

УДК 544.261

Спектроскопия колебательных состояний дефектных кластеров карбида кремния

Соколенко Евгений Валентинович, доцент
Слюсарев Геннадий Васильевич, профессор
Юшина Нелли Алексеевна, студент
Северо-Кавказский федеральный университет, Россия, г. Ставрополь

Аннотация. Методом DFT рассчитаны колебательные моды чистых и дефектных кластеров карбида кремния. Установлено определяющее влияние дефектности структуры и состояния поверхности на структуру колебательных спектров.

Ключевые слова: колебательные моды, комбинационное рассеяние; ИК-Фурье спектроскопия, нанокластеры, вакансии, примесные дефекты.

ВВЕДЕНИЕ

Повышенный интерес к карбиду кремния (SiC) и его политипам связан с возможностью получения высокочастотных, высокотемпературных и стойких к радиации устройств [1]. Особенно интересен кубический карбид кремния (3C-SiC) со структурой цинкового сфалерита, который имеет ширину запрещенной зоны ΔE_g 2,3 эВ при 300К и является альтернативой стандартным применяемым материалам, таким как гексагональный карбид кремния (4H-SiC) или нитрид галлия (GaN) [2, 3]. В тоже время простая кубическая структура позволяет исследовать природу внутренних дефектов в SiC. Среди всех политипов SiC кубический кремниевый карбид (3C-SiC) проявляет самую высокую электронную подвижность [4] и является единственным материалом, который может быть гетероэпитаксиально выращен на кремниевой (Si) подложке, при этом оптическими свойствами можно управлять, варьируя толщиной и концентрацией легирующей примеси [5].

Инфракрасная спектроскопия с преобразованием Фурье (FTIR) коэффициента отражения и рамановское рассеивание используются для оценки качества полученных материалов, в первую очередь состояния поверхности пленок выращенных методом химического парофазного осаждения (CVD) 3C-SiC пленок на Si [1,6,7]. При этом преимущественно наблюдаются широкие полосы в результате сложения колебательных мод в интервале частот 750-1000 см^{-1} [8,9]. Обнаружено также влияние условий получения и температуры отжига структур на ИК спектры пропускания в области частот 800 и 960 см^{-1} , соответствующие TO- и LO-фононам, характерных для тетраэдрических связей кристаллического SiC. Смещение TO-фононов SiC в область волновых чисел выше значения 800 см^{-1} обусловлено малыми размерами кристаллитов SiC (≤ 3 нм) и увеличением вклада их поверхностей в ИК-поглощение [10,11]. В зависимости от варьирования параметров температуры и атмосферы отжига наблюдается изменение амплитуды спектров ИК-пропускания от имплантированных углеродом слоев Si для частот 700 см^{-1} , 750 см^{-1} , 800 см^{-1} , 850 см^{-1} , 900 см^{-1} [12,13,14,15].

Авторы ряда работ [16,17,18,19] считают, что появление полосы поглощения в области 960 см^{-1} не зависит от типа подложки Si, степени ее легирования и ориентации, потока CO, его давления, наличия или

отсутствия SiH₄. Она образуется во всех случаях роста SiC методом топомеханического замещения атомов (без добавки газа SiHCl₃), следовательно, за нее ответственны углерод-вакансионные структуры.

Для исследования конфигурации и свойств вакансий углерода и кремния в SiC использовались Ab initio методы моделирования в формализме теории возмущений функционала плотности (DFT) [20,21,22,23]. Вычислительными методами из первых принципов исследованы в 3C-и 4H-SiC электронные, структурные и вибрационные свойства маленького кластера междоузельного углерода и антиструктурные кластеры [24,25,26,27].

В связи с этим актуальной задачей является квантово-механический расчет колебательных состояний кластеров 3C-SiC, включающих различные собственные и примесные дефекты, а также влияние поверхности. Особый интерес представляет взаимодействие атома углерода и кремниевой вакансии V_{Si} в кремнии, создающих пары дефектов C + V_{Si} . Целью настоящей работы было изучение влияния различных дефектов на структуру колебательных спектров, и в том числе выяснение природы полосы 960 см^{-1} .

