

AB INITIO РАСЧЕТ ДЕФОРМАЦИОННЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ ДЛЯ МЕЖДОЛИННЫХ ПЕРЕХОДОВ С УЧАСТИЕМ ФОНОНОВ В КРИСТАЛЛАХ $A^{III}B^V$ СО СТРУКТУРОЙ СФАЛЕРИТА

Для большой группы полупроводниковых кристаллов $A^{III}B^V$ впервые проведен полностью самосогласованный расчет из первых принципов процессов рассеяния электронов между нижними долинами в зоне проводимости на коротковолновых фононах. Расчет структурных постоянных кристаллов, электронных, колебательных спектров и вероятностей рассеяния проведен с единых позиций в рамках метода функционала электронной плотности. Теория не содержит никаких феноменологических предположений, касающихся относительного положения минимумов в зоне проводимости, эффективных масс носителей, межатомных сил и вероятностей рассеяния. Рассчитаны константы электрон-фононной связи (деформационные потенциалы) для актуальных переходов $\Gamma - X$, $\Gamma - L$, $X - L$ и рассеяния между неэквивалентными долинами $X - X$ и $L - L$ в зоне проводимости кристаллов AlP, AlAs, AlSb, GaP, GaAs, GaSb, InP, InAs, InSb со структурой сфалерита. Результаты сравниваются с теоретическими расчетами в феноменологической модели жестких ионов и самосогласованном методе замороженных фононов.

Введение

Успехи последних десятилетий, достигнутые в теории конденсированного состояния, позволяют с единых позиций рассчитывать из первых принципов не только электронные и колебательные состояния кристаллов в отдельности, но также и их взаимодействие. Для металлов *ab initio* расчеты параметров электрон-фононного взаимодействия с успехом проводятся достаточно давно [1]. Что касается полупроводников, то первопринципные расчеты в основном ограничены исследованием взаимодействия с длинноволновыми фононами.

В то же время существует достаточно обширный круг электронных процессов, в которых определяющую роль играют именно коротковолновые фононы [2]. Во многих полупроводниках электроны, возбужденные в одном из локальных минимумов (долине) сильным электрическим полем или лазерным импульсом могут перейти в другую долину с поглощением или испусканием коротковолнового фонона. Этот процесс называют междолинным рассеянием. Междолинное рассеяние определяет многие оптические и транспортные свойства полупроводников и приборных структур на их основе. Рассеяние на коротковолновых фононах является одним из возможных механизмов релаксации фотовозбужденных носителей и становится основным механизмом при низких концентрациях носителей и при энергиях, когда ударная ионизация невозможна [2]. Поглощение света в непрямозонных полупроводниках [3] и в полупроводниках под давлением [4] сопровождается излучением или поглощением коротковолновых фононов. Междолинное рассеяние приводит к температурно-зависящим сдвигам и уширениям запрещенных зон [5]. Влияние на транспортные свойства также весьма существенно: междолинное рассеяние меняет эффективную массу носителей, тем самым приводя к таким хорошо известным и широко используемым явлениям, как отрицательное дифференциальное сопротивление и генерация микроволнового излучения в эффекте Ганна [6]. Рассеяние между неэквивалентными долинами приводит к релаксации импульса электронов и тем самым к температурной зависимости подвижности от температуры [7].

К настоящему времени разработаны эффективные экспериментальные методы, позволяющие детально исследовать процессы рассеяния горячих носителей, такие как спектроскопия высокого временного разрешения [8], исследование субпикосекундной динамики электронов [9]. Интерпретация этих экспериментов проводится путем моделирования функции распределения электронов и дырок методом Монте-Карло [10]. Для некоторых механизмов рассеяния вероятности считаются известными, и фиксируются, как входные данные, для остальных каналов рассеяния вероятности играют роль подгоночных параметров. Эта простая модель содержит слишком много упрощающих предположений и сталкивается с проблемой большого количества феноменологических параметров, как следствие неопределенность в определении характеристик рассеяния достигает 100% [11]. Для того, чтобы обеспечить надежные исходные данные для Монте-Карловского моделирования, необходимы точные

теоретические расчеты по крайней мере для некоторых каналов рассеяния, что позволит улучшить качество подгонки остальных параметров.

Систематические теоретические исследования рассеяния электронов на коротковолновых фононах для полупроводников группы $A^{III}B^V$ к настоящему времени, насколько нам известно, проведены в феноменологической модели жестких ионов на основе эмпирического псевдопотенциала [12-14]. Приведенные в [15] *ab-initio* расчеты вероятностей рассеяния в технике замороженных фононов ограничены переходами между Γ и X долинами.

