

Электронная структура и нелинейные оптические свойства сверхрешеток на основе кварца и кремния

© Е.М. Рогинский¹, М.Б. Смирнов², Д.В. Панькин², А.В. Савин¹

¹ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

² Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования, Санкт-Петербургский государственный университет, Петергоф, Санкт-Петербург, Россия

E-mail: e.roginskii@mail.ioffe.ru

Поступила в Редакцию 18 октября 2024 г.

В окончательной редакции 28 октября 2024 г.

Принята к публикации 29 октября 2024 г.

Теоретически с использованием неэмпирических квантово-механических расчетов изучены структурные, электронные и нелинейные оптические свойства сверхрешеток на основе кварца и кремния. Показана термодинамическая устойчивость моделированной структуры и проведен анализ электронной структуры и оптических свойств. Получены значения разрыва зон в области гетероперехода в том числе с учетом поправок, рассчитанных с помощью квазичастичного приближения GW, которые составили 3.87 и 3.14 eV, для валентной зоны и зоны проводимости соответственно, что хорошо согласуется с экспериментальными данными. Изучены нелинейные оптические свойства сверхрешеток и влияние толщины слоев на линейную и квадратичную диэлектрическую восприимчивость. Показано, что максимальный нелинейный отклик достигается в материалах с удвоенным кремниевым слоем.

Ключевые слова: нелинейная оптика, оксиды кремния, гетероструктуры.

DOI: 10.61011/FTT.2024.11.59349.268

1. Введение

В настоящее время в мире наблюдается взрывной интерес к проблеме поиска новых функциональных материалов. В микроэлектронике и химической индустрии массово используется кремний, который наиболее часто встречается в кубической модификации, ввиду широкого распространения в земной коре. Кремний обладает уникальной комбинацией структурных, химических, и электронных свойств. Известно, что ширина запрещенной зоны кубической фазы составляет 1.12 eV [1,2], что позволяет использовать этот материал в качестве основных элементов солнечных панелей. Однако особенности зонной структуры не позволяют достигнуть максимальной эффективности таких солнечных элементов. Это обстоятельство инициирует поиск новых структурных модификаций с оптимальными характеристиками под конкретные технологические задачи. В частности, ввиду сложности и дорогой стоимости синтеза новых материалов, актуальным является теоретическое предсказание термодинамически стабильных структур кремния [3–7].

Самое простое химическое соединение с кремнием это оксид, который также распространен на земле и имеет очень богатое семейство полиморфов, которые структурно отличаются, главным образом, упаковкой тетраэдров SiO₂ в периодическую кристаллическую структуру или в аморфное состояние. Наиболее ярким представителем кремнеземов является кварц, который

представляет собой широкозонный диэлектрик с прямым оптическим переходом. Большая разница в электронной структуре кремния и его оксида позволяет ожидать уникальное сочетание фундаментальных свойств в результате сращивания двух материалов.

Развитие технологий в последнее десятилетие привело к возможности выращивания наноразмерных структур, в частности короткопериодных сверхрешеток, которые представляют собой слоистые гетероструктуры, в которых слои одного вещества чередуются со слоями другого изоморфного материала. Такое сращивание материалов приводит к перекрытию волновых функций и возникновению разрыва энергетических уровней на границах интерфейсов. Изучение разрыва зон является одной из ключевых проблем, поскольку величина разрыва определяет физические свойства гетероструктуры важные для создания электронных [8] или опто-электронных устройств [9]. Существует множество теоретических подходов к исследованию электронного строения гетероструктур, среди которых существенную долю занимают расчеты в рамках теории функционала плотности.

В настоящей работе в первую очередь представлены результаты изучения структурных свойств сверхрешеток, полученных путем сращивания кубического кремния с кварцем. Такие структуры показали термодинамическую устойчивость и вариацию электронных и оптических свойств в зависимости от толщин слоев.

2. Техника вычислений

Расчеты из первых принципов проводились в рамках метода функционала плотности с помощью программы ABINIT [10,11]. В расчетах использовались функционалы, обменно-корреляционная часть которых описывалась в приближении локальной плотности LDA [12]. Оптимизированные нелокальные (с двумя проекторами нелокальной части), сохраняющие норму псевдопотенциалы для атомов Si и O, использовались в настоящих расчетах [13]. В расчетах в качестве валентных считались электроны на орбиталях $2s2p$ для атома O и $3s3p$ для атома Si. Энергия обрезания при расчете электронной структуры составляла 40 Ha. Для интегрирования по зоне Бриллюэна использовались сетки Монхорста–Пака [14] размером $6 \times 6 \times 2$. В расчетах проводилась полная релаксация как положений атомов, так и параметров решетки. Релаксация проводилась до тех пор, пока силы, действующие на атомы, не становились менее $2 \cdot 10^{-5}$ Ha/Bohr при самосогласованном расчете полной энергии с точностью лучше 10^{-8} Ha, а отклонение от нулевого давления не превышало 0.1 Kbar.