МЕТОДИКА РАСЧЕТОВ

Для изучения влияния примесных дефектов на электронную структуру нанокластеров (НК) карбида кремния нами применялся метод, основанный на теории функционала плотности (DFT) [28]. В данной работе с помощью метода DFT с обменно-корреляционным потенциалом B3LYP рассчитаны равновесная кристаллическая структура, зонная и колебательные моды чистых и легированных акцепторно-донорными примесями нанокластеров, а также кластеры с вакансиями углерода и кремния. Вычисления выполнялись программой Q-chem, которая поддерживает расчет возбужденных состояний молекулы в геометрии основного состояния, подходящий для абсорбционной спектроскопии.

Анализ структуры спектров поглощения на основе расчетных колебательных мод представляет некоторую трудность, вследствие того, что однотипные группы атомов имеют различные колебательные частоты. Это связано с локальным искажением кристаллической решетки, особенно в случае легирования примесями. Полученные в эксперименте спектры имеют вид системы широких полос, поэтому для

повышения надежности интерпретации экспериментальных результатов мы преобразовали расчетный спектр, накладывая гауссово уширение на все колебательные моды, и затем их суммировали: $p(\nu) = (2\pi\sigma^2)^{-1/2} \sum_0 p_{00} [-(\nu - \nu_0)^2/2\sigma^2]$ [29]. Параметр уширения σ принимали равным 5 см^{-1} (это соответствует спектральному разрешению экспериментальных спектров [30]). Положение и интенсивность таких полос гораздо лучше характеризуют структуру и состав НК.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Мы оценили вклад собственных и примесных дефектов, а также влияние поверхности на ИК спектры. Неэквивалентные состояния создают разнообразные колебательные моды, поскольку искажения структуры снимают ограничения с запрещенных переходов. Значительное влияние оказывают поверхностные атомы, в т.ч. водород, фтор, хлор. Моды, связанные с водородом наблюдаются во всем интервале частот, но преобладают выше 2500 см^{-1} . На этом фоне заметно влияние примесных атомов как сдвиг частот (рис.1, рис 2, табл. 1, табл. 2.).

Таблица 1. Спектры ИК поглощения нанокластеров карбида кремния

Стех.	V _c	BN	BP	AlN	BeO	B ₂ -V _c	W	Cl
230	230	230	230	231	225	230	225	
265	265	270	265	270	270	265 _{BC}	270	
	285							298
		300			308 _{BeO}		310	315Cl ₂
340	345	340	340	350	335	343 _{BC}	340	330
	372	360			360,375 _{BeO}	358	360	355Cl
390	390V _c	385	385 _{BP}	386	393 _{SiO}	390 _{SiC}	395	
		425 _{BN}	420	415	410 _{SiO}	420 _{SiC}	408	402Cl
					430 _{SiO,BeC}		430	
446	447		445 _{BP}	450	451	445V _c	451	
	465		473 _{BP}	474 _{AlN}	471 _{BeC}	455V _c		
480	485	480		480 _{AlN}	485 _{Be,O}	478V _c		480
500H		510	508 _{BP}	505	515 _{SiO}		514	505
	525	530H ₂			530 _{BeC}	530H		523
540H	550		542H ₂	541H	552 _{SiO}	550 _{VcSiC}	552H	540 _{SiCl}
560H		560 _{BC}		568H		570 _{SiC}	580	569 _{SiCl}
585	580		585	587 _{AlC}	580 _{SiO}	590V _c	591	592 _{SiCl}
610	615	608 _{BC}	608H	616 _{AlN}	620	620 _{Vc}		
628H ₂		622	620	630 _{AlN}	630			
657	650		650H	650 _{AlC}	674H	674H	675	660 _{SiC}
680H	690H	680H		680H				
	700H		700H	690 _{SiN}		700H		729,756
798	800	800	795		770,795 _{SiO}	750	790	775,792
817	820	822 _{SiN}	816 _{BP}	813	815 _{SiC}	810,820 _{SiC}	810	808,816
	835		840 _{BSi}		835H		830	829,842
853H	858H	856 _{BC}		852H	852 _{SiC}	857H	852	
874	885	875H	875H	880	878H	872H	890	870
903	908	903 _{BC}	902H	907	900	908 _{Si-C-B}	910	
960H	960H	960H ₂	960H	955H ₂	956H ₂	956H ₂		
		984 _{BC}					972H	
		1017 _{BC}			1020H	1020 _{BC}	1028H	
			1030H	1040H		1050 _{BC}	1061H	

