

Факторы, определяющие паразитный термоэмиссионный ток в катодно-сеточных узлах с пирографитовыми сетками

© Р.Ю. Богачев,^{1,2} Т.М. Крачковская,¹ В.И. Шестеркин,¹ С.Д. Журавлев,¹ О.Е. Глухова,^{1,3,4} Д.А. Колосов^{1,3}

¹Научно-производственное предприятие „Алмаз“,
410033 Саратов, Россия

²Саратовский государственный технический университет им. Ю.А. Гагарина,
410054 Саратов, Россия

³Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского,
410012 Саратов, Россия

⁴Первый Московский государственный медицинский университет им. И.М. Сеченова,
119048 Москва, Россия
e-mail: bogachevru@almaz-rpe.ru

Поступило в Редакцию 4 октября 2024 г.

В окончательной редакции 18 января 2025 г.

Принято к публикации 30 января 2025 г.

Представлены результаты исследования сеточных электродов из анизотропного пиролитического графита в составе катодно-сеточного узла мощной импульсной лампы бегущей волны. Установлено, что сеточные электроды из анизотропного пиролитического графита в диапазоне температур 800 °С–900 °С при температурах катода 1080 °С–1150 °С продемонстрировали высокие антиэмиссионные свойства. Выявлено, что при испытании катодно-сеточного узла в составе лампы бегущей волны в течение 900 h в форсированном режиме (температура катода превышала рабочую температуру на 70 °С) паразитный термоэмиссионный ток в цепи катод–управляющая сетка отсутствовал. Результаты расчета методом функционала плотности и квантового молекулярно-динамического моделирования для структуры „анизотропный пиролитический графит с пленкой BaO“, имеющей гексагональную решетку, показали, что величина ее работы выхода электронов составила ~ 5.14 eV, что существенно выше работы выхода анизотропного пиролитического графита (~ 4.7 eV) и оксида бария (~ 1–1.6 eV).

Ключевые слова: паразитная термоэмиссия, катодно-сеточный узел, анизотропный пиролитический графит, теория функционала плотности, адсорбция, молекулярно-динамическое моделирование.

DOI: 10.61011/JTF.2025.06.60471.312-24

Введение

Низковольтное управление током электронного пучка в импульсных лампах бегущей волны (ЛБВ) осуществляется потенциалом сетки, расположенной на расстоянии 100–300 μm от эмитирующей поверхности катода. Токперехватывающие сетки используют в ЛБВ X-диапазона с уровнем выходной средней мощности не более 50–60 W. В более мощных ЛБВ под воздействием мощности перехваченного сеткой электронного пучка „паразитный“ ток термоэлектронной эмиссии с сетки превышает допустимые значения, происходит деформация или разрушение ее перемычек. Перехват тока перемычками управляющей сетки устраняют путем размещения между управляющей сеткой и катодом теневой сетки, расположенной вблизи поверхности и имеющей потенциал катода, непосредственно на поверхности катода (связанная сетка) или в теле катодной таблетки (встроенная сетка) [1].

Сеточные структуры работают в парах продуктов испарения с поверхности металлопористого катода (МПК), которые адсорбируются на поверхности сетки и изменяют работу выхода электронов [2,3]. При темпе-

ратуре 1100 °С–1200 °С в первые 100–200 h 95 % испарившегося активного вещества составляет BaO. Далее в процессе работы катода соотношение в испарившемся с поверхности катода активном веществе Ba и BaO составляет 90 % / 1 % [4,5]. При образовании пленки определенной толщины работа выхода электронов с поверхности сетки определяется составом адсорбированного вещества и может быть значительно меньше работы выхода электронов чистого материала сетки, что увеличивает плотность тока паразитной термоэлектронной эмиссии с ее поверхности [3].

В качестве материала сеточных электродов в катодно-сеточных узлах (КСУ) клистронов и мощных импульсных ЛБВ применяется листовой гафний, который не оказывает негативного влияния на эмиссию МПК и обладает удовлетворительными механическими и антиэмиссионными свойствами. К недостаткам гафния следует отнести снижение формоустойчивости и его рекристаллизацию при 950 °С–1100 °С, которая близка к рабочей температуре сеток в составе электровакуумных приборов (ЭВП). Снижение формоустойчивости сеток из гафния приводит к нарушению экранировки перемычек управляющей сетки, увеличению ее температуры за

счет мощности перехваченного электронного потока и, как следствие, к увеличению тока паразитной термоэлектронной эмиссии с управляющей сетки в паузе между импульсами, что снижает долговечность и надежность ЛБВ [2,6].