В данной статье нами предпринято теоретическое исследование из первых принципов вероятностей рассеяния электронов на коротковолновых фононах для актуальных междолинных переходов в большой группе бинарных полупроводников.

Метод расчета.

Наш полностью первопринципный расчет основан на методе функционала электронной плотности [16,17]. Методика расчета вероятностей рассеяния электронов на колебаниях решетки с произвольной длиной волны разработана нами в работах [18-20]. Мы используем приближение локальной плотности для описания зонной структуры, и теорию возмущений функционала плотности (DFPT) [16] для фононных частот и соответствующих возмущений самосогласованного кристаллического потенциала. В отличие от ранних теорий [12-14], наш расчет полностью беспараметрический. Никаких феноменологических предположений, касающихся относительного положения минимумов зоны проводимости, эффективных масс носителей, фононных спектров и вероятностей рассеяния мы не принимали. В работах [18-20] этот подход применялся нами к расчету вероятностей электрон-фононного рассеяния в GaAs и GaP. Рассчитанные нами из первых принципов вероятности рассеяния на фононах и их зависимость от давления позволили в частности объяснить зависимость от температуры и гидростатического давления времени жизни непрямого экситона в GaP [20], а также непрямого в условиях высокого давления экситона в GaAs [19,20].

Рассеяние электрона из точки \mathbf{k} в n -й зоне проводимости в точку \mathbf{k}' в n' -й зоне с поглощением или испусканием (верхний или нижний знак) должно удовлетворять законам сохранения энергии и квазиимпульса $\varepsilon_{n'\mathbf{k}'} = \varepsilon_{n\mathbf{k}} \pm \hbar\omega_{\lambda\mathbf{q}}$, $\mathbf{k}' = \mathbf{k} \pm \mathbf{q}$. Здесь $\varepsilon_{n\mathbf{k}}$, $\varepsilon_{n'\mathbf{k}'}$ энергии электрона до и после рассеяния, $\omega_{\lambda\mathbf{q}}$ - частота фонона ветви λ с волновым вектором \mathbf{q} . Вероятность рассеяния в пренебрежении когерентными процессами записывается в виде

$$P_{n\mathbf{k},n'\mathbf{k}\pm\mathbf{q}}^{\lambda} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle n, \mathbf{k} | \Delta W_{\lambda\mathbf{q}} | n', \mathbf{k} \pm \mathbf{q} \rangle \right|^2 \left(N_{\lambda\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \delta(\varepsilon_{n\mathbf{k}} - \varepsilon_{n'\mathbf{k}\pm\mathbf{q}} \pm \hbar\omega_{\lambda\mathbf{q}})$$

Здесь $N_{\lambda\mathbf{q}}$ - фононная функция распределения. Амплитуда рассеяния дается матричным элементом $\langle n, \mathbf{k} | \Delta W_{\lambda\mathbf{q}} | n', \mathbf{k} \pm \mathbf{q} \rangle$, где в наших расчетах $|n, \mathbf{k}\rangle$ и $|n', \mathbf{k} \pm \mathbf{q}\rangle$ - Кон-Шэмовские электронные состояния и $\Delta W_{\lambda\mathbf{q}}$ - возмущение Кон-Шэмовского самосогласованного потенциала, вызванное данным фононом. Характеристикой рассеяния является деформационный потенциал [12-14], связанный с амплитудой рассеяния соотношением

$$D_{n\mathbf{k},n'\mathbf{k}\pm\mathbf{q}}^{\lambda} = \sqrt{\frac{2V\rho\omega_{\lambda\mathbf{q}}}{\hbar}} \langle n, \mathbf{k} | \Delta W_{\lambda\mathbf{q}} | n', \mathbf{k} \pm \mathbf{q} \rangle$$

Здесь ρ и V - соответственно плотность и объем кристалла. Электрон-фононный матричный элемент хорошо изучен в металлах в связи с исследованием сверхпроводимости [1,16,17]. Для расчета этого матричного элемента в непроводящих кристаллах нами [18-20] была произведена необходимая модификация кода программы Espresso3.2 [17].

Результаты и обсуждение

Структура кристаллов.