Табл. 2. Рамановские спектры нанокластеров карбида кремния

Стех.	V _c	BN	BP	AlN	BeO	B ₂ -V _c	W	Cl
138	135	132	140	140	130	130	147	130 _{Cl}
160	160	155	155	160	150,170	160		162 _{Cl}
185	186	190	175	185	190 _{BeC}	180H	190H	
						195		
213	213	218	213	214	210 _{BeC}	210	203H	220
245	227			250	225 _{BeC}	230		233
268	268	270	266	270	268 _{BeO}	260	260	
	290				290 _{BeC}	290	290H	297
305		300	300	310	308 _{BeO}	310	310H	312
335	330	340	330	340	330 _{BeO}		330H	330

Стех.	V _c	BN	BP	AlN	BeO	B ₂ -V _c	W	Cl
360				365	360	360	380	357
370		380			380 _{BeC, SiO}			
	390 _{V_c}			385 _{AlN}				
415							400	401
		422 _{BN}			430 _{SiO, BeC}		420	427
					450 _{SiO, BeC}		450	
	470 _{V_c}		475		470 _{BeC}	475	470	480
480	490 _{V_c}			480 _{AlN}	485 _{SiO, BeC}	490 _{BC}		
500	500	500	500 _{BP}		501 _{SiO, BeC, BeO}			505
519			510 _{BP}	508 _{SiC}			510	523
540	546H ₂	540H ₂	545	540H	540 _{SiO}	540H ₂	542H	540
565	565	565		560H	575 _{BeC}	570	577	568
583	590		580	590		590		591
621	615	600 _{BN}	620 _{BP}		620H	620	607	
640	640	640 _{H₂}	648	640	640H	640H ₂	625	
	675		665			665 _{BC}	660,675	660 _{yz,л}
700	709H	703	696 _{BP}	707	697H	710H		
725	735	745	725 _{SiC}	735	730H	730H	722	725 _{ClC}
750	755		750 _{SiC}	757	745H	753	742	757
	770						775	777
787	790	790 _{SiN}	787 _{BP}	790		800		795
812	813	810 _{SiN}	810 _{BP}	820 _{SiC}		808	800	805
845	838					830 _{BC}	830	828,843
870	860	857,875	868	856		860,870 _{BC}	875	873
890	880	890	890	874		885 _{BC}	890	
		900 _{BN}		910 _{SiC}		910 _{BC}	900	
958H ₂	958H	958H ₂	960H	956H ₂	953H	958H ₂	972H ₂	
1030H	1010H	1055H	1063H	1045H		1020,1050 _{BC}	1027H	

В таблицах использованы сокращения: стех. – кластер Si₃₄C₃₄H₅₆; V_c – Si₃₄C₃₃H₅₆-V_c, BN – Si₃₃BNC₃₃H₅₆, BP – Si₃₃BPC₃₃H₅₆, AlN – Si₃₃AlNC₃₃H₅₆, B₂-V_c – Si₃₂B₂C₃₃H₅₆-V_c, BeO – Si₃₃BeOC₃₃H₅₆, W – w-SiC₁₇₂, Cl – Si₃₄C₃₄Cl₅₆

Курсивом выделены деформационные колебания, полужирным шрифтом – возможные аналитические линии.

В Рамановских спектрах почти все выделенные колебательные частоты (табл 2) связаны дефектными группами атомов, а в ИК спектрах такая связь слабее. Следовательно, Рамановские спектры позволяют надежнее выделять дефектные группы. В любом случае для надежной интерпретации экспериментальных спектров желательно проводить параллельно расчет модельных спектров и использовать весь набор линий.

Дефекты, включающие вакансии углерода, приводят к появлению дополнительных полос в спектрах поглощения. Интервалы частот, полученные на разностном спектре кластеров Si₃₂B₂C₃₃H₅₆-V_cSi₃₄C₃₄H₅₆, включают моды с участием бора. Структура вюрцита (wSiC₁₇₂) принципиально не изменяет положения полос максимумов поглощения, но происходит перераспределение интенсивностей. Среднее межатомное расстояние Si-C практически совпадает (различие 0,2%) для всех рассмотренных кластеров. Рост размеров основного карбид-кремниевое кластера с одной стороны уменьшает долю водородных атомов, а с другой стороны – делает решетку более жесткой, поэтому интенсивность колебаний кремний ↔ углерод снижается относительно водородных связей.

Оригинальные результаты, полученные в лаборатории «Фазовых переходов» под руководством С.А.Кукушкина, базируются на модели дилатацион-

ных диполей межузельный углерод + вакансия кремния. Установлено отсутствие полосы поглощения в области 960 см⁻¹ в ИК-спектрах пленок SiC, синтезированных при оптимальном соотношении давлений газов CO и трихлорсилана (SiHCl₃). [16]. В ИК-спектрах, полученных нами на модели нанокластера Si₃₄C₃₄Cl₅₆, также нет полосы поглощения в области 960 см⁻¹.

Элементарный расчет частоты колебания данного упругого диполя, проведенный в работе [16], показал хорошее совпадение расчетного значения частоты колебаний диполя с обнаруженным ее экспериментальным значением в области 960 см⁻¹. Квантово-механические расчеты обосновывают гипотезу об образовании связанного состояния C + V_{Si} в кремнии при топохимическом синтезе карбида кремния [27].

Для подтверждения связи колебательной моды 960 см⁻¹ с предполагаемым дефектом мы построили и рассчитали ИК спектры трех кластеров, включающих предполагаемый дефект. Вначале точно воспроизвели описанный диполь (Si₆₇CH₅₆ с дипольным дефектом C_i+V_{Si}), в области 960 см⁻¹ колебательных мод не обнаружили, дефекту соответствуют частоты продольных колебаний 906 и 710 см⁻¹. Затем диполь внедрили на границе кремния и карбида кремния: (кластер Si₄₈C₂₀H₅₆), для него получены моды про-

дольных колебаний 908, 901 и 897 см^{-1} . И наконец, дефект $\text{C}_{\text{Si}}(\text{Si}_{67}\text{CH}_{56})$, получены моды продольных колебаний Si-C в области 662-715 см^{-1} .

По нашему мнению будет полезным для установления природы дефектов исследование структурно-чувствительных свойств: спектров поглощения (возбуждения люминесценции), термостимулированной люминесценции и проводимости и фракционного термовысвечивания, поскольку эти свойства можно моделировать при расчетах плотности энергетических состояний в запрещенной зоне и ее окрестности.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

ИК спектроскопия позволяет исследовать низкоразмерные (пленки, наночастицы, кластеры) струк-

туры. Раман-спектры также чувствительны к разупорядочению структуры. Использование различных методов колебательной спектроскопии позволяет надежно выявлять наличие собственных и примесных дефектов.

Для определения атомов, пассивирующих поверхность, можно использовать интервалы волновых чисел: 500-550 см^{-1} для хлора, 600-650 см^{-1} для фтора и 2100-2200 см^{-1} для водорода. Для оценки дефектного состояния кластеров желательно использовать несколько частот, моды которых практически не накладываются на другие, но не всегда такие колебательные моды непосредственно связаны с анализируемым дефектом.

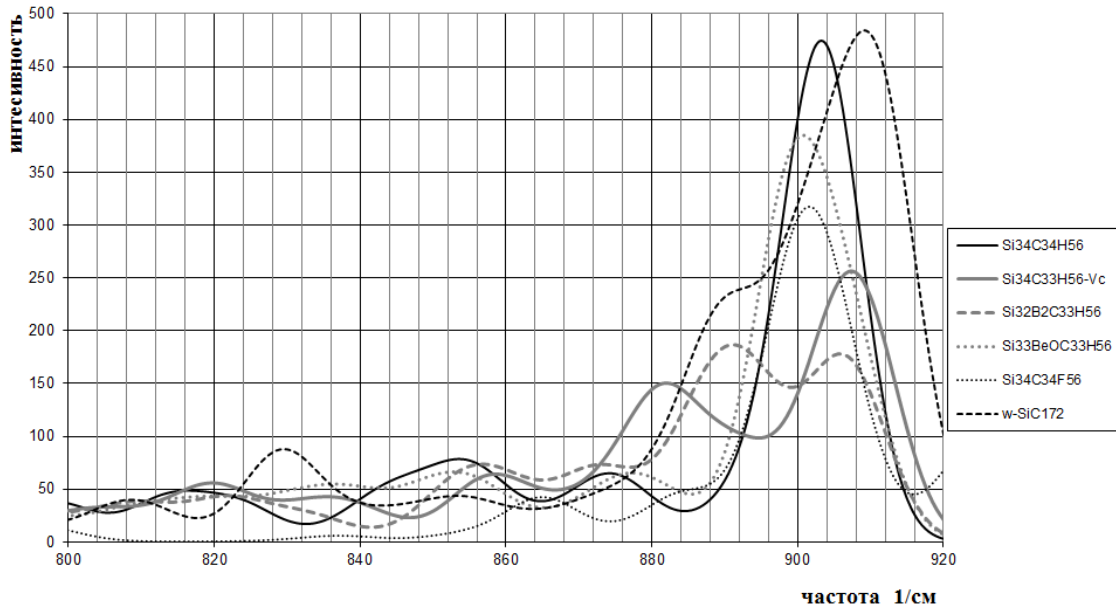


Рис.1. Спектры FTIR нанокластеров $\text{Si}_{34}\text{C}_{34}\text{H}_{56}$, $\text{Si}_{34}\text{C}_{33}\text{H}_{56}\text{-Vc}$, $\text{Si}_{32}\text{B}_2\text{C}_{33}\text{H}_{56}\text{-Vc}$, $\text{Si}_{33}\text{BeOC}_{33}\text{H}_{56}$, $\text{Si}_{34}\text{C}_{34}\text{F}_{56}$, w-SiC₁₇₂

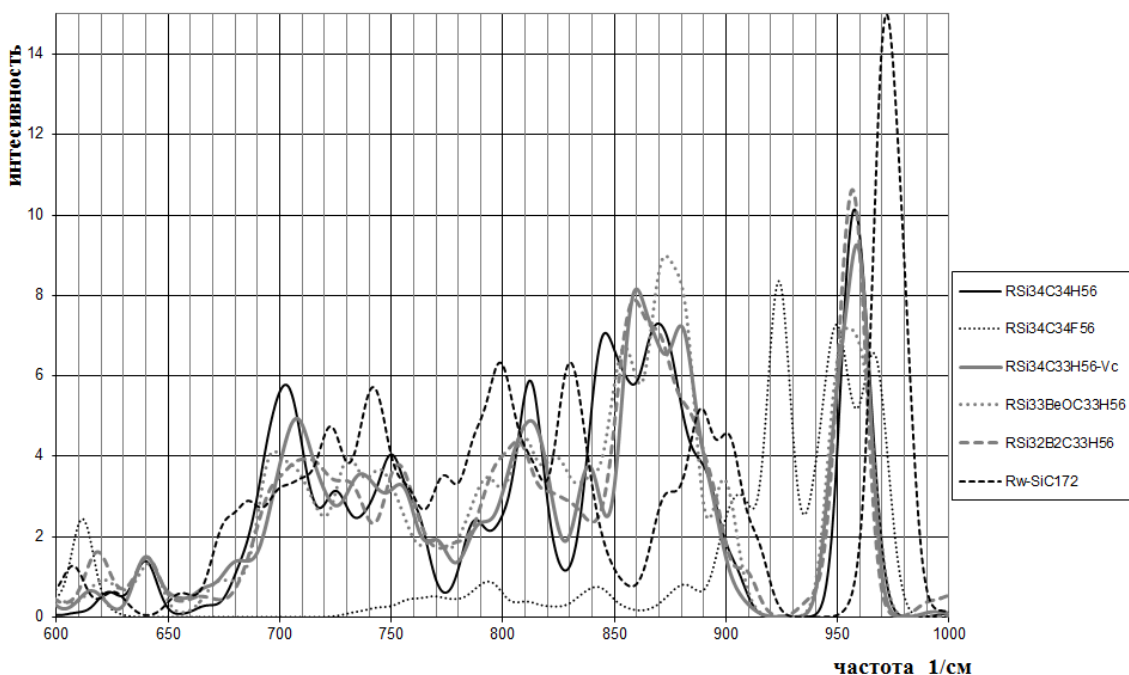


Рис.2. Рамановские спектры нанокластеров $\text{RSi}_{34}\text{C}_{34}\text{H}_{56}$, $\text{RSi}_{34}\text{C}_{33}\text{H}_{56}\text{-Vc}$, $\text{RSi}_{32}\text{B}_2\text{C}_{33}\text{H}_{56}\text{-Vc}$, $\text{RSi}_{33}\text{BeOC}_{33}\text{H}_{56}$, $\text{RSi}_{34}\text{C}_{34}\text{F}_{56}$, R_w-SiC₁₇₂

Литература:

1. Feng Z.Ch. Optical properties of cubic SiC grown on Si substrate by chemical vapor deposition//Microelectron. Eng. 2006. V.83. P. 165–169. doi:10.1016/j.mee.2005.10.044
2. Itoh H., Kawasuso A., Ohshima T., Yoshikawa M., Nashiyama I., Tanigawa S., Misawa S., Okumura H., Yoshida S. Intrinsic defects in cubic silicon carbide//Phys. Status Solidi (A) Applied Research. 1997. V. 162.№ 1. P. 173–198. DOI: 10.1002/1521-396X(199707)162:1<173::AID-PSSA173>3.0.CO;2-W
3. Colston G., Myronov M.E Controlling the optical properties of monocrystalline 3C–SiC heteroepitaxially grown on silicon at low temperatures//Semicond. Sci. Technol. 2017. V.32. № 11. 114005. DOI: 10.1088/1361-6641/aa8b2a
4. Eickhoff M., Möller H., Stoemenos J., Zappe S., Kroetz G., Stutzmann M. Influence of crystal quality on the electronic properties of n-type 3C–SiC grown by low temperature low pressure chemical vapor deposition// J. Appl. Phys. 2004. V. 95 (12). P. 7908–7917. doi: 10.1063/1.1728311
5. Nagasawa H., Yagi K., Kawahara T. 3C–SiC hetero-epitaxial growth on undulant Si(0 0 1) substrate//J. Cryst. Growth. 2002. V237–239(1–4 II). P. 1244–1249. doi: 10.1016/S0022-0248(01)02233-3
6. Misawa S., Yoshida S., Gonda S.-I. Epitaxial Growth of SiC Thin Films by Reactive Evaporation Shinku//Journal of the Vacuum Society of Japan. 1982. V. 25. № 11. P. 727–734. DOI: 10.3131/jvsj.25.727
7. Zinenko V.I., Agafonov Y.A., Saraykin V.V., Eremenko V.G., Roshchupkin D.V., Sedlovets D.M. Growth of SiC films on silicon substrate by cold implantation of carbon recoil atoms//Mater. Lett. 2018. V. 233. P. 115–117. DOI: 10.1016/j.matlet.2018.08.107
8. Fan J.Y., Wu X.L., Paul K. Chu Low-dimensional SiC nanostructures: Fabrication, luminescence, and electrical properties// Prog. Mater. Sci. 2006. V.51. P. 983–1031. doi:10.1016/j.pmatsci.2006.02.001
9. Nazarov A. N., Vovk Ya. N., Lysenko V. S., Turchanikov V. I., Scryshevskii V. A., Ashok S. Carrier transport in amorphous SiC/crystalline silicon heterojunctions//J. Appl. Phys. 2001. V.89. №8. P.4422–4428. DOI: 10.1063/1.1355698
10. Costantini J.-M., Miro S., Pluchery O. FTIR study of silicon carbide amorphization by heavy ion irradiations//J. Phys. D: Appl. Phys. 2017. V. 50. № 9. Номер статьи 095301 DOI: 10.1088/1361-6463/aa5614
11. Pluchery O., Costantini J.-M. Infrared spectroscopy characterization of 3C–SiC epitaxial layers on silicon//Journal of Physics D: Applied Physics. 2012. V. 45. № 49. https://doi.org/10.1088/0022-3727/45/49/495101
12. Бейсембетов И.К., Нусупов К.Х., Бейсенханов Н.Б., Жариков С.К., Кенжа-лиев Б.К., Ахметов Т.К., Сеитов Б.Ж. Инфракрасная спектроскопия ионно-синтезированных тонких пленок карбида кремния//Физика твердого тела. Вестник Нижегородского университета им. Н.И. Лобачевского. 2013. № 4 (1). С. 42–55.
13. Merle-Méjean T., Abdelmounim E., Quintard P. Oxide layer on silicon carbide powder: a FT-IR investigation//J. Mol. Struct. 1995. V. 349. P. 105–108. https://doi.org/10.1016/0022-2860(95)08720-G Getrightsandcontent
14. Silva J., Quoizola S., Hernandez E., Massines F. Silicon carbon nitride films as passivation and antireflective coatings for silicon solar cells//Surf. Coat. Technol. 2014. V. 242. P. 157–163. DOI: 10.1016/j.surfcoat.2014.01.037
15. Frischmuth T., Schneider M., Grille T., Schmid U. FT-IR analysis of high temperature annealing effects in a-SiC:H thin films//Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Engineering. 2017. V. 10246. Номер статьи 102460R Smart Sensors, Actuators, and MEMS VIII Conference 2017; Barcelona; Spain; 8 May 2017 до 10 May 2017; Код 128882. DOI: 10.1117/12.2266844
16. Грудинкин С.А., Кукушкин С.А., Осипов А.В., Феоктистов Н.А. ИК-спектры углерод-вакансионных кластеров при топохимическом превращении кремния в карбид кремния//ФТТ. 2017. Т. 59, Вып. 12. С.2403–2408. DOI: 10.21883/ФТТ.2017.12.45239.173
17. Грудинкин С.А., Голубев В.Г., Осипов А.В., Феоктистов Н.А., Кукушкин С.А. Инфракрасная спектроскопия слоев карбида кремния, синтезированных методом замещения атомов на поверхности монокристаллического кремния//ФТТ. 2015. Т. 57, Вып. 12. С. 2469–2474
18. Kukushkin S.A., Osipov A.V. Mechanism of Formation of Carbon–Vacancy Structures in Silicon Carbide during Its Growth by Atomic Substitution//Phys. of the Solid State. 2018. V. 60. №. 9. P. 1891–1896. DOI: 10.1134/S1063783418090184
19. Grudinkin S.A., Kukushkin S.A., Osipov A.V., Feoktistov N.A. IR spectra of carbon–vacancy clusters in the topochemical transformation of silicon into silicon carbide//Phys. of the Solid State. 2017. V. 59. №. 12. P. 2430–2435. DOI: 10.1134/S1063783417120186
20. Shein I.R. Mechanical and Dynamic Stability of Complete and Nonstoichiometric 3C–SixCy from Ab Initio Calculations //Physics of the Solid State. 2018. V. 60. №. 10. P. 2012–2018. DOI: 10.1134/S1063783418100256
21. Gao F., Weber W.J., Xiao H.Y., Zu X.T. Formation and properties of defects and small vacancy clusters in SiC: Ab initio calculations//Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. 2009. V. 267. №. 18. P. 2995–2998. DOI: 10.1016/j.nimb.2009.06.018
22. Watanabe Y., Morishita K., Kohyama A., Heinisch H.L., Gao F. Energetics of defects in β -SiC under irradiation //Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. 2009. V. 267. №. 18. P. 3223–3226. DOI: 10.1016/j.nimb.2009.06.062
23. Liao T., Roma G. First principles defect energetics for simulations of silicon carbide under irradiation: Kinetic mechanisms of silicon di-interstitials //Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms. 2014. V. 327. № 1. P. 52–58/ DOI: 10.1016/j.nimb.2013.09.044