Поэтому применение в КСУ сеточных электродов из материалов с более высокими формоустойчивостью и антиэмиссионными свойствами является актуальной задачей [6].

Альтернативными материалами сеточных структур, обладающими высокими антиэмиссионными свойствами, являются различные модификации углерода или традиционно используемые металлы (Hf, Mo и др.) с углеродными покрытиями [1,7–12].

Одним из материалов, обладающим высоким значением работы выхода, химической инертностью, стабильными механическими свойствами при температурах 900 °С–1000 °С в течение требуемого срока службы и не оказывающего отрицательного влияния на эмиссионные характеристики МПК, является анизотропный пиролитический графит (АПГ) [10–12].

Целью настоящей работы является экспериментальное исследование динамики изменения во времени паразитного термоэмиссионного тока в КСУ с двойными (управляющей и теневой) сеточными структурами из АПГ в составе мощной импульсной ЛБВ и теоретическое исследование работы выхода и энергии связи Ва и ВаО с поверхностью АПГ.

1. Сеточные структуры из АПГ

Для изготовления сеточных структур (теневой и управляющей) применялись заготовки из АПГ, синтезированные методом пиролитического осаждения атомов углерода на разогретые до температуры 1800 °С подложки из графита марки МПГ6 путем диссоциации углеродсодержащих газов (метан, гептан) при температуре 2000 °С–2500 °С. Толщина заготовки теневой сетки составляет 100 μm , управляющей — 300 μm . Полученные таким образом детали обладают анизотропией основных тепловых и электрических свойств в направлении плоскости осаждения слоев и перпендикулярно к ним, а также по коэффициенту теплового линейного расширения (КТЛР) и прочности. Содержание примесей в материале, определенное методами рентгеноструктурного и рентгенофлуоресцентного анализов, менее 0.01 %, а форма и размеры подложки для осаждения определяют форму и размеры получаемых деталей и не требуют дополнительной механической обработки.

Рентгенофазовый анализ кристаллической структуры пластины из АПГ, выполненный с применением многофункционального рентгеновского дифрактометра ДРОН-8Т, показал, что образец представляет собой сильно текстурированный графит с параметром элементарной ячейки $c = (6.82228 \pm 0.00017) \text{ \AA}$.

Кроме того, был определен КТЛР АПГ в направлении плоскости осаждения, его величина составила $18.5 \cdot 10^{-7} \text{ K}^{-1}$, что в 3.3 раза меньше, чем у гафния.

В работе [13] представлены результаты изменения междуэлектродных расстояний в КСУ мощной импульсной ЛБВ с сетками из гафния, вызванного термическим перемещением катода и сеточных структур относительно холодного состояния. При рабочей температуре катода 1080 °С смещение катода в сторону управляющей сетки составило 61 μm , а управляющей сетки в сторону катода — 12 μm . Поскольку конструкции КСУ приборов с сетками из гафния и АПГ идентичны, смещение сетки из АПГ в сторону катода не превышает 3.6 μm , что приведет к увеличению тока катода диаметром 10 mm в соответствии с законом „трех вторых“ не более, чем на 3.4 %.

Таким образом, использование в качестве материала сеток АПГ вместо гафния позволит уменьшить значение паразитного термоэмиссионного тока с управляющей сетки, тока утечки по керамике, тока прямого перехвата.

2. Испытания электронных пушек с сетками из АПГ

КСУ с сетками из АПГ для мощных импульсных ЛБВ были изготовлены с применением технологий лазерной абляции для крепления и прошивки двойных сеточных структур [14,15].

Были исследованы КСУ с сетками из АПГ в составе мощной импульсной ЛБВ. КСУ имели конструкцию, представленную на рис. 1. Параметры КСУ в ЛБВ представлены в табл. 1.

Приборы с КСУ с сетками из АПГ прошли динамические испытания при скажностях от 40 до 4 в соответствии с требованиями ТУ на данный прибор, в течении которых омические утечки в цепи катод–управляющая сетка и ток паразитной термоэлектронной эмиссии отсутствовали. На следующем этапе приборы успешно прошли цикл испытаний на вибро- и ударопрочность по установленной для промышленно выпускаемых приборов методике с полуторакратным запасом по ускорению для обеспечения дополнительного технологического запаса по стойкости к механическим воздействиям [1]. Изменение параметров амплитуды модуляции выходного сигнала и выходной импульсной мощности после завершения испытаний на виброустойчивость не превышает допустимых значений 8 % и 3 % соответственно, что удовлетворяет требованиям ТУ на данный прибор.