Электронная структура и диэлектрические проницаемости рассчитывались в рамках квазичастичного приближения G_0W_0 [15]. В качестве входных данных использовались волновые функции и собственные значения энергий, найденные в приближении обобщенного градиента (GGA). Диэлектрическая матрица $\epsilon_{GG'}(q, \omega)$ вычислялась на сетке из 48 точек в ЗБ из матрицы поляризуемости $P_{GG'}(q, \omega)$, рассчитанной в приближении случайной фазы (RPA) для 56 заполненных и 250 незаполненных зон. Динамическое экранирование описывалось однополюсной плазменной моделью Годби–Нидса. В расчетах использовались фурье-компоненты волновых функций с максимальной кинетической энергией 35 Ha. Поправки к энергиям, найденным в приближении GGA, рассчитывались как диагональные матричные элементы оператора $[\Sigma - E_{xc}]$, где $\Sigma = GW$ — оператор собственной энергии, E_{xc} — оператор обменно-корреляционной энергии, G — функция Грина, а $W = [\epsilon^{-1}\nu]$ — оператор экранированного кулоновского взаимодействия. При расчете Σ использовались компоненты волновой функции с кинетической энергией до 35 Ha как для обменной, так и для корреляционной частей.

3. Структурные свойства

В настоящей работе сверхрешетки были сконструированы методом сращивания объемного кремния (пространственная группа $Fd\bar{3}m$) с кварцем ($P3_221$) таким образом, чтобы плоскость (001) кремния была параллельна плоскости (120) кварца. На рис. 1 построена схема формирования сверхрешетки $(Si)_m/(SiO_2)_n$ для $m = n = 1$ (1×1) образованной чередованием слоев кремния и кварца с толщиной равной одному периоду элементарной ячейки объемных материалов (рис. 1, b).

Атомы в такой сверхрешетке формируют структуру с пространственной группой $P222_1$, причем атомы Si кремниевого слоя занимают высокосимметричные позиции Уайкофа $2a$, $2c$ и $2d$ с локальной симметрией 2, а в слое оксида позиции $2b$ и $2c$, при этом интерфейсный слой заполнен атомами кремния в общей позиции Уайкофа $4e$. Атомы кислорода находятся в высокосимметричных позициях $4d$ и общей $4e$, что характерно для квази-молекулярных кристаллов [16].

Полученные после оптимизации геометрии структурные параметры сверхрешетки показали, что в плоскости интерфейса слой оксида испытывает деформацию растяжения (6.5%), а кремниевый слой деформацию сжатия (1%), при этом энергия образования сверхрешетки составляет 2.55 eV/Si. По сравнению со структурой изученной ранее в работах [17,18] (энергия формации 3.74 eV), рассматриваемая в этой работе сверхрешетка обладает большей механической устойчивостью и энергетически более выгодной конфигурацией. Структурные параметры изученных сверхрешеток и объемных прекурсоров представлены в табл. 1. Из таблицы видно хорошее соответствие расчетов с экспериментом для объемных прекурсоров, что указывает на адекватность выбранной схемы расчета.

Полученная конфигурация сверхрешетки была также протестирована на устойчивость в отношении фоновых состояний. На рис. 2 построена рассчитанная дисперсия фоновых состояний вдоль высокосимметричных направлений в зоне Бриллюэна (ЗБ).

Как видно из рисунка, по всей ЗБ не наблюдаются состояний с мнимыми частотами, а следовательно, структура является устойчивой, сохраняя орторомбическую симметрию. Кроме того, как видно из парциальной плотности колебательных состояний, основной вклад в низкочастотные колебательные состояния (с частотой до 400 cm^{-1}) вносят атомы кремния локализованные в слое кремния, в то время, как атомы оксидного слоя наибольший вклад вносят в состояния с частотой больше 400 cm^{-1} , что косвенно указывает на наличие в сверхрешетке локализованных колебаний в отдельном слое.

Ввиду значительной ресурсоемкости расчета дисперсии фоновых ветвей, колебательные состояния сверхрешеток 2×1 и 1×2 были исследованы только в Γ -точке ЗБ. Ввиду того, что увеличение периода вдоль оси роста CP ведет к схлопыванию ЗБ в этом направлении, следует ожидать отсутствия появления мнимых мод для сверхрешеток большего периода.

4. Электронная структура и диэлектрические свойства

Как известно, электронные состояния в периодических структурах определяются не только составом, но и структурным упорядочением в кристаллической решетке. Экспериментальное значение ширины запрещенной

Таблица 1. Параметры решетки и координаты атомов в CP Si/SiO₂ и прекурсорах

| Параметр | Si-bulk | | SiO ₂ | | CP Si/SiO ₂ |
|--------------------------|--------------------------|---------|--------------------------|---------------------|------------------------|
| | Эксперимент ¹ | Расчет | Эксперимент ² | Расчет | Расчет |
| Параметры решетки | | | | | |
| <i>a</i> , Å | 5.430 | 5.468 | 4.913 | 4.951 | 5.276 |
| <i>b</i> , Å | 5.430 | 5.468 | 4.913 | 4.951 | 5.450 |
| <i>c</i> , Å | 5.430 | 5.468 | 5.405 | 5.443 | 12.267 |
| Позиции атомов, отн. ед. | | | | | |
| Si1 | (0,0,0) | (0,0,0) | (0.469,0,0.667) | (0.471,0,0.667) | (0.000,0.333,0.500) |
| Si2 | | | | | (0.250,0.000,0.652) |
| Si3 | | | | | (0.000,0.236,0.000) |
| Si4 | | | | | (0.250,0.500,0.908) |
| Si5 | | | | | (0.750,0.000,0.899) |
| Si6 | | | | | (-0.039,0.702,0.811) |
| O1 ₁ | | | (0.414,0.268,0.785) | (0.413,0.265,0.787) | (0.250,0.500,0.479) |
| O2 ₁ | | | | | (0.750,0.500,0.775) |
| O3 ₁ | | | | | (0.446,0.841,0.589) |
| O4 ₁ | | | | | (0.090,0.811,0.716) |

Примечание. ¹ Параметры из работы[19]

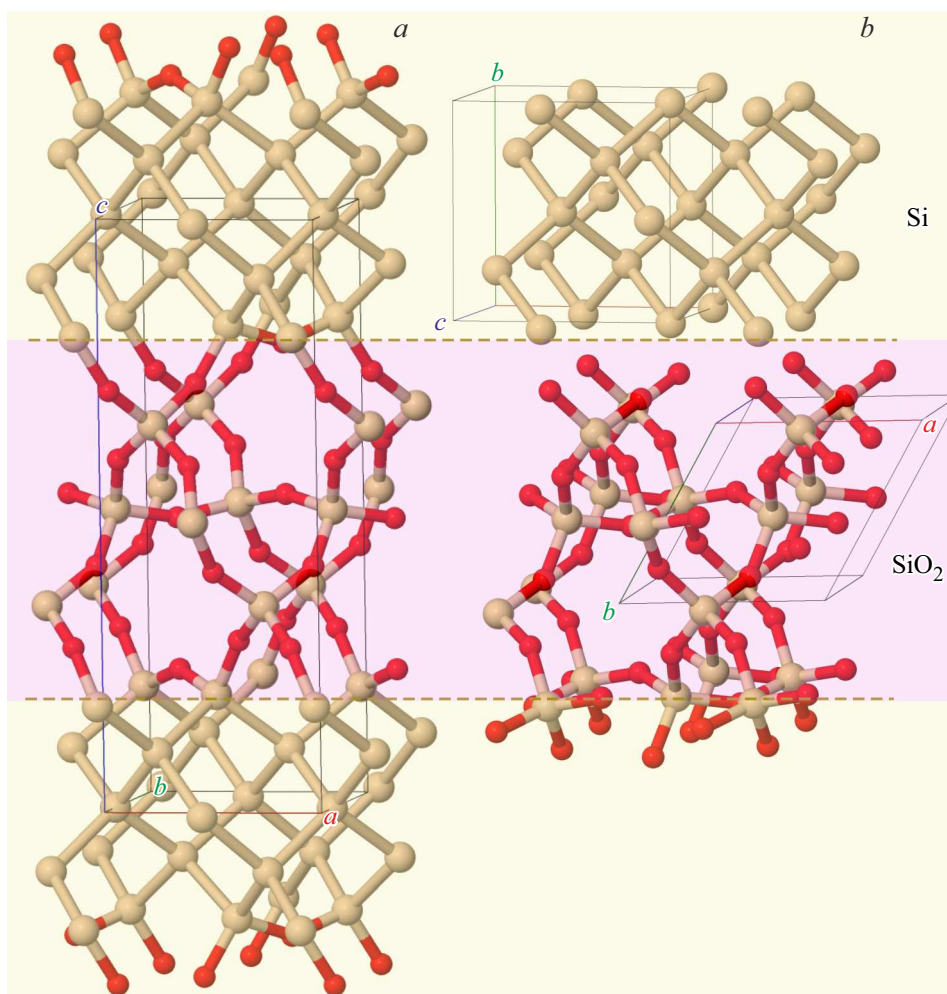


Рис. 1. Элементарная ячейка сверхрешетки Si/SiO₂ (*a*) и ячейки объемных прекурсоров (*b*). Большие бежевые шарики — атомы кремния, маленькие красные шарики — атомы кислорода.

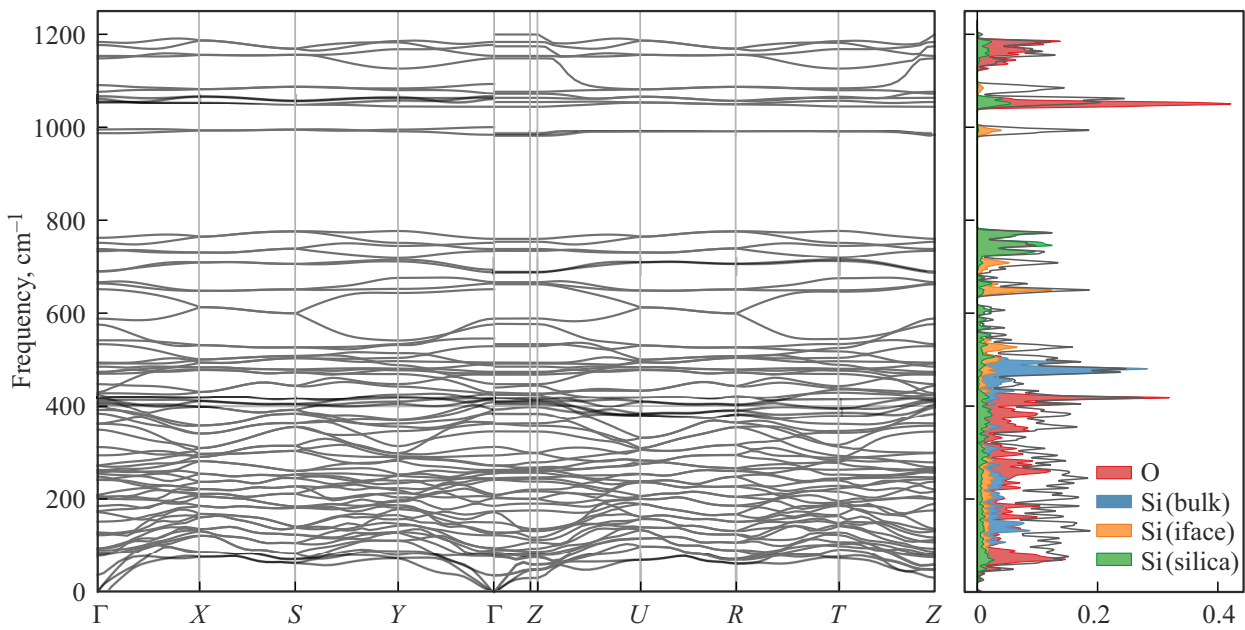


Рис. 2. Дисперсия фоновых состояний сверхрешетки Si/SiO₂ (слева) вдоль направлений симметрии ЗБ и парциальная плотность фоновых состояний (справа).

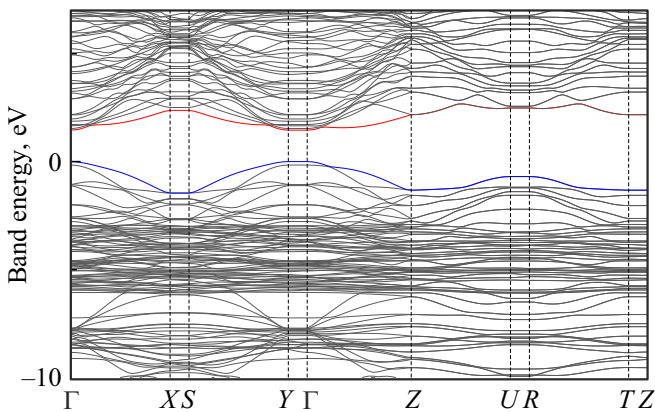


Рис. 3. Зонная структура сверхрешетки Si/SiO₂ рассчитанная методом G₀W₀.

зоны (E_g) кварца составляет 8.9 eV [20], а аналогичная величина для объемного кремния 1.12 eV [21] (для прямого оптического перехода), существенная разница в величине E_g позволяет предположить, что с помощью варьирования состава сверхрешетки можно осуществить подгонку ширины запрещенной зоны под требуемую величину в широком диапазоне (от ультрафиолета до инфракрасного спектра) длины волны. С целью выявить влияние пространственной структуры на электронные состояния была рассчитана электронная зонная структура в квазичастичном приближении G₀W₀ которая приведена на рис. 3.

Из рис. 3 видно, что в отличие от объемного кремния, сверхрешетка является прямозонным полупроводником с шириной запрещенной зоны 1.82 eV, что довольно

близко к пределу Шокли–Квиссера, который определяет максимальную эффективность солнечного элемента. При этом значение эффективной массы электронов, рассчитанной методом численного дифференцирования $m_{h,e}^* = \hbar^2 \left[\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \right]^{-1}$, составила $m_e^* \sim 0.23m_e$, что примерно в два раза меньше значения эффективной массы дырок $m_e^* \sim 0.48m_e$. Полученные значения несколько меньше эффективных масс в оксиде кремния, которые составляют $0.42m_e$ и $0.58m_e$ [22] для электронов и дырок соответственно, и следовательно подвижность носителей в сверхрешетке выше. Однако, стоит отметить высокую анизотропию тензора эффективных масс, — перпендикулярно интерфейсу ввиду вырождения дисперсии электронных состояний значения масс приобретают высокие значения, которые не имеют физического смысла.

Для анализа состояний валентной зоны и зоны проводимости был выполнен расчет плотности электронных состояний, проектированных на отдельные атомы (рис. 4).

Из анализа плотности состояний можно сделать вывод, что наибольший вклад в высокоэнергитичные ветви валентной зоны дают атомы Si в кремниевом и интерфейсных слоях (рис. 4, a, b), причем наиболее существенный вклад вносят электроны 3p-орбиталей. Дно зоны проводимости также образовано электронами атомов кремния, но на этот раз вклад дают электроны 4s, 4p, 3d, которые образуют виртуальные состояния в свободных атомах.

Стоит отметить, что энергетические уровни состояний атомов Si и O оксидного слоя (рис. 4, c, d) „лежат“ довольно глубоко в валентной зоне и высоко в зоне проводимости, поэтому оптические переходы в сверх-

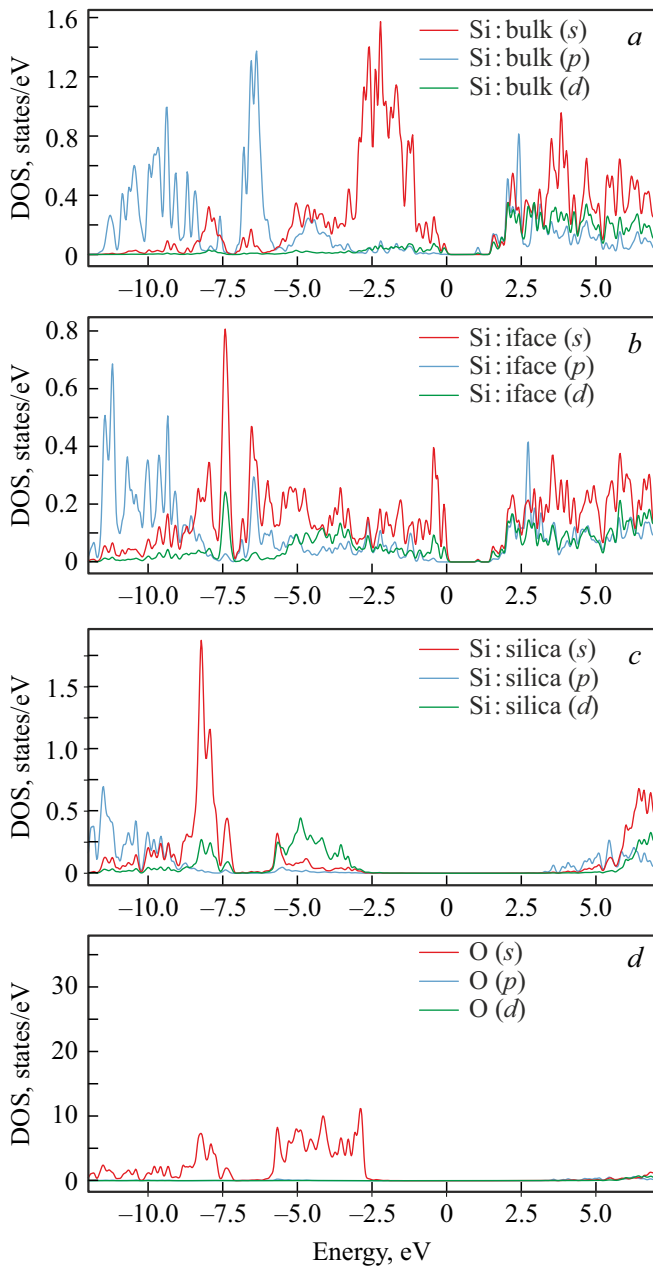


Рис. 4. Проекция плотности электронных состояний сверхрешетки Si/SiO₂ на атомные орбитали Si в слое кремния (а), в слое интерфейса (b) и слое оксида (с) и на орбитали атомов O (d).

решетке определяются, главным образом, электронными состояниями в слое кремния. Подобная структура указывает на наличие разрыва валентной зоны и зоны проводимости в слоях различного состава.

Известно, что разрыв валентной зоны гетероструктуры находится по следующей формуле [23]:

$$\Delta E_v = (E_v^{\text{Si}} - E_v^{\text{SiO}_2}) + \Delta V, \quad (1)$$

где ΔV — разность усредненного электростатического потенциала в разных слоях гетероструктуры, который

находится из расчетов сверхрешетки большого периода. Очевидно, разрыв зоны проводимости связан с разрывом валентной зоны соотношением:

$$\Delta E_c = (E_g^{\text{Si}} - E_g^{\text{SiO}_2}) + \Delta E_v, \quad (2)$$

где E_g^{Si} и $E_g^{\text{SiO}_2}$ — величины запрещенной зоны объемного кремния и оксида соответственно. Стоит отметить, что поля упругих деформаций возникающие в результате сращивания слоев в единую структуру не являются изотропными, что приводит к понижению кубической симметрии объемного кремния до тетрагональной.

Расчет разрывов зон на первом этапе проводился в рамках теории функционала плотности, затем, используя Кон-Шемовские орбитали, вычислялись квазичастичные поправки методом G_0W_0 , как это схематично изображено на рис. 5.

Расчет показал, что для слоя SiO₂ квазичастичные поправки смещают уровни валентных зон и зон проводимости в противоположном направлении примерно на одинаковую величину порядка 1.3 eV, суммарно изменяя величину запрещенной зоны на 2.75 eV. В слое кремния валентная зона почти не меняет положения, смещается только зона проводимости на 0.68 eV. В результате рассчитаны величины смещения зон $\Delta E_v = 3.87$ eV и $\Delta E_c = 3.14$ eV, что хорошо согласуется с экспериментальными данными 4.3 и 3.1 eV соответственно [24]. Таким образом, учет квазичастичных эффектов оказывается критически важным при расчете электронной структуры сверхрешеток Si/SiO₂, а результаты расчетов хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Расчеты электронной структуры сверхрешеток с увеличенными толщинами слоев также были выполнены и величины ширин запрещенных зон построены в табл. 2.

Как видно из табл. 2, с ростом толщины слоя кремния ожидаемо растет и величина запрещенной зоны, однако, если толщины слоев увеличиваются с одинаковой кратностью, значение E_g уменьшается на 30%, что указывает на уменьшение перекрытия волновых функций соседних слоев. Иными словами, толстые слои сохраняют индивидуальные характеристики объемных

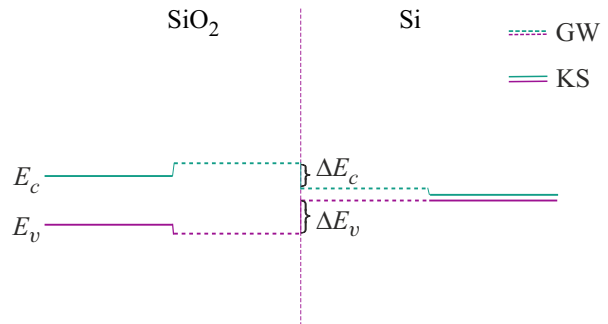


Рис. 5. Иллюстрация к схеме расчета разрыва зон. Сплошные линии — уровни рассчитанные в приближении GGA, пунктирные — с учетом поправок G_0W_0 .

Таблица 2. Рассчитанная ширина запрещенной зоны и диэлектрические свойства CP $(\text{Si})_m(\text{SiO}_2)_n$ ($m \times n$) и прекурсоров

| | E_g^{GW} , eV | $\chi_{xx}^{(1)}$ | $\chi_{zz}^{(1)}$ | $\chi^{(2)}$, pm/V |
|------------------|------------------------|-------------------|-------------------|---------------------|
| Si-strain | 0.77 | 16.01 | 16.01 | 0 |
| SiO ₂ | 8.56 | 1.468 | 1.468 | 0.845 |
| SL 1 × 2 | 2.12 | 3.16 | 3.16 | 0.172 |
| SL 1 × 1 | 1.83 | 4.3 | 4.3 | 0.106 |
| SL 2 × 1 | 1.28 | 5.94 | 5.94 | 3.616 |
| SL 2 × 2 | 1.30 | 5.45 | 5.45 | 1.95 |

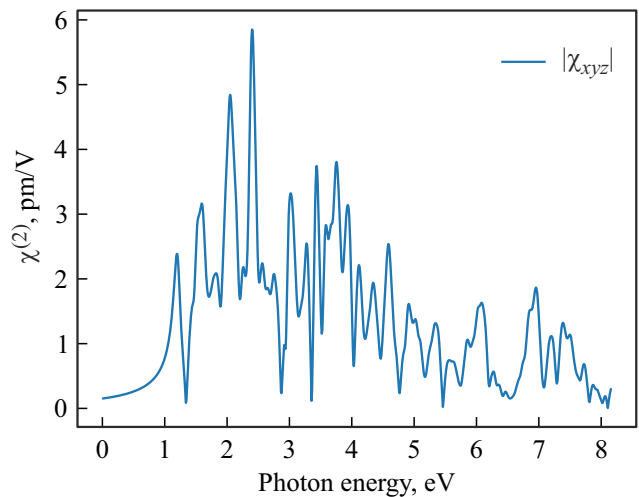
прекурсоров и слабо взаимодействуют друг с другом. В целом, наблюдается ожидаемая картина влияния состава сверхрешетки на величину запрещенной зоны в пределах от 1.3 до 2.1 eV, что соответствует диапазону длин волн от 600 до 950 nm, т.е. области максимального солнечного излучения. Таким образом, изучаемые структуры представляют интерес для использования в оптических приборах, в которых важную роль играют диэлектрические свойства.

В рамках теории возмущения были выполнены расчеты линейной и квадратной нелинейной восприимчивости, полученные результаты приведены в табл. 2. Прослеживается довольно строгая корреляция значения диэлектрической постоянной и ширины запрещенной зоны, с ростом последней линейная восприимчивость стремительно падает достигая минимума в случае кварца (в таблице приведена усредненная величина диэлектрической восприимчивости по трем направлениям).

В случае нелинейной диэлектрической восприимчивости связь не так очевидна ввиду зависимости нелинейных свойств от симметрии кристаллической решетки. Так, в случае объемного кремния, генерация второй гармоники запрещена правилами отбора и в статическом приближении все компоненты тензора $\chi_{ijk}^{(2)}$ равны нулю. Для кварца правила отбора допускают лишь две ненулевые компоненты — $\chi_{xxx}^{(2)}$ и $\chi_{xyy}^{(2)}$, которые равны по величине, но противоположны по знаку, рассчитанная величина приведена в табл. 2. Полученная величина коррелирует с экспериментальными данными для аморфного кремния, используемого в качестве волновода в промышленных масштабах.

Сверхрешетки с тонким кремниевым слоем демонстрируют довольно слабые нелинейные свойства. Согласно правилам отбора тензор квадратичной нелинейной восприимчивости третьего ранга $\chi^{(2)}$ структур с пространственной группой $P222_1$ имеет только одну разрешенную компоненту, а именно $\chi_{xyz}^{(2)}$. Как показывают расчеты, эта величина резко возрастает с увеличением толщины кремниевого слоя, в несколько раз превышая значения для кварца, что открывает использование этого материала в промышленности.

В работе также была рассчитана дисперсионная зависимость квадратичной нелинейной зависимости, которая построена на рис. 6.

**Рис. 6.** Дисперсионная зависимость коэффициента генерации второй гармоники CP Si/SiO₂ 1 × 1.

Стоит отметить сильную дисперсионную зависимость нелинейного отклика который резко возрастает с ростом длины волны источника света. Например, в случае генерации второй гармоники на частоте 620 nm величина нелинейной восприимчивости составляет 3.3 pm/V, что в десятки раз превосходит статическую величину. К сожалению, расчет динамических нелинейных свойств CP с более толстыми слоями ограничен вычислительными ресурсами, однако даже на примере CP 1 × 1 можно судить о большом потенциале данных структур в области нелинейной оптики.

5. Заключение

В работе представлены результаты комплексного изучения структурных, электронных и диэлектрических свойств сверхрешеток Si/SiO₂. С применением неэмпирических квантово-механических методов исследована зонная структура, пространственное строение, фоновые спектры и нелинейная оптическая восприимчивость серии кремний-оксидных сверхрешеток с различными толщинами слоев. Для описания структуры интерфейса использована модель, основанная на сочетании решеток кристаллического кремния и кварца. Показано, что при незначительных деформациях обеих решеток, может образовываться термодинамически устойчивая гетероструктура. Получены значения сдвига зон в области гетероперехода в том числе с учетом поправок рассчитанных с помощью квазичастичного приближения GW, которые составили 3.87 и 3.14 eV, для валентной зоны и зоны проводимости соответственно, что хорошо согласуется с экспериментальными данными. Изучены нелинейные оптические свойства сверхрешеток и влияние толщины слоев на линейную и квадратичную диэлектрическую восприимчивость. Показано, что максимальный нелинейный отклик достигается в материалах

с кремниевым слоем толщиной в две элементарные ячейки. Авторы надеются пробудить интерес к экспериментальному изучению нелинейных оптических свойств сверхрешеток на основе кремния и его оксида.

Благодарности

Представленные в настоящей работе расчеты были частично выполнены с помощью вычислительных ресурсов МСЦ РАН, и с использованием вычислительных ресурсов суперкомпьютера ФТИ им. А.Ф. Иоффе.

Финансирование работы

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (№ 22-22-20021) и гранта Санкт-Петербургского научного центра (№ 32/2022).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] Y. Okada, Y. Tokumaru. *J. Appl. Phys.* **56**, 314 (1984).
- [2] A.G. Cullis, L.T. Canham, P.D.J. Calcott. *J. Appl. Phys.* **82**, 909 (1997).
- [3] K. Takeda, K. Shiraishi. *Phys. Rev. B* **50**, 14916 (1994).
- [4] G.G. Guzmán-Verri, L.C. Lew Yan Voon. *Phys. Rev. B* **76**, 075131 (2007).
- [5] Q. Wang, B. Xu, J. Sun, H. Liu, Z. Zhao, D. Yu, C. Fan, J. He. *J. Am. Chem. Soc.* **136**, 9826 (2014).
- [6] A. Mujica, C.J. Pickard, R.J. Needs. *Phys. Rev. B* **91**, 214104 (2015).
- [7] R. Tutchton, C. Marchbanks, Z. Wu. *Phys. Rev. B* **97**, 205104 (2018).
- [8] G.D. Wilk, R.M. Wallace, J.M. Anthony. *J. Appl. Phys.* **89**, 5243 (2001).
- [9] A.C. Morteani, P. Sreearunothai, L.M. Herz, R.H. Friend, C. Silva. *Phys. Rev. Lett.* **92**, 247402 (2004).
- [10] X. Gonze, B. Amadon, P.-M. Anglade, J.-M. Beuken, F. Bottin, P. Boulanger, F. Bruneval, D. Caliste, R. Caracas, M. Côté, T. Deutsch, L. Genovese, P. Ghosez, M. Giantomassi, S. Goedecker, D. Hamann, P. Hermet, F. Jollet, G. Jomard, S. Leroux, M. Mancini, S. Mazevet, M. Oliveira, G. Onida, Y. Pouillon, T. Rangel, G.-M. Rignanese, D. Sangalli, R. Shaltaf, M. Torrent, M. Verstraete, G. Zerah, J. Zwanziger. *Comput. Phys. Commun.* **180**, 2582 (2009).
- [11] X. Gonze, G. Rignanese, M. Verstraete, J. Beuken, Y. Pouillon, R. Caracas, F. Jollet, M. Torrent, G. Zerah, M. Mikami, P. Ghosez, M. Veithen, J.-Y. Raty, V. Olevano, F. Bruneval, L. Reining, R. Godby, G. Onida, D. Hamann, D. Allan. *Zeitschrift für Kristallographie. Crystalline Materials* **220**, 558 (2005).
- [12] J.P. Perdew, Y. Wang. *Phys. Rev. B* **45**, 13244 (1992).
- [13] D.R. Hamann. *Phys. Rev. B* **88**, 085117 (2013).
- [14] H.J. Monkhorst, J.D. Pack. *Phys. Rev. B* **13**, 5188 (1976).
- [15] G. Onida, L. Reining, A. Rubio. *Rev. Mod. Phys.* **74**, 601 (2002).
- [16] Y.E. Kitaev, A.G. Panfilov, V.P. Smirnov, P. Tronc. *Phys. Rev. E* **67**, 011907 (2003).
- [17] М.Б. Смирнов, Д.В. Панькин, Е.М. Рогинский, А.В. Савин. *ФТТ* **64**, 1701 (2022).
- [18] M. Smirnov, E. Roginskii, A. Savin, N. Mazhenov, D. Pankin. *Coatings* **13**, 1231 (2023).
- [19] Y. Le Page, G. Donnay. *Acta Crystallographica Section B Structural Crystallography and Crystal Chemistry* **32**, 2456 (1976).
- [20] R.B. Laughlin. *Phys. Rev. B* **22**, 3021 (1980).
- [21] R.J. Van Overstraeten, R.P. Mertens. *Solid-State Electron.* **30**, 1077 (1987).
- [22] R.K. Chanana. *Transactions on Machine Learning and Artificial Intelligence* **11**, 172 (2023).
- [23] R. Shaltaf, G.-M. Rignanese, X. Gonze, F. Giustino, A. Pasquarello. *Phys. Rev. Lett.* **100**, 186401 (2008).
- [24] V.V. Afanas'ev, M. Houssa, A. Stesmans, M.M. Heyns. *Appl. Phys. Lett.* **78**, 3073 (2001).

Редактор Ю.Э. Кутаев