Для расчета нами выбраны сохраняющие норму псевдопотенциалы с твердой сердцевиной, приведенные в [17]. С ними рассчитывались самосогласованным образом значения полной энергии кристалла в зависимости от постоянной кристаллической решетки. При расчете с использованием пакета программ Espresso3.2 [17] оказывается достаточным ограничиться 10 специальными точками. Фактор обрезания кинетической энергии E_{cut} , определяющий число плоских волн, учитываемых в разложении волновых функций для всех соединений принят равным $45 R_y$. Равновесная структура

находилась подгонкой расчетной кривой зависимости энергии от постоянной решетки к уравнению состояния в форме Мурнагана [21]. Рассчитанные значения равновесной постоянной решетки приведены в Табл. 1, и находятся в весьма хорошем согласии с экспериментом.

Табл 1

Сравнение вычисленных и экспериментальных значений постоянных решетки (10^{-8} см)
кристаллов $A^{III}B^V$

	AlP	AlAs	AlSb	GaP	GaAs	GaSb	InP	InAs	InSb
Теор.	5.401	5.589	6.096	5.337	5.604	6.057	5.785	5.970	6.387
Эксп.[24]	5.467	5.639	6.136	5.447	5.654	6.095	5.869	6.058	6.479

Зонные спектры.

При расчетных значениях постоянных решетки нами самосогласованным образом вычислены зонные спектры кристаллов $A^{III}B^V$. Детальный анализ спектров приведен в [22]. Для всех кристаллов запрещенная зона в расчете оказывается сильно заниженной, по сравнению с экспериментальной, что является хорошо известным недостатком метода функционала электронной плотности. Как установлено в работах [23], этот недостаток устраняется при учете многочастичных эффектов, причем поправки сводятся к взаимному сдвигу зон проводимости относительно валентных зон с сохранением их топологии (scissor approximation), относительные значения уровней внутри зоны проводимости при этом практически не изменяются, во всяком случае, для самых нижних зон. Типы запрещенной зоны для всех полупроводников $A^{III}B^V$ к настоящему времени надежно установлены [24], наш расчет полностью им соответствует. InP, InAs, GaSb, InSb, GaAs в нашем расчете являются прямозонными, запрещенная зона обусловлена энергетическим зазором $\Gamma_{1c} - \Gamma_{15v}$. Кристаллы AlAs, AlP, AlSb, GaP - непрямозонные, запрещенная зона обусловлена энергетическим зазором $X_{1c} - \Gamma_{15v}$ (нумерация неприводимых представлений соответствует выбору начала координат в атоме V группы). Порядок следования уровней $\Gamma_{1c}, L_{1c}, X_{1c}, X_{3c}$ в зоне проводимости в расчете также соответствует сложившимся представлениям [24].

Спектры колебаний решетки

Табл 2.

Частоты продольных фононов (ТГц) в кристаллах $A^{III}B^V$ в точке X. Экспериментальные данные из [15]^(a) [24]^(b).

	LA			LO		
	Симметрия фонона	Наш расчет	Эксперимент	Симметрия фонона	Наш расчет	Эксперимент
AlP	X_3	10.50	--	X_1	12.31	-
AlAs	X_3	6.44	6.65 ^(a)	X_1	11.76	12.08 ^(a)
AlSb	X_3	4.58	4.65 ^(a)	X_1	10.24	10.22 ^(a)
GaP	X_1	7.61	7.5 ^(b)	X_3	11.01	11.0 ^(b)
GaAs	X_3	6.65	6.80 ^(b)	X_1	7.16	7.22 ^(b)
GaSb	X_3	4.79	4.65 ^(b)	X_1	6.73	6.30 ^(b)
InP	X_1	5.72	5.8 ^(b)	X_3	10.35	9.95 ^(b)
InAs	X_1	5.40	4.8 ^(b)	X_3	6.27	6.09 ^(b)
InSb	X_3	4.51	4.3 ^(b)	X_1	4.80	4.75 ^(b)

Спектры фононов рассчитаны нами самосогласованным образом при расчетных значениях постоянных решетки по методике [16,17]. Табл. 2 иллюстрирует степень согласия расчета с экспериментом в точке X. Во всех приведенных ниже таблицах LA и LO - соответственно продольные акустические и оптические колебания. Сравнение с экспериментом для других точек высокой симметрии и типов колебаний проведено в [22] и для всех кристаллов также находятся в хорошем согласии с имеющимся экспериментом [24] и расчетами других авторов [25].

Деформационные потенциалы.