На завершающем этапе приборы с КСУ с сетками из АПГ прошли испытания в режиме „непрерывного горения“ (с постоянно поданным напряжением накала без токоотбора) при повышенной температуре катода 1150 °С (коэффициент ускорения 7 относительно рабочей температуры): первый в течение 900 h и второй в течение 400 h с контролем недовольной характеристики при скажностях 10 и 4 через каждые 100 h. За время

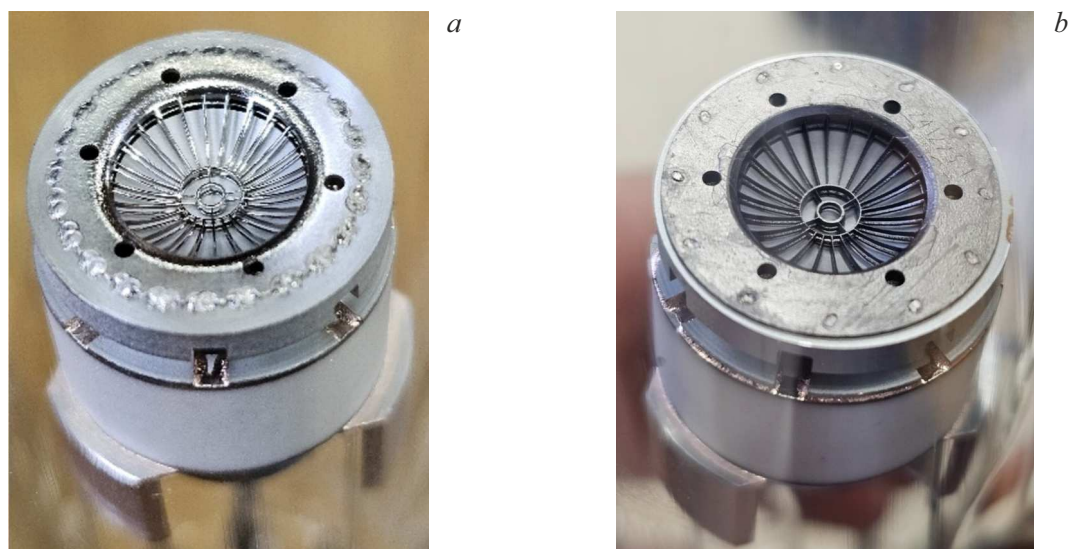


Рис. 1. Общий вид КСУ с сетками ажурной конструкции из гафния (а) и из АПГ (b).

Таблица 1. Параметры КСУ в ЛБВ

Диаметр цилиндрической части катода, mm	10
Ток катода в импульсе, А	4
Рабочая температура катода, °С	1055–1080
Напряжение запирающей сетки, V	не менее –320
Напряжение превышения сетки, V	не более +750
Напряжение анода, V	21000–22000
Минимальная скважность	4

испытаний в экстремальных для сеток режимах — при температурном воздействии и минимальной скважности 4 — значения тока в цепи катод–управляющая сетка осталось неизменным относительно начала испытаний и составило -0.01 mA для первого и -0.05 mA для второго прибора. Допустимое значение тока в цепи сетки не более -0.75 mA.

3. Исследование химического состава вещества, адсорбированного на сеточных электродах

После окончания испытаний на сканирующем электронном микроскопе были исследованы поверхности теневого и управляющих сеток из АПГ. Анализ поверхностей подтвердил наличие напыления с катода на обращенные к нему поверхности перемычек.

На рис. 2, 3 представлены фотографии поверхностей теновой и управляющей сеток, обращенных в сторону катода, со значительным количеством адсорбированных продуктов испарения с поверхности МПК. Продукты испарения распределены по поверхности сеток неравномерно. Наряду с относительно чистыми участками

в области центрального кольца, толщина пленки адсорбированного вещества на радиальных перемычках возрастала от центра к периферии сеток.

На поверхностях обеих сеток, обращенных к катоду, методом рентгеноструктурного анализа было обнаружено значительное количество продуктов испарения из вольфрамовой губки катода (Ba, O, Ca, Al). Обнаружены химические элементы покрытия эмитирующей поверхности катода из состава пленки (Os, Ir), особенно в центральной части сеток, которые обычно не обнаруживаются при исследовании после испытаний КСУ с сетками из гафния с наработкой менее 100 h, элементы припоя катодного узла (Co, W) и припоя блока электродов (Cu) (табл. 2).

Несмотря на значительное количество адсорбированных продуктов испарения с катода, во время длительной наработки приборов в ЛБВ с сетками из АПГ при повышенной температуре катода и скважностях от 100 до 4 паразитный ток термоэлектронной эмиссии не был зарегистрирован.

Полученные результаты подтверждают перспективность использования АПГ в качестве материала сеточных структур для мощных СВЧ электровакуумных приборов.

4. Теоретическое исследование взаимодействия бария и оксида бария с поверхностью сеток из АПГ

Теоретическое исследование влияния адсорбированных на поверхность АПГ бария и оксида бария на величину работы выхода электронов и энергию связи проводилось с помощью метода функционала плотности (DFT), реализованного в программном пакете

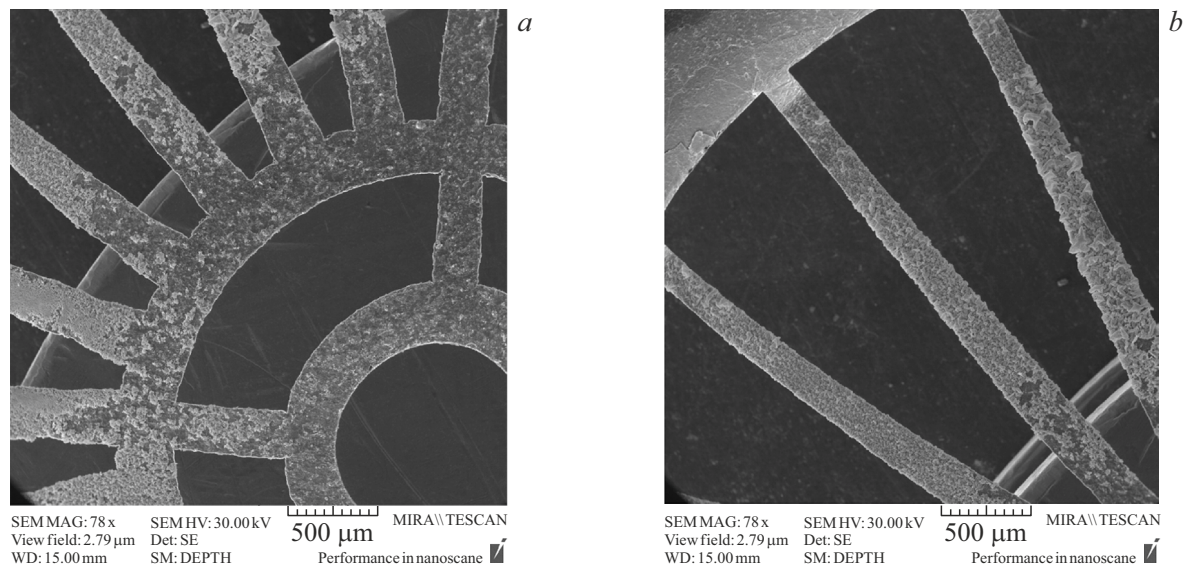


Рис. 2. Теневая сетка. Вид со стороны катода: *a* — центральная часть с кольцевыми перемычками, *b* — периферийная часть с радиальными перемычками.

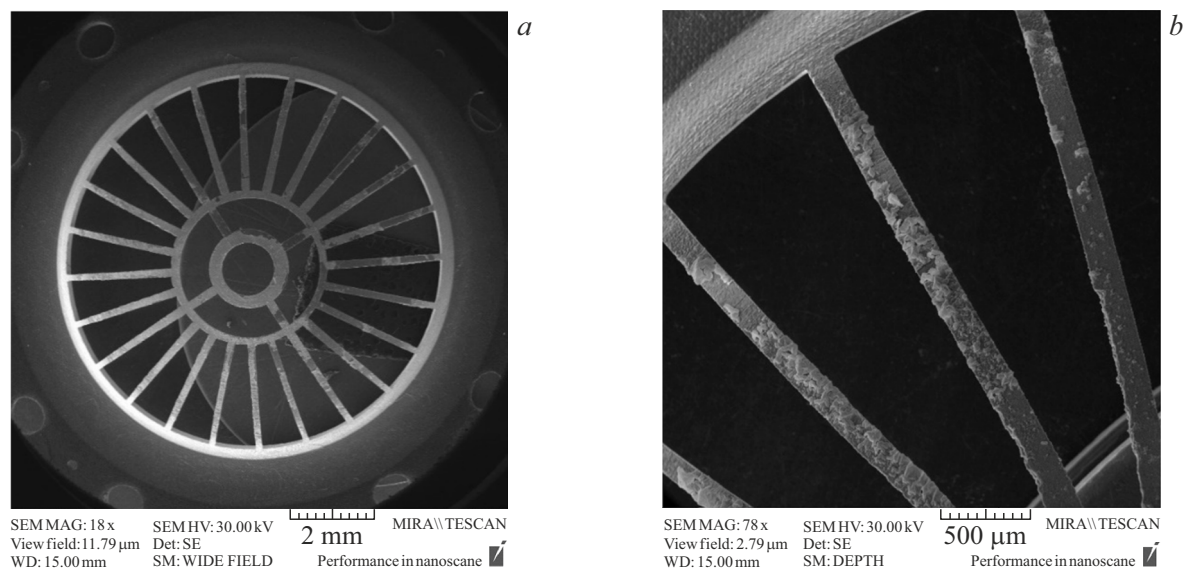


Рис. 3. Управляющая сетка. Вид со стороны катода: *a* — общий вид, *b* — периферийная часть.

Siesta [16]. Псевдопотенциалы для атомов углерода, бария и кислорода были взяты из базы данных Simune [17]. Обменно-корреляционное взаимодействие описывалось с помощью обобщенного градиентного приближения (generalized gradient approximation, GGA) в формулировке Пердю, Бурке и Эрнзерхофа (Perdew–Burke–Ernzerhof, PBE) [18]. Ван-дер-ваальсовое взаимодействие графеновых слоев в составе АПГ моделировалось с применением DFT-D2 коррекции дисперсии Гримме. Электронные волновые функции строились как линейные комбинации атомно-центрированных базисных функций в полной форме DZP (Double Zeta + Polarization) атомных орбиталей, включая поляризационные орби-

тали с отсечкой 600 Ry. Для разбиения первой зоны Бриллюэна обратного пространства применялся подход Монкхорста–Пака с сеткой $4 \times 4 \times 1$. Для исследования поведения системы „АПГ + Ва/ВаО“ при различных значениях температуры применялся метод квантовой молекулярной динамики „Anneal“. Варьируемыми параметрами являлись все координаты всех атомов ячеек и длины векторов трансляции. Энергия связи бария/оксида бария с АПГ рассчитывалась как разность полной энергии E_{total} системы „АПГ + Ва/ВаО“ и энергий пирогрфита, и Ва/ВаО. Работа выхода W_F электронов, эмитированных поверхностью „АПГ + Ва/ВаО“ в вакуум, определялась как разность энергии электрона E_{vac} (вблизи поверх-

Таблица 2. Химический состав адсорбированного на сеточных электродах вещества

Химический элемент	Количество напыления на теневой сетке, mass %	Количество напыления на управляющей сетке, mass %
Ba	7–71	10.7–61.3
O	7–39	13.59–39.4
Ca	0.81–8	0.6–5.29
Al	0.12–7.24	0.07–11.02
Os	0.39–2.16	0.41–5.5
Ir	0.33–0.85	0.47–1.82
Co	0.31–70	0.89–44.51
W	0–2.44	0–12.33
Cu	0.12–0.4	0.11–0.58

ности) и энергии Ферми E_F , а энергия E_{vac} — из решения электростатического уравнения Пуассона для самосогласованного поля, которое учитывало вклад всех ионных остовов атомной решетки.

Кристаллическая суперъячейка АПГ включала несколько графеновых слоев. Количество слоев было установлено предварительным исследованием закономерности изменения работы выхода электронов с увеличением количества графеновых слоев в ячейке. При достижении в ячейке пяти слоев и более работа выхода составила ~ 4.5 eV, что соответствует работе выхода графита. Количество атомов в каждом слое выбиралось таким образом, чтобы его размеры соответствовали кристаллическим ячейкам бария и окиси бария.

В первую очередь было исследовано влияние на работу выхода неоднородности распределения адсорбированных кластерных образований Ва/ВаО. Для этого были построены атомистические модели, содержащие одинаковое количество атомов углерода и Ва/ВаО, равномерно и неравномерно распределенные по поверхности. В этом случае суперъячейки моделей включали только два графеновых слоя для снижения затрачиваемых вычислительных ресурсов и времени расчетов при DFT-вычислениях. На рис. 4 представлены суперъячейки моделей. В случае однородного распределения Ва/ВаО рассмотрены моноатомные пленки, располагающиеся на расстояниях 3.44 и 3.45 Å соответственно (рис. 4, *a, c*). При неоднородном распределении Ва/ВаО образовывались фрагментарные покрытия в виде отдельных кластерных структур различного размера, подобно данным, представленным на рис. 2 и 3. Соответствующие суперъячейки атомистических моделей показаны на рис. 4, *b, d*, при этом высота Ва-кластеров над поверхностью углеродного слоя составила ~ 10.1 – 17.8 Å, высота ВаО кластеров — ~ 14.3 Å. Расстояния Ва–графен и ВаО–графен остаются практически прежними — 3.47 и 3.42 Å. В случае Ва суперъячейки содержат 468 атомов (из них 36 Ва-атомов), в случае ВаО — 504 атома (36 Ва-атомов и 36 О-атомов). Энергия связи Ва составляет

1.57 eV (на атом бария), что несколько меньше энергии связи оксида бария, которая равна 2.55 eV (на комплекс ВаО). Расчеты работы выхода показали, что неоднородность распределения Ва приводит к увеличению работы выхода всего лишь на 3.7 % от величины 2.16 до 2.24 eV. Неоднородность расположения ВаО также приводит к возрастанию работы выхода на 2.3 % от 3.87 до 3.96 eV. Эти расчеты проводились при температуре 300 К. Таким образом, неоднородность не влияет заметным образом на работу выхода, поэтому далее было исследовано однородное покрытие углеродной структуры адсорбирующими веществами.

Проведены исследования изменения работы выхода с увеличением количества слоев Ва/ВаО кристаллических пленок на поверхности пятислойного АПГ. Монослойные кристаллические пленки Ва и ВаО образовывали гексагональную структуру, повторяя рисунок поверхности, на которую они адсорбировались (рис. 4, *a, c* соответственно). Их элементарные ячейки с пятью углеродными слоями показаны на рис. 5, *a, b*, послойное наращивание пленок проводилось до шести атомных слоев. Характер изменения работы выхода W_F (при 300 К) можно видеть на рис. 5, *c*. Для адсорбированного бария тенденция изменения W_F ожидаема, поскольку при появлении бария она снизилась от значения 4.49 eV, характерного для пирографита, до 2.16 eV, и далее, начиная с третьего слоя до шестого, стабилизировалась соответственно величине работы выхода кристаллического бария — 2.5 eV. Т.е. работа выхода пленки „АПГ + Ва“ определяется величиной W_F бария. Совершенно другой характер изменения величины W_F обнаружила пленка „АПГ + ВаО“: по мере роста количества слоев ВаО работа выхода увеличивается, достигая величины 5.14 eV при шести слоях оксида бария. Для объяснения такого эффекта были проведены дополнительные исследования, а именно была рассчитана работа выхода кристаллической гексагональной шестислойной структуры ВаО, образовавшейся на поверхности АПГ. Ее работа выхода $W_F = 5.41$ eV, что значительно больше работы выхода для кубического кристалла ВаО — 1.61 eV. Это объясняет значительное повышение работы выхода пленки „АПГ + ВаО“ по сравнению с чистым АПГ.

Следующим важным этапом было исследование влияния высоких значений температуры на поведение системы „АПГ + Ва/ВаО“, которое проводилось методом квантовой молекулярной динамики при значениях температуры 800 °С–900 °С [1]. В результате серии численных экспериментов установлено, что при таких значениях температуры уже в первые десятки пикосекунд часть слоев адсорбированной Ва-пленки покидала ее, и этот процесс продолжался на протяжении действия указанных значений температуры. При этом ВаО-пленка при таких значениях температуры не отслаивалась, что обусловлено большим значением энергии связи слоев этой пленки по отношению к АПГ. Это позволяет предположить, что на поверхности АПГ, выступающего в качестве материала сеток в составе КСУ, большая

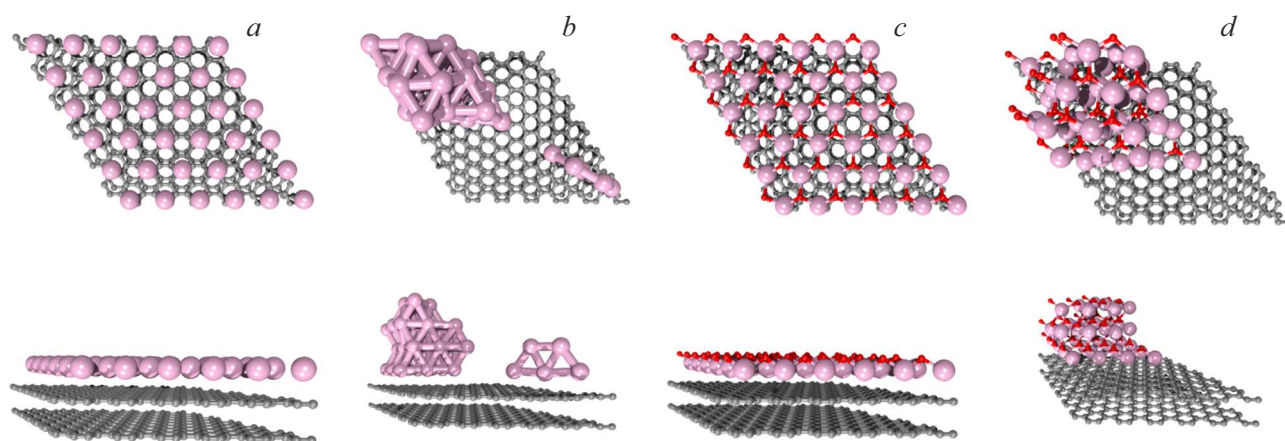


Рис. 4. Суперъчейки атомистических моделей пленок „АПГ + Ba/BaO“: *a* — однородное распределение бария; *b* — неоднородное распределение бария; *c* — однородное распределение BaO; *d* — неоднородное распределение BaO (серым цветом отмечены атомы углерода, розовым — бария, красным — кислорода). Здесь АПГ представлен двумя углеродными слоями.

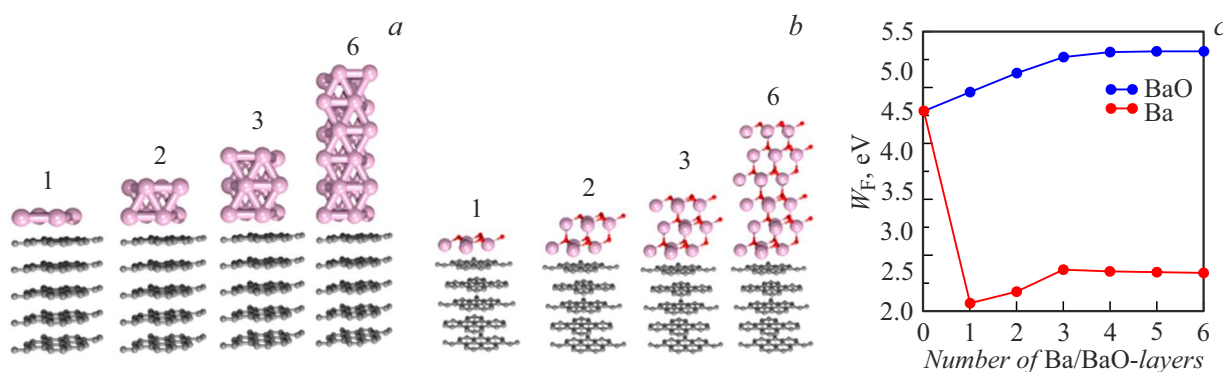


Рис. 5. Пленки „АПГ + Ba/BaO“: *a* — атомистические ячейки моделей пленок „АПГ + Ba“; *b* — атомистические ячейки моделей пленок „АПГ + BaO“; *c* — график изменения работы выхода при наращивании количества слоев Ba/BaO.

часть адсорбированного материала представляет собой оксид бария, а не барий. И, как итог, работа выхода АПГ + адсорбаты определяется повышенной работой выхода системы „АПГ + BaO“, равной ~ 5.14 eV, что и объясняет наблюдаемое в эксперименте отсутствие паразитного термоэмиссионного тока и, как следствие, повышение эффективности работы КСУ.

Заключение

Экспериментальные и теоретические исследования показали высокие антиэмиссионные и прочностные свойства сеточных структур из АПГ, размещенных вблизи эмитирующей поверхности МПК, в диапазоне температур сеточных электродов 800°C – 900°C при температурах катода 1080°C – 1150°C . Молекулярно-динамическое моделирование с применением квантово-механического метода функционала плотности показало, что работа выхода АПГ в условиях интенсивного напыления продуктов испарения с катода возрастает до значений ~ 5.14 eV. Испытания КСУ в приборе в те-

чение 900 h при повышенной температуре подтвердили отсутствие паразитного тока термоэлектронной эмиссии в цепи катод–управляющая сетка.

Внедрение разработанных КСУ для мощной импульсной ЛБВ позволит повысить надежность и долговечность мощных импульсных электровакуумных приборов.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Благодарность

Авторы выражают благодарность доценту кафедры физической химии СГУ А.В. Ушакову за проведение исследований кристаллической решетки образца АПГ.

Список литературы

- [1] Р.Ю. Богачев, Д.А. Бессонов, С.Д. Журавлев, Т.М. Крачковская, В.И. Шестеркин. Электронная техника, Сер. 1. СВЧ-техника, **3** (563), 64 (2024).

- [2] Ю.А. Григорьев, Б.С. Правдин, В.И. Шестеркин. Обзоры по электронной технике. Сер. 1. Электроника СВЧ, **7** (1246), 71 (1987).
- [3] T.M. Gardiner. Intern. Conf. Microwave Tubes in Syst.: Problems Prospects, 1984.
- [4] J. Jiang, B. Jiang, C. Ren, T. Feng, X. Wang, X. Liu, S. Zou. J. Vacuum Sci. Technol. A: Vacuum, Surfaces and Films, **23** (3), 506 (2005). DOI: 10.1116/1.1894726
- [5] В.А. Смирнов, А.В. Коннов. Электронная техника. Сер.1. СВЧ-техника, **2** (562), 23 (2024).
- [6] I.P. Melnikova, A.V. Lyasnikova, S.V. Maltseva. Lett. Mater., **7** (3), 218 (2017). DOI: 10.22226/2410-3535-2017-3-218-221
- [7] A. Shih, C.R.K. Marrian, G.A. Haas. In: Appl. Surf. Sci., **24**, 415 (1985).
- [8] V.G. Kuznetsov, D.K. Kostrin. J. Phys.: Conf. Ser., **1954**, 1 (2021). DOI: 10.1088/1742-6596/1954/1/012026
- [9] A. Latini, M. Tomellini, L. Lazzarini, G. Bertoni, D. Gazzoli, L. Bossa, D. Gozzi. PLOS ONE, **9** (8), 1 (2014). DOI: 10.1371/journal.pone.0105788
- [10] M.K. De Pano, S.L. Hart, A.A. Hanna, A.C. Schneider. 40th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit, Fort Lauderdale (American Institute of Aeronautics and Astronautics Florida, USA, 2004), p. 1.
- [11] J. Heikkinen, E. Petrola, N. Wester, J. Koskinen, T. Laurila, S. Franssila, V. Jokinen. Micromachines, **10** (510), 1 (2019). DOI: 10.3390/mi10080510
- [12] В.И. Шестеркин, Т.М. Крачковская, П.Д. Шалаев, Л.Т. Баймагамбетова, С.Д. Журавлев, Д.И. Кириченко, Р.Ю. Богачев. Радиотехника и электроника, **67** (10), 1 (2022). DOI: 10.31857/S0033849422100102
- [13] С.Д. Журавлев, Р.Ю. Богачев, В.И. Роговин, А.И. Петросян, В.И. Шестеркин, Б.А. Гризбил, В.П. Рябухо, А.А. Захаров. Электронная техника, Сер.1, СВЧ-техника, **4** (539), 45 (2018).
- [14] Д.А. Бессонов, Р.Ю. Богачев, С.Д. Журавлев, Т.М. Крачковская, В.И. Шестеркин. Способ совместной прошивки двойных сеточных структур методом лазерной абляции (Пат. № 2831606. Заявл. 09.04.2024. Оpubл. 11.12.24)
- [15] Р.Ю. Богачев, Д.А. Бессонов, С.Д. Журавлев, Т.М. Крачковская, Т.Н. Соколова, В.И. Шестеркин. Способ неразъемного соединения деталей из углеродосодержащих материалов с деталями из металлов методом лазерного заклепывания (Заявка на изобретение № 2024105105 от 27.02.2024)
- [16] J.M. Soler, E. Artacho, J.D. Gale, A. García, J. Junquera, P. Ordejón, D. Sánchez-Portal. J. Phys. Condensed Matter, **14** (11), 2745 (2002). DOI: 10.1088/0953-8984/14/11/302/
- [17] J. Oroya, A. Martín, M. Callejo, M. García-Mota, F. Marchesin. Pseudopotential and numerical atomic orbitals basis dataset. In SIMUNE Atomistics (www.simuneatomistics.com)
- [18] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof. Phys. Rev. Lett., **77** (18), 3865 (1996). DOI: 10.1103/PhysRevLett.77.3865