24. Weber J. R., Koehl W. F., Varley J. B., Janotti A., Buckley B. B., Van de Walle C. G., Awschalom D. D. *Quantum computing with defects*// PNAS. 2010. V. 107. № 19. P.8513–8518. www.pnas.org/cgi/doi/10.1073/pnas.1003052107
25. Bockstedte M., Mattausch A., Pankratov O. *Ab initio study of the migration of intrinsic defects in 3C – SiC* //Phys. Rev. B: Condens. Matter and Materials Physics. 2003. V. 68. I. 20. DOI: 10.1103/PhysRevB.68.205201
26. Mattausch A., Bockstedte M., Pankratov O. *Structure and vibrational spectra of carbon clusters in SiC*//Phys. Rev. B: Condens. Matter and Materials Physics. 2004. V. 70. I. 23. P. 1-15. DOI: 10.1103/PhysRevB.70.235211
27. Кукушкин С.А., Осипов А.В. *Квантово-механическая модель дилатационных диполей при топохимическом синтезе карбида кремния из кремния ФТТ, 2017, том 59, вып. 6. С. 1214-1217*
28. Hohenberg P., Kohn W. *Inhomogeneous Electron Gas*// Phys. Rev. 1964. V. 136. № 3. P. B864–B871. doi.org/10.1103.
29. Губанов В.А., Курмаев Э.З., Ивановский А.Л. *Квантовая химия твердого тела. М.: Наука, 1984. 304 с.*
30. Е. В. Соколенко. *Моделирование ИК спектров поглощения примесных де-фектов наноразмерных кла-стеров алмаза/ / Неорг. мат., 2014, том 50, № 3,, с. 268–274. DOI: 10.7868/S0002337X14030129 [Sokolenko E.V. Modeling of IR Absorption Spec-tra of Impurity Defects in Diamond Nanoclusters. ISSN 0020_1685//InorganicMaterials, 2014, Vol. 50, No. 3, pp. 240–246. DOI: 10.1134/S0020168514030121]*
31. Соколенко Е.В, Слюсарев Г.В. *Моделирование дефектов в структуре карбида кремния/ /Неорг. мат., 2019.Т. 55, № 1.С. 1–13. DOI: 10.1134/S0002337X19010159 [Sokolenko E.V., Slyusarev G.V. Modeling of Structural Defects in Sili-con Carbide//ISSN 0020-1685, Inorganic Materials, 2019, V. 55.№ 1.P. 88–100. DOI: 10.1134/S0020168519010151*