4\text{Se}_3$  з неоднорідним зв'язком. Ці результати добре пояснюють ті зміни низькоенергетичної непараболічності, які впливають із першопринципних досліджень, в інтеркальованих кристалах  $\text{In}_4\text{Se}_3$ . Відзначено, що суттєві деформації локальної структури дефекту та утворення “ковалентних містків” при введенні в міжшаровий простір кристала домішки  $\text{Cu}$  є основною причиною зміни низькоенергетичної непараболічності в інтеркальованому матеріалі. Показано, що в кристалі  $\text{In}_4\text{Se}_3$  при певних співвідношеннях параметрів закону дисперсії можуть реалізуватися особливі квазічастинки — солітони, зумовлені низькоенергетичною непараболічністю в законі дисперсії для носіїв заряду.

- [1] Ch. Ferrer-Roca, A. Segura, M. V. Andres, J. Pellicer, V. Munoz, *Phys. Rev. B* **55**, 6981 (1997).
- [2] A. Segura *et al.*, *Phys. Status Solidi B* **235**, 267 (2003).
- [3] D. Olguin, A. Cantarero, C. Ulrich, K. Syassen, *Phys. Status Solidi B* **235**, 256 (2003).
- [4] M. Sznajder, K. Z. Rushchanskii, L. Yu. Kharkhalis, D. M. Bercha, *Phys. Status Solidi B* **243**, 592 (2006).
- [5] Д. М. Берча, О. Б. Митин, Л. Ю. Хархалис, А. И. Берча, *Физ. тверд. тела* **37**, 3233 (1995).
- [6] Д. М. Берча, Л. Ю. Хархалис, А. И. Берча, М. Шнайдер, *Физ. техн. полупр.* **31**, 1299 (1997).
- [7] D. M. Bercha, A. N. Borets, I. M. Stakhira, K. D. Tovstyuk, *Phys. Status Solidi B* **21**, 769 (1967).
- [8] R. J. Elliot, *Phys. Rev.* **96**, 266 (1954).
- [9] R. J. Elliot, *Phys. Rev.* **96**, 280 (1954).
- [10] D. M. Bercha, K. Z. Rushchanskii, I. V. Slipukhina, I. V. Bercha, *Condens. Matter Phys.* **6**, 229 (2003).
- [11] Г. Е. Пикус, *Журн. эксп. теор. физ.* **41**, 1258 (1961).
- [12] І. В. Сліпукхіна, Л. Ю. Хархаліс, І. В. Берча, *Наук. вісн. Ужгород. ун-ту. Сер. фіз. вип.* **19**, 14 (2006).
- [13] Л. С. Демків, Т. М. Демків., В. П. Савчин, І. М. Стахіра, *Журн. фіз. досл.* **2**, 536 (1998).
- [14] Д. М. Берча, М. Шнайдер, Л. Ю. Хархаліс, А. І. Берча, *Вісн. Ужгород. ун-ту. Сер. фіз., вип.* **2**, 88 (1998).
- [15] V. Vuyyak, *Phys. Rev. E* **52**, 1156 (1995).
- [16] А. М. Косевич, *Физ. низк. темп.* **26**, 620 (2000).

**CONSEQUENCES OF LOW-ENERGY NON-PARABOLICITY  
OF THE DISPERSION LAWS FOR PHYSICAL PARAMETERS AND MANIFESTATION  
OF NEW EFFECTS IN STRONGLY ANISOTROPIC CRYSTALS**

D. M. Bercha<sup>1,2</sup>, L. Yu. Kharkhalis<sup>1</sup>, M. Sznajder<sup>2</sup>, K. Z. Rushchanskii<sup>1</sup>, I. V. Slipukhina<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Physics and Chemistry of Solid State, Uzhgorod National University, Uzhgorod, Ukraine*

<sup>2</sup>*Institute of Physics, University of Rzeszów, Rejtana 16a, 35-310 Rzeszów, Poland*

*bercha@univ.rzeszow.pl, lkarkhalis@gmail.com*

The effects of low-energy non-parabolicity are studied in the anomalous behavior of the effective mass anisotropy in a hexagonal  $\beta$ -InSe and in the anomaly of the optical absorption edge of an orthorhombic In<sub>4</sub>Se<sub>3</sub> crystal. The influence of shear strains on the dispersion laws of electrons and holes in the vicinity of band gap of the In<sub>4</sub>Se<sub>3</sub> crystal is studied. In the framework of two-interacting-band  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -approach it is established that the shear deformations  $\varepsilon_{xz}$  shift the extrema of  $E(\mathbf{k})$  into the close vicinity of  $\Gamma$ -point leading to the low-energy non-parabolicity in  $k_z$ -direction. The changes which appear due to accounting for the shear deformations allow one to understand the nature of the *ab initio* observed transformations of low-energy non-parabolicity induced by an impurity intercalated into the van der Waals space of the In<sub>4</sub>Se<sub>3</sub> crystal. For the latter crystal possibilities of a new-type quasiparticles formation caused by low-energy non-parabolicity are analyzed.