

16,12,03

Атомная структура и энергия когезии кластеров ZnSe и CdSe

© Л.И. Овсянникова

Институт проблем материаловедения им. И.Н. Францевича НАН Украины,
Киев, Украина

E-mail: avilon57@ukr.net

(Поступила в Редакцию 29 ноября 2018 г.

В окончательной редакции 29 ноября 2018 г.

Принята к публикации 5 декабря 2018 г.)

Проведены первопринципные расчеты атомной и электронной структуры фуллереноподобных кластеров Zn_nSe_n и Cd_nSe_n для $n = 12, 36, 48, 60$. Впервые построена модель двухслойных фуллереноподобных кластеров $(ZnSe)_{60}$ и $(CdSe)_{60}$ со смешанными sp^2/sp^3 -связями. *Ab initio* расчеты проводились в рамках теории функционала электронной плотности и гибридного функционала B3LYP. Проведена оценка стабильности и ширины энергетической щели кластеров в зависимости от количества атомов в кластере и его геометрии. Показано, что в процессе релаксации двухслойных атомных кластеров $(ZnSe)_{60}$ и $(CdSe)_{60}$ со смешанными sp^2/sp^3 -связями размером 1.7–1.8 nm происходит отщепление наружного слоя.

DOI: 10.21883/FTT.2019.04.47431.331

1. Введение

Полупроводники A^2B^6 привлекают большой интерес в связи с их широким применением в оптоэлектронных устройствах для детектирования и стимуляции излучения в инфракрасной и видимой областях спектра. В частности, селенид цинка — ZnSe — является ключевым материалом для изготовления высокоомощных лазеров, инфракрасных окон, линз и призм вследствие очень низкого коэффициента поглощения в интервале длин волн 0.63–18 μm . Прогресс в конструировании светоизлучающих диодов на основе ZnSe для зелено-голубой области спектра возродил интерес к фундаментальным свойствам и экспериментальным и теоретическим исследованиям атомных, геометрических и электронных свойств этого материала.

Наряду с твердотельными широкое применение находят полупроводниковые нанокристаллы — квантовые точки (КТ) на основе прямозонных полупроводников A^2B^6 (ZnSe, CdSe, CdS и т.д.) [1]. Нанокристаллы практически не подвержены деградации по сравнению с органическими люминесцентными материалами и имеют высокий квантовый выход люминесценции. В последнее время можно синтезировать нанокристаллы (КТ) размерами несколько нанометров в диаметре, состоящие из 10^3 – 10^5 атомов. Такие КТ характеризуются дискретным энергетическим спектром, подобным атомному, шириной запрещенной зоны и энергией люминесценции, меняющимися с их размерами. При использовании масштабируемой процедуры синтеза на основе одного и того же материала могут быть получены нанокристаллы с различными спектрами излучения, перекрывающими всю видимую область спектра, поскольку эмиссионные свойства нанокристаллов в первую очередь определяются эффектом размерного квантования [2].

Квантовые точки могут существовать как в виде ядра, так и в виде гетероструктур типа ядро–оболочка, когда

флуоресцирующие ядра КТ покрывают слоем более широкозонного полупроводника со схожими структурой и составом, при этом пассивируются поверхностные дефектные состояния ядер КТ. Были синтезированы CdSe/nCdS КТ с диаметром CdSe ядра КТ 3.03 nm [3]. В [4] сообщается о исследовании пленок CdSe, CdTe, в которых наночастицы представляют собой почти плотноупакованные сферы диаметром 3–4 nm.

Возможные варианты геометрии КТ не ограничиваются лишь сферическими наночастицами, и в последнее время весьма широкий интерес вызывают полупроводниковые нанокристаллы планарной геометрии (2D-нанокристаллы, нанопластины, нанодиски, наносвитки) [5]. Замечено, что при сворачивании нанопластины CdSe в структуры винтовой формы происходит красный сдвиг максимума их фотолюминесценции, обусловленный возникновением внутренних полей, связанных с механическими напряжениями при скручивании [6].

Хотя распространенная система для квантовых точек — халькогениды кадмия (CdS, CdSe), но они содержат токсичные соединения. К системам с такими же характеристиками и не содержащих токсичных элементов относится широкозонный ZnSe, который излучает в фиолетовой области. Для управления диапазоном излучения квантовых точек их легируют 3d-металлами переходных групп (Mn, Fe, Co, Ni, Cu). Поэтому свойства квантовых точек ZnSe, CdSe и кластеров размером в десятки и сотни атомов на основе этих материалов представляют огромный интерес и являются объектом компьютерного моделирования [7,8].

Целью настоящей работы является исследование средствами компьютерного материаловедения структурных, электронных и когезионных свойств изолированных фуллереноподобных кластеров на основе прямозонных полупроводников A^2B^6 : ZnSe, CdSe в зависимости от их размера, геометрии и выбора базовой модели для дальнейшего исследования свойств этих кластеров при легировании 3d-металлами.

2. Модель и метод исследования

Для исследования электронных и когезионных свойств изолированных кластеров на основе прямозонных полупроводников A^2B^6 первопринципными квантово-химическими методами мы предлагаем использовать фуллереноподобные (ФП) модели кластеров размером до 2 nm. ФП-модели успешно применялись при исследовании поведения примеси Cd в Zn(Cd)O сплавах и взаимодействия собственных дефектов с примесью Al в решетке ZnO [9–11]. Мы ранее установили, что $A^{II}B^{VI}$ полупроводниковые соединения проявляют тенденцию формировать фуллереноподобные структуры [12]. В таких структурах, энергия когезии меньше чем для основных твердотельных структур. Также, энергия когезии увеличивается с ростом числа атомов в кластере, таким образом большие кластеры устойчивее, чем более маленькие. Хотя нет полной ясности в наблюдаемой тенденции сокращения ширины запрещенной зоны с увеличением размера кластера, но значение энергии запрещенной зоны для кластеров, зависит не только от размера кластера — на это могут повлиять и другие факторы — такие как геометрия [13,14].

Для определения размерной зависимости энергии когезии кластеров ZnSe, CdSe нами была проведена сравнительная оценка стабильности ФП $(ZnSe)_n$, $(CdSe)_n$ кластеров ($n = 12, 36, 48, 60$). Эти кластеры в силу их кубического типа симметрии могут служить структурной единицей цеолитоподобных периодических структур [15,16]. Кластеры с двумя вложенными слоями — онион $Zn_{12}Se_{12}@Zn_{48}Se_{48}$ и сферический $(ZnSe)_{60}$ кластер со смешанным sp_3/sp_2 -типом связи и изоэлектронные им $Cd_{12}Se_{12}@Cd_{48}Se_{48}$ и $(CdSe)_{60}$ имеют одинаковое число атомов и построены для исследования свойств кластера от его геометрии, а также исследования поведения поверхностного слоя кластеров в процессе их релаксации.

При построении моделей сферических кластеров можно использовать структурные фрагменты известных кристаллических модификаций исследуемых веществ. Например, фрагменты алмаза и лонсдейлита были использованы для построения модели частиц икосаэдрического наноалмаза в [17,18], в которых локальное окружение атомов углерода практически не отличалось от того, что имеет место в алмазе, а в центре модели располагался фуллерен C_{20} . Мы использовали подход, изложенный в [17,18] для построения модели $(ZnSe)_{60}$ и $(CdSe)_{60}$ кластеров со смешанными sp^3/sp^2 -связями (рис. 1).

Модели ФП $(ZnSe)_n$ кластеров при $n = 12, 36, 48$ представлены на рис. 2. Кластер $(ZnSe)_{12}$ симметрии T_h образован 6 квадратами и 8 гексагонами, где каждый атом цинка имеет окружение из трех атомов селена и наоборот. Особенность кластера $(ZnSe)_{12}$ в том, что он может служить структурной единицей периодических цеолитоподобных структур с кубической решеткой, где все атомы объединены sp^3 -связями [15,16]. Кластер $(ZnSe)_{48}$ симметрии T_h имеет форму тетраэдра и состоит из 6 квадратов, расположенных по вершинам тетраэдра,

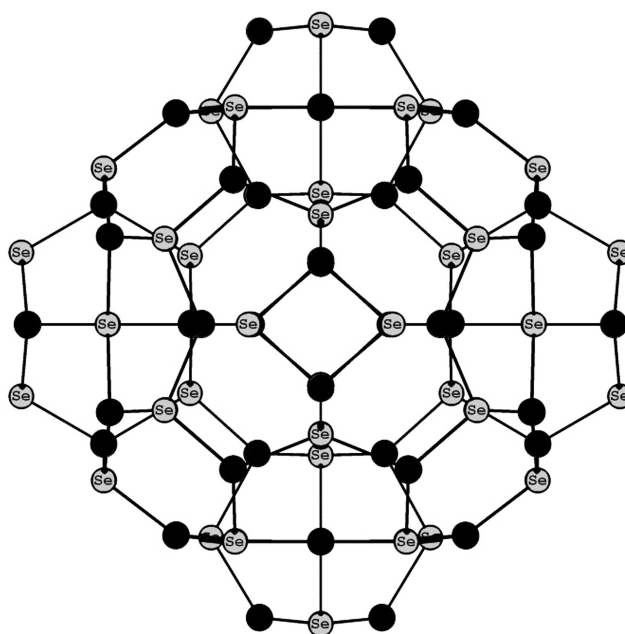


Рис. 1. Исходная модель $(ZnSe)_{60}$ и $(CdSe)_{60}$ кластеров со смешанными sp^2/sp^3 -связями, где темные шарики — Me (Zn, Cd), светлые шарики — Se.

и 40 гексагонов (шестиугольных колец), объединенных в 8 плоских фрагментов из 5 гексагонов каждый.

Модели ониона $Zn_{12}Se_{12}@Zn_{48}Se_{48}$ и $(ZnSe)_{60}$ кластера со смешанными sp^2/sp^3 -связями представлены на рис. 3. Онион построен на основе полого ФП кластера $(ZnSe)_{12}$ вложенного внутрь кластера $(ZnSe)_{48}$ описанных выше. Модель $(ZnSe)_{60}$ кластера построена на основе ядра из кластера $(ZnSe)_{12}$. При построении наружного слоя были использованы структурные фрагменты ZnSe структуры сфалерита. Ядро декорировано структурными фрагментами таким образом, что каждый атом ядра является местом роста следующего сфалеритоподобного слоя. В полученной частице с двухслойной структурой $(ZnSe)_{60}$, из 120 атомов ее составляющих, 48 внутренних атомов объединены sp^3 -связями, а 72 поверхностных атома sp^2 -связями (соотношение числа атомов с sp^2/sp^3 -связями составляет 72/48). Предполагается, что данная методика позволит построение модели частицы с многослойной структурой.

Модели $(CdSe)_n$ кластеров для $n = 12, 36, 48, 60$ построены аналогично вышеописанным $(ZnSe)_n$ кластерам при $n = 12, 36, 48, 60$ и представлены на рис. 2, 4.

Оптимизированная геометрия, полная энергия, электронная структура, распределение электронной плотности кластеров, рассчитаны в рамках метода RHF и теории функционала электронной плотности DFT с гибридным функционалом B3LYP и базисным набором MINI [19]. Гибридный функционал с точным обменным взаимодействием, рассчитанным методом Хартри–Фока, обеспечивает алгоритм улучшения предсказания многих свойств кластеров, таких как энергия атомизации, длина

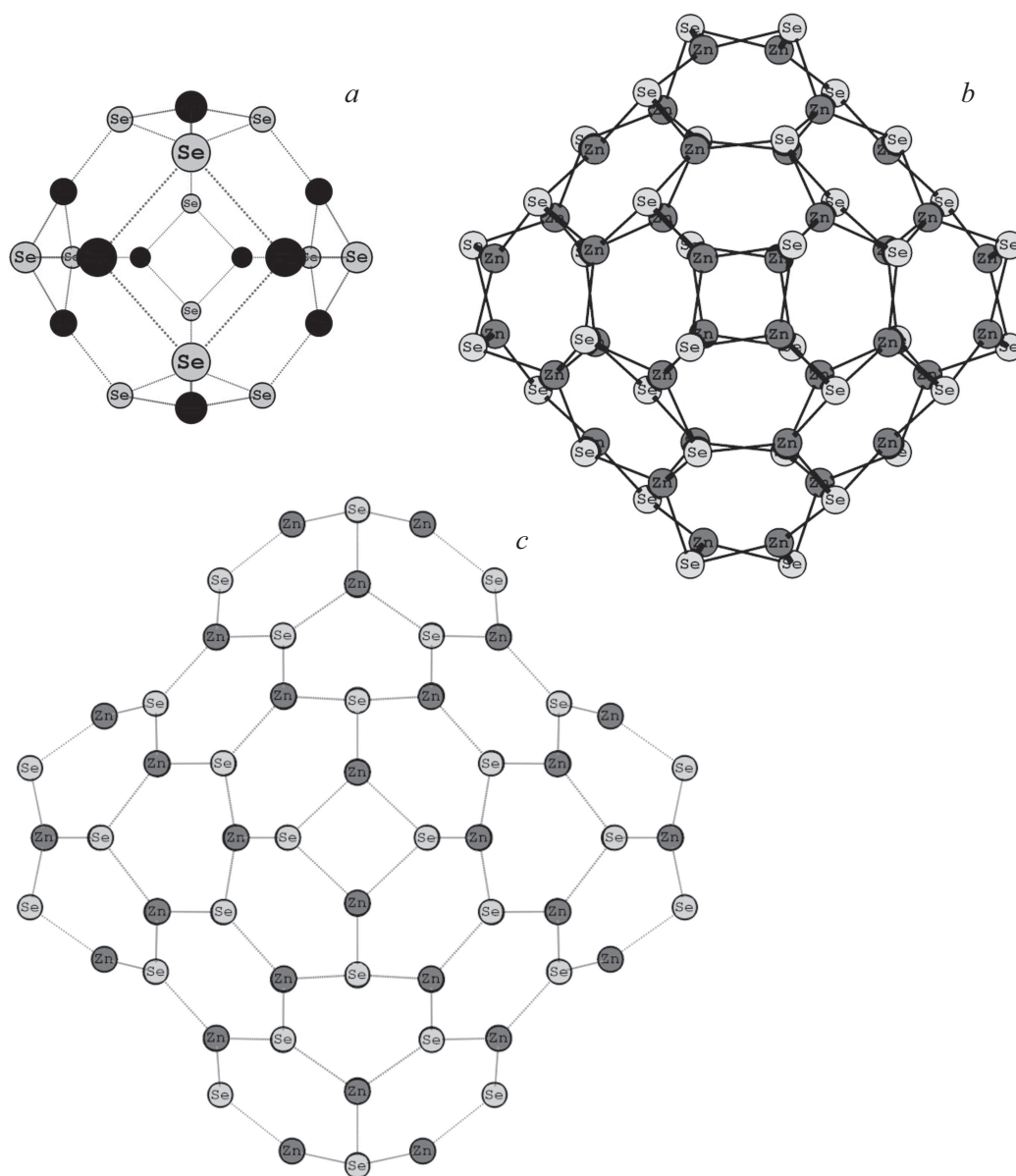


Рис. 2. Оптимизированные геометрии ФП кластеров Me_nSe_n : $n = 12$ (a), $n = 36$ (b), $n = 48$ (c), где темные шарики — Me (Zn, Cd), светлые шарики — Se.

химических связей, частоты колебаний. Энергия когезии на пару атомов рассчитывалась как полная энергия кластера за вычетом энергии удаленных в бесконечность составляющих его атомов без учета нулевых колебаний деленная на число атомных пар.

При выполнении расчетов были использованы: комплекс программ GAMESS'09 [20], программы визуализации расчетов ChemCraft и Molekel 5.4 [21].

3. Обсуждение вычислительного эксперимента

Результатами расчетов явились оптимизированная геометрия и электронная структура исследуемых объек-

тов. Результаты расчета электронной структуры, энергии когезии в пересчете на атомную пару Zn–Se и Cd–Se представлены в табл. 1 и 2 соответственно. Зависимость энергии когезии и ширины энергетической щели в зависимости от размера и геометрии кластера представлены на рис. 5. Вычисления показали, что ширина энергетической щели уменьшается с увеличением размера кластера, а стабильность кластеров (энергия когезии) возрастает с увеличением размера кластера.

Для структур на основе ZnSe наиболее стабильным оказался кластер $Zn_{48}Se_{48}$. Онион $Zn_{12}Se_{12}@Zn_{48}Se_{48}$, близок к нему, но все же менее стабилен чем $Zn_{48}Se_{48}$ (на 0.007 eV на пару Zn–Se атомов). Сферический $(ZnSe)_{60}$ оказался метастабильным по отношению к ониону $Zn_{12}Se_{12}@Zn_{48}Se_{48}$. Длина связи Zn–Se в 6-членном

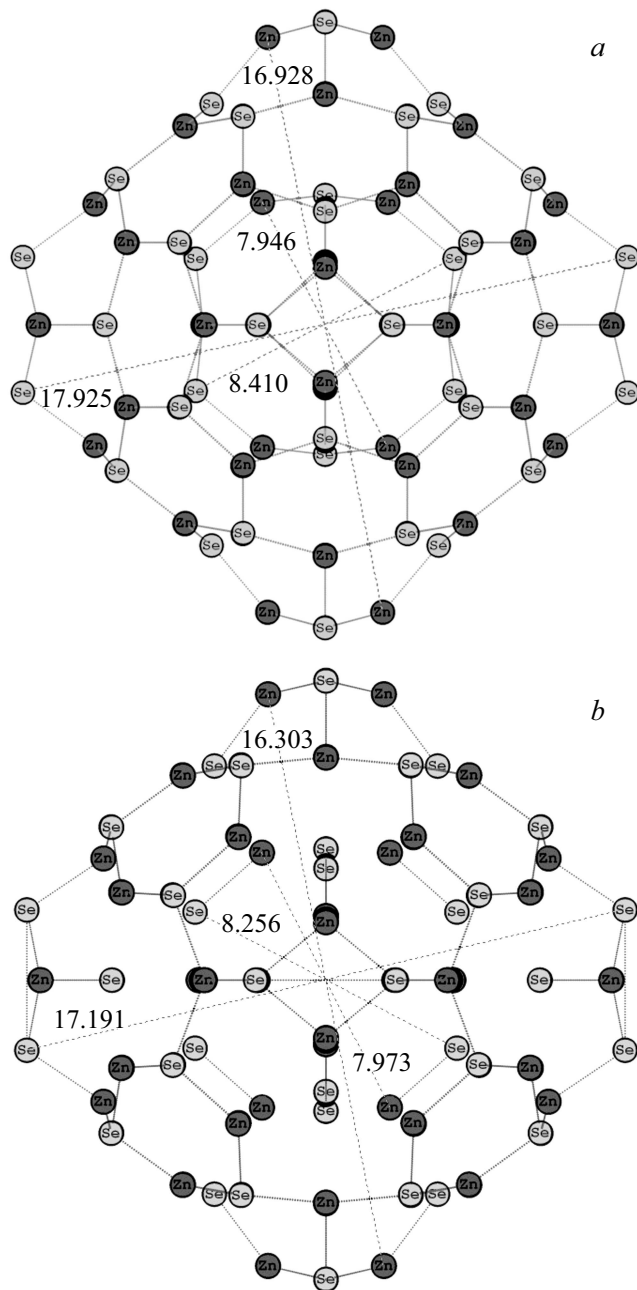


Рис. 3. Геометрия кластеров ZnSe после релаксации: (а) иона $Zn_{12}Se_{12}@Zn_{48}Se_{48}$; (б) кластера $Zn_{60}Se_{60}$ со смешанным sp^2/sp^3 -типом связи. Размер между центрами атомов показан в Å.

кольце исследованных кластеров 0.243–0.256 nm коррелирует с экспериментальными данными [22] длиной связи 0.2442 nm в твердотельном ZnSe структуры сфалерита при постоянной решетке 0.5668 nm. Анализ исследования кластеров Zn_nSe_n показал, что наиболее близок к твердотельному ZnSe кластер $Zn_{48}Se_{48}$, у которого длина связи 0.243–0.246 nm близка длине связи в твердотельном ZnSe структуры сфалерита 0.2442 nm и ширина энергетической щели $E_g = 2.33$ eV при $E_g = 2.82$ eV у твердотельного ZnSe.

Для структур на основе CdSe наиболее стабильным оказался сферический $(CdSe)_{60}$ кластер со смешанными sp^2/sp^3 -связями, у которого энергия когезии на пару атомов Cd–Se равна 3.424 eV. Ион $Cd_{12}Se_{12}@Cd_{48}Se_{48}$, близок к нему, его энергия когезии на пару атомов Cd–Se равна 3.41 eV. Длина связи Cd–Se в шестичленном кольце исследованных кластеров 0.262–0.277 коррелирует с экспериментальными данными [22] длиной связи в твердотельном CdSe структуры сфалерита 0.261 nm при постоянной решетки

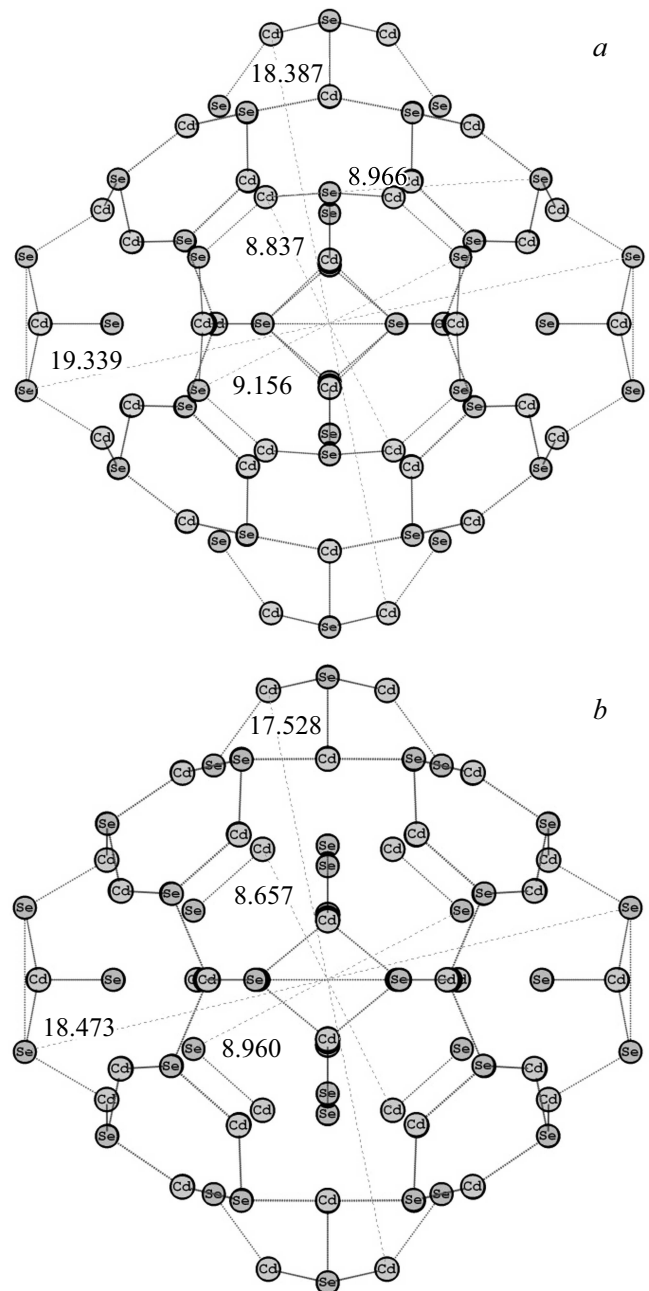


Рис. 4. Геометрия кластеров CdSe после релаксации: (а) иона $Cd_{12}Se_{12}@Cd_{48}Se_{48}$; (б) кластера $Cd_{60}Se_{60}$ со смешанным sp^2/sp^3 -типом связи. Размер между центрами атомов показан в Å.

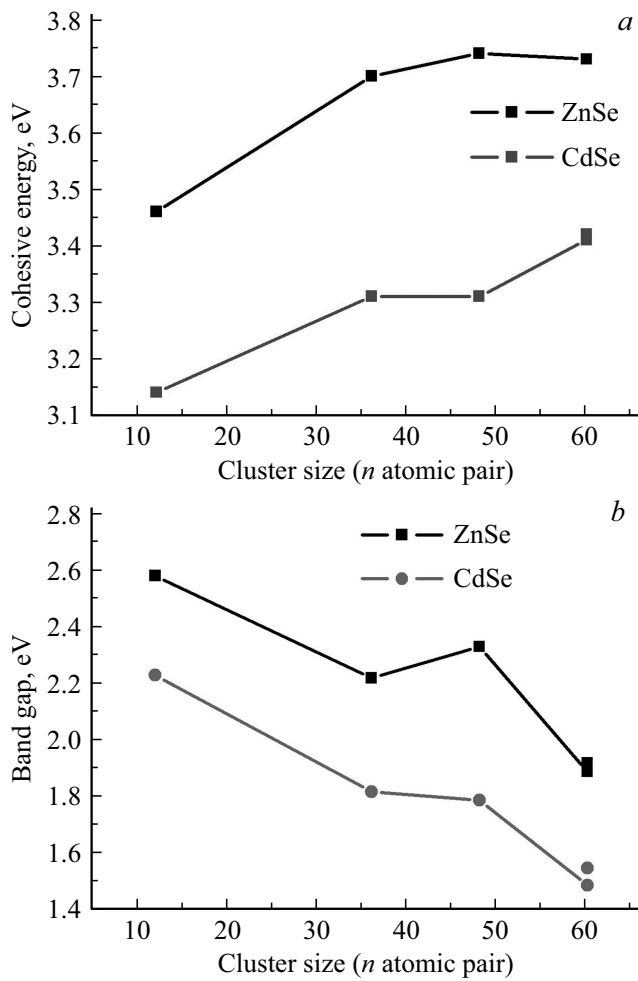


Рис. 5. Зависимость энергии когезии (а) и ширины запрещенной щели (б) кластеров $(\text{ZnSe})_n$ и $(\text{CdSe})_n$ ($n = 12, 36, 48, 60$) от размера кластера (числа Zn–Se, Cd–Se атомных пар в кластере).

0.6052 nm. У кластера $\text{Cd}_{48}\text{Se}_{48}$ длина связи в пределах 0.2624–0.267 nm. Наиболее соответствует твердотельному CdSe кластер $\text{Cd}_{48}\text{Se}_{48}$, у которого длина связи 0.262–0.267 nm близка длине связи в твердотельном CdSe структуры сфалерита 0.261 nm и ширина энергетической щели $E_g = 1.79$ eV при $E_g = 1.74$ eV у твердотельного CdSe.

Анализ длины связи, размера кластера между центрами атомов и расстояния между поверхностным и внутренним слоями в онионе $\text{Zn}_{12}\text{Se}_{12}@\text{Zn}_{48}\text{Se}_{48}$, сферическом $(\text{ZnSe})_{60}$, а также онионе $\text{Cd}_{12}\text{Se}_{12}@\text{Cd}_{48}\text{Se}_{48}$ и сферическом $(\text{CdSe})_{60}$ представлен в табл. 1, 2 и на рис. 3, 4.

В процессе поиска равновесной геометрии в онионе $\text{Zn}_{12}\text{Se}_{12}@\text{Zn}_{48}\text{Se}_{48}$ длина связи несущественно увеличилась (с 0.2434–0.2466 nm до 0.249–0.2503 nm), расстояние между слоями после релаксации составило 0.3195–0.3314 nm. Таким образом, структура ониона сохранилась, что видно и на карте распределения электронной плотности (рис. 6). В кластере $(\text{ZnSe})_{60}$

в процессе оптимизации геометрии длина связи во внутреннем и наружном слое практически не изменилась. Связи между атомами внутреннего и наружного слоя удлиняются, происходит почти расслоение кластера на два слоя. Расстояние между оболочками составило 0.2765–0.2968 nm, что значительно больше длины связи в твердотельной структуре (0.243 nm), но меньше, чем расстояние между слоями в онионе (0.33 nm). Исследование расчета сферического $(\text{ZnSe})_{60}$ кластера показало, что в процессе оптимизации связи между атомами внутреннего и наружного слоя удлиняются, происходит почти расслоение кластера на два слоя.

Аналогичный анализ для кластеров CdSe показал, что после оптимизации онион $\text{Cd}_{12}\text{Se}_{12}@\text{Cd}_{48}\text{Se}_{48}$ сохраняет свою структуру, расстояние между слоями равно 0.318–0.336 nm. В кластере $(\text{CdSe})_{60}$ со смешанным типом связи sp^2/sp^3 -расстояние между слоями после оптимизации геометрии увеличивается и становится равно 0.2876–0.2979 nm, что значительно больше длины связи

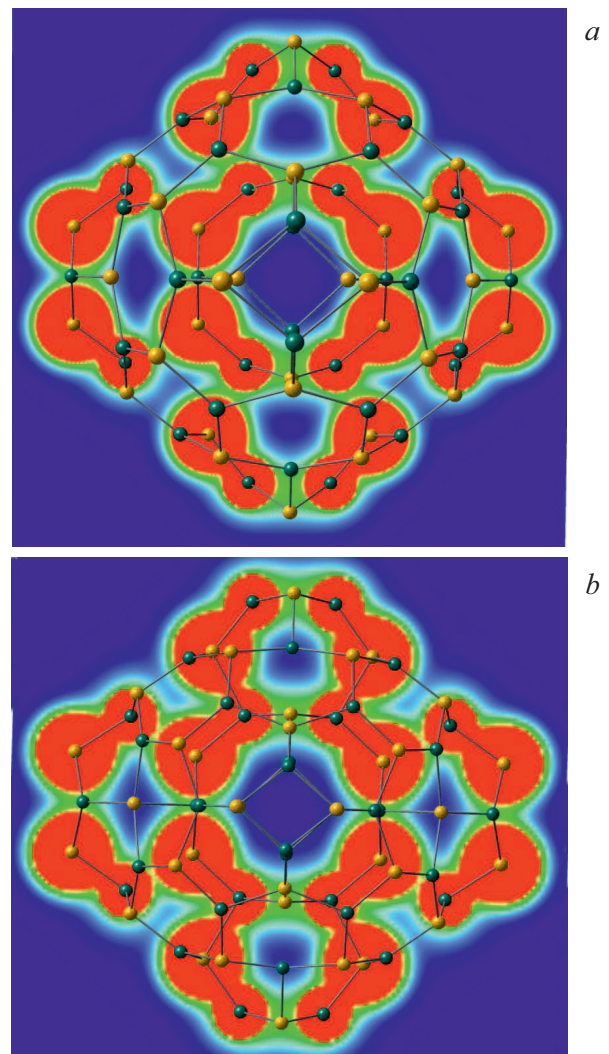


Рис. 6. Карты распределения электронной плотности, проходящие через центральную плоскость кластеров: $\text{Zn}_{12}\text{Se}_{12}@\text{Zn}_{48}\text{Se}_{48}$ (а) и $\text{Zn}_{60}\text{Se}_{60}$ (б).

Таблица 1. Энергетические и геометрические параметры кластеров ZnSe: (E_c /pare-atom — энергия когезии на пару атомов Zn–Se, eV; E_g — ширина энергетической щели, eV; размер кластера — расстояние между центрами диаметрально расположенных атомов, nm; длина связи — расстояние между центрами атомов в шестичленных кольцах, nm)

Частица	E_c /pare-atom Zn–Se, eV	E_g , eV	Размер кластера, nm	Длина связи, nm
Zn ₁₂ Se ₁₂	3.456	2.58	0.835	0.247
Zn ₃₆ Se ₃₆	3.694	2.22	1.497	0.245
Zn ₄₈ Se ₄₈	3.739	2.329	1.81	0.243–0.246
Zn ₁₂ Se ₁₂ @Zn ₄₈ Se ₄₈	3.732	1.894	1.792	0.249–0.256
(ZnSe) ₆₀	3.727	1.921	1.72	0.247–0.254

Таблица 2. Энергетические и геометрические параметры кластеров CdSe: (E_c /pare-atom — энергия когезии на пару атомов Cd–Se, eV; E_g — ширина энергетической щели, eV; размер кластера — расстояние между центрами диаметрально расположенных атомов, nm; длина связи — расстояние между центрами атомов в шестичленных кольцах, nm)

Частица	E_c /pare-atom Cd–Se, eV	E_g , eV	Размер кластера, nm	Длина связи, nm
Cd ₁₂ Se ₁₂	3.142	2.226	0.899	0.268
Cd ₃₆ Se ₃₆	3.311	1.815	1.64	0.268–0.271
Cd ₄₈ Se ₄₈	3.307	1.793	1.97	0.262–0.267
Cd ₁₂ Se ₁₂ @Cd ₄₈ Se ₄₈	3.41	1.491	1.934	0.27–0.279
(CdSe) ₆₀	3.424	1.546	1.847	0.269–0.277

в твердотельной структуре (0.2624 nm), но меньше, чем расстояние между слоями в онионе (0.336 nm).

Для анализа полученных результатов проведено сравнение с результатами первопринципных расчетов атомной и электронной структуры пленки на основе ZnSe и CdSe со структурой сфалерита [23]. В [23] показано, что в процессе оптимизации геометрии структуры изначальная гофрировка верхнего слоя пленки уменьшается, а расстояние между поверхностным и нижележащим слоями увеличивается, релаксация приводит к расщеплению атомных слоев. Расстояние между слоями пленки структуры сфалерита составило 0.248 и 0.267 nm для ZnSe и CdSe соответственно.

Для оптимизированной геометрии кластеров (ZnSe)₆₀ и (CdSe)₆₀ расстояние между поверхностным и внутренним слоями составило 0.276–0.297 nm и 0.288–0.298 nm для кластеров (ZnSe)₆₀ и (CdSe)₆₀ соответственно.

Таким образом, расчет атомной структуры пленки структуры сфалерита для ZnSe и CdSe коррелирует с результатом полученным для изолированных кластеров (ZnSe)₆₀ и (CdSe)₆₀.

4. Заключение

Анализ исследования кластеров Zn_nSe_n показал, что наиболее соответствует твердотельному ZnSe кластер Zn₄₈Se₄₈, у которого длина связи близка длине связи в твердотельном ZnSe структуры сфалерита и ширина энергетической щели близка ширине запрещенной зоны у твердотельного ZnSe.

Анализ исследования кластеров Cd_nSe_n показал, что наиболее соответствует твердотельному CdSe кластер Cd₄₈Se₄₈, у которого длина связи близка длине связи в твердотельном CdSe структуры сфалерита и ширина энергетической щели близка ширине запрещенной зоны у твердотельного CdSe.

В процессе оптимизации геометрии сферических (ZnSe)₆₀ и (CdSe)₆₀ кластеров показано, что связи между атомами внутреннего и поверхностного слоя удлиняются, происходит отщепление верхнего слоя.

В качестве базовой модели для дальнейших исследований влияния примесей, собственных дефектов и нарушения стехиометрии изолированных кластеров и КТ на основе ZnSe и CdSe могут применяться ФП-кластеры Zn_nSe_n и Cd_nSe_n.

Список литературы

- [1] I. Tiginyanu, P. Topala, V. Ursaki. Nanostructures and Thin Films for Multifunctional Applications. Springer (2016). 576 с.
- [2] A.I. Ekimov, A.A. Onushchenko. JETP Lett. **34**, 345 (1981).
- [3] Д.А. Куршанов, В.А. Осипова, И.В. Мартыненко. Оптические свойства квантовых точек CdSe/CdS с различной толщиной оболочки. Сб. тез. докл. конгресса молодых ученых. http://kmu.ifmo.ru/collections_article/5252/opticheskie_svoystva_kvantovoyh_tochek_CdSe/CdS_s_razlichnoy_tolschiny_obolochki.htm
- [4] Р.Б. Васильев, В.С. Виноградов, С.Г. Дорофеев, С.П. Козырев, И.В. Кучеренко, Н.Н. Новикова. ФТТ **49**, 523 (2007).
- [5] А.А. Ващенко, А.Г. Витухновский, В.С. Лебедев, А.С. Селюков, Р.Б. Васильев, М.С. Соколик. Письма в ЖЭТФ **100**, 94 (2014).
- [6] Р.Б. Васильев, М.С. Соколик, А.Г. Витухновский, С.А. Амброзевич, А.С. Селюков, В.С. Лебедев. Квант. электроника **45**, 9, 853 (2015).
- [7] Jiwoong Yang, Franziska Muckel, Woonhyuk Baek, Rachel Fainblat, Hogeun Chang, Gerd Bacher, Taeghwan Hyeon. Chemical Synthesis, Doping, and Transformation of Magic-Sized Semiconductor Alloy Nanoclusters. Am. Chem. Soc. (2017). <https://www.researchgate.net/publication/316803325>
- [8] Biplab Goswami, Sougata Pal, Pranab Sarkar, G. Seifert, M. Springborg. Phys. Rev. B **73**, 205312-1 (2006).
- [9] L. Ovsianikova, V. Kartuzov, I. Shteplyuk, G. Lashkarev. Acta Phys. Polonica A **129**, A-41 (2016).
- [10] I. Shteplyuk, V. Khranovskyy, G. Lashkarev, V. Khomyak, V. Lazorenko, A. Ievtushenko, M. Syväjärvi, V. Jokubavicius, R. Yakimova. Solid State Electron. **81**, 72 (2013).
- [11] L. Ovsianikova, M. Dranchuk, G. Lashkarev, V. Kartuzov, M. Godlewski. Superlatt. Microstructur. **107**, 1 (2017).

- [12] V.V. Pokropivny, L.I. Ovsyannikova. Phys. Solid State **49**, 535 (2007).
- [13] Z. Zhu, A. Chutia, R. Sahnoun, M. Koyama, H. Tsuboi, N. Hatakeyama, A. Endou, H. Takaba, M. Kubo, C.A. Del Carpio, A. Miyamoto. Jpn J. Appl. Phys. **47**, 2999 (2008).
- [14] Amit Jain, Vijay Kumar, Yoshiyuki Kawazoe. Comput. Mater. Sci. **36**, 258 (2006).
- [15] V.V. Pokropivny, V.V. Skorokhod, G.S. Oleinik, A.V. Kurdyumov, T.S. Bartnitskaya, A.V. Pokropivny, A.G. Sisonyuk, D.V. Sheichenko. J. Solid State Chem. **154**, 214 (2000).
- [16] L.I. Ovsyannikova, V.V. Pokropivny, V.L. Bekenev. Phys. Solid State **51**, 2199 (2009).
- [17] В.Я. Шевченко, А.Е. Мадисон. Физика и химия стекла **32**, 1, 118 (2006).
- [18] А.Н. Еняшин, А.Л. Ивановский. ФТТ **49**, 378 (2007).
- [19] S. Huzinaga, J. Andzelm, M. Klobukowski, E. Radzio-Andzelm, Y. Sakai, H. Tatewaki. Gaussian Basis Sets for Molecular Calculations. Elsevier, Amsterdam (1984).
- [20] M.W. Schmidt, K.K. Baldrige, J.A. Boatz, S.T. Elbert, M.S. Gordon, J.H. Jensen, S. Koseki, N. Matsunaga, K.A. Nguyen, S.J. Su, T.L. Windus, M. Dupuis, J.A. Montgomery. J. Comput. Chem. **14**, 1347 (1993).
- [21] S. Portmann. Chimia **54**, 766 (2000).
- [22] Landolt-Bornstein / Ed. O. Madelung. New Ser. III. 22. Springer, Berlin (1987).
- [23] В.Л. Бекенев, С.М. Зубкова. ФТТ **60**, 187 (2018).

Редактор Т.Н. Василевская