Наибольший интерес в полупроводниках группы $A^{III}B^V$ представляет рассеяние электронов между Γ - минимумом зоны проводимости и боковыми минимумами, расположенными в точках X и L зоны Бриллюэна. В соответствии с правилами отбора [26] рассеяние электронов между минимумами Γ_1 и X_1 происходит на фононах с симметрией X_1 , которые при принятом нами выборе начала

Табл 3
Деформационные потенциалы (10^8 эВ/см) для переходов ГХ в зоне проводимости. ЗФ – метод замороженных фононов, ЖИ – модель жестких ионов, DFPT – наш расчет

	$D_{A^{III}}^{\Gamma X}$				$D_{B^V}^{\Gamma X}$		
	ЗФ[15]	ЖИ		DFPT	ЗФ[12]	ЖИ [12]	DFPT
		[12]	[14]				
AlP	5.296	-	5.0	5.42	0.590	-	0.52
AlAs	6.485	4.4	5.6	6.72	0.149	2.7	0.21
AlSb	5.107	4.9	4.7	5.32	0.246	1.3	0.24
GaP	3.481	1.5	3.8	3.52	0.103	1.2	0.01
GaAs	4.134	4.1	4.0	4.17	0.574	4.7	0.47
GaSb	3.360	4.5	3.5	3.39	1.050	2.5	1.02
InP	3.265	2.3	2.9	3.53	0.426	3.7	0.18
InAs	3.686	3.2	3.0	3.92	0.484	2.8	0.29
InSb	3.004	4.9	3.6	3.21	0.595	3.3	0.60

[13,14]. Феноменологическая модель использовалась нами в [13,14] также и для расчета фононных спектров. Аналогичный подход использован в работах [12].

В работе [15] переходы из центрального минимума зоны проводимости Γ_{1c} в боковые минимумы X_{1c}, X_{3c} рассчитывались из первых принципов методом замороженных фононов. Таким образом, для этой группы переходов мы имеем возможность сравнить наши результаты также и с самосогласованным расчетом, проведенным независимым методом.

Как видно из Табл.3, оба самосогласованных метода дают близкие значения деформационных потенциалов. Незначительные различия могут быть связаны с иным выбором псевдопотенциалов и моделей обмена и корреляции, а также трудностями в выделении вклада ангармонизма в модели замороженных фононов.

Так же, как и в методе замороженных фононов, наши результаты для рассеяния на колебаниях катионов хорошо согласуются с моделью жестких ионов [12-14]. Что касается фононов, связанных с колебаниями атомов V группы, то оба самосогласованных расчета обнаруживают в сравнении с моделью жестких ионов значительные расхождения для констант рассеяния. Вслед за работой [15] мы объясняем это тем, что ввиду наличия ионной составляющей химической связи, значения плотности валентных электронов на атоме V группы существенно больше, чем на атоме III группы. Поэтому возникающее при смещениях анионов возмущение кристаллического потенциала экранируется

Табл 4
Деформационные потенциалы (10^8 эВ/см) для электронных переходов между неэквивалентными минимумами зоны проводимости, в которых участвуют только X_1 и X_3 -фононы. Верхний индекс – тип электронного перехода, нижний – тип смещений ионов. CP - наш самосогласованный расчет, ЖИ – модель жестких ионов [14].

	$D_{A^{III}}^{X_1 X_1}$		$D_{LA}^{L_1 L_1}$		$D_{LO}^{L_1 L_1}$	
	CP	ЖИ	CP	ЖИ	CP	ЖИ
AlP	7.57	8.1	0.79	0.9	0.83	0.3
AlAs	9.65	8.9	0.88	1.0	0.84	0.6
AlSb	8.95	9.4	0.85	0.2	0.37	0.4
GaP	6.72	6.0	0.22	0.5	2.13	0.6
GaAs	7.79	6.3	1.68	0.6	0.15	0.8
GaSb	6.73	6.0	1.29	0.5	0.02	0.5
InP	5.76	4.8	0.39	0.7	2.36	0.6
InAs	6.19	4.8	0.36	0.8	1.76	0.6
InSb	5.48	4.5	1.37	0.4	0.13	0.6

координат соответствуют колебаниям только атомов III группы. Рассеяние $\Gamma_1 - X_3$ происходит на фононах с симметрией X_3 , которые соответствуют смещениям только атомов V группы. Поэтому для рассеяния на X -фононах деформационные потенциалы можно ассоциировать со смещениями катионов и анионов по отдельности.

Несамосогласованные расчеты деформационных потенциалов в модели жесткого иона методом эмпирического псевдопотенциала ранее проводились нами в работах

электронами более эффективно, чем возмущение, вызванное смещением катионов, что и приводит к заметному различию в соответствующих вероятностях рассеяния. Соответственно, деформация распределения электронов при колебаниях анионов должна быть более значительной, чем для катионов. Самосогласованная теория адекватно учитывает наличие этой деформации электронной плотности в то время как модель недеформируемых ионов предполагает жесткий сдвиг электронной плотности вместе с ионом. Это и обуславливает отличие между константами электрон-фононной связи для $\Gamma - X$ переходов с участием смещений анионов в самосогласованном расчете и в модели жесткого иона.

Для процессов релаксации энергии и импульса электронов в зоне проводимости актуальными являются также и другие переходы, $\Gamma - L, L - X$,

а также переходы между неэквивалентными долинами $L-L$ и $X-X$. Метод замороженных фононов [15] не дает возможности рассчитать соответствующие константы, в то время как наш метод не имеет никаких принципиальных ограничений на выбор исходного и конечного электронных состояний, участвующих в рассеянии с участием фононов.

Как можно увидеть из Табл. 4, деформационные потенциалы для переходов между неэквивалентными $X-X$ долинами, также неплохо согласуются с рассчитанными в модели жестких ионов [13,14], что объясняется вкладом только от тех X - фононов, которые соответствуют смещениям слабо деформируемых катионов.

В отличие от X - фононов в L - колебаниях смещения катионов и анионов по симметрии не разделяются. Парциальный вклад смещений разных ионов в L - колебания определяется особенностями характера межатомных сил в разных кристаллах, которые в отличие от феноменологической модели [13,14] адекватно воспроизводятся в методе DFPT, поэтому

Табл 5

Деформационные потенциалы (10^8 эВ/см) для электронных переходов между нижними уровнями зоны проводимости, в которых участвуют только L - фононы. Верхний индекс – тип перехода, нижний – тип смещений ионов. СР - наш самосогласованный расчет, ЖИ – модель жестких ионов [14].

	$D_{TA}^{X_1L_1}$		$D_{LA}^{X_1L_1}$		$D_{TO}^{X_1L_1}$		$D_{LO}^{X_1L_1}$		$D_{TA}^{\Gamma_1L_1}$		$D_{TO}^{\Gamma_1L_1}$	
	СР	ЖИ	СР	ЖИ	СР	ЖИ	СР	ЖИ	СР	ЖИ	СР	ЖИ
AlP	0.62	-	1.31	-	0.21	-	0.82	-	2.34	-	4.34	-
AlAs	0.73	-	1.33	-	1.95	-	0.45	-	1.20	-	6.01	-
AlSb	0.68	0.7	1.47	1.7	2.39	2.7	0.64	2.9	1.14	2.2	5.23	4.0
GaP	0.45	0.1	2.81	0.5	2.22	2.2	3.50	5.5	3.52	3.7	0.59	1.0
GaAs	1.16	0.0	1.52	3.3	2.14	2.2	2.26	1.7	3.49	1.6	2.43	3.3
GaSb	0.65	0.7	0.88	2.6	1.84	2.3	3.56	1.4	2.27	1.5	3.04	2.8
InP	1.02	-	0.23	-	1.41	-	2.98	-	3.30	-	0.37	-
InAs	1.07	-	0.58	-	1.62	-	2.28	-	3.73	-	0.53	-
InSb	0.92	0.2	1.27	2.2	1.69	1.9	1.78	0.7	2.94	0.9	1.56	2.0

самосогласованные деформационные потенциалы заметно отличаются от полученных в модели жестких ионов (Табл.5).

Заключение

Приведенные в литературе экспериментальные значения констант электрон-фононного взаимодействия обладают большим разбросом и могут отличаться в пределах порядка величины [11]. Очевидным образом это связано с тем, что электрон-фононные процессы в кристаллах сочетаются со многими другими каналами рассеяния, и не могут быть однозначно отделены при обработке различных экспериментов.

Мы полагаем, что вычисленные нами из первых принципов константы электрон-фононного взаимодействия дадут возможность обеспечить достаточно надежные исходные данные, относящиеся к этому механизму рассеяния в бинарных полупроводниках, что позволит улучшить качество подгонки модельных параметров для остальных рассеивающих каналов, в частности в расчетах методом Монте-Карло [10].

Работа выполнена при поддержке грантов Президента РФ № НШ-871.2008.2 , РФФИ № 08-02-00640-а и Рособразования № 1.2.007 01695

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Calandra M., Vast N., Mauri F. // Phys. Rev.B. - 2004.- V. 69.-P. 224505-1-5.
2. Гантмахер В.Ф., Левинсон И.Б. Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках. – М.: Наука, 1984. – 352 с.
3. Zollner S., Garriga M., Kircher J., Humlicek J., Cardona M. // Phys. Rev.B.- 1993. - V.48.-P. 7915-7929.
4. Goni A.R., Cantarero A., Syassen K., Cardona M. // Phys. Rev.B. - 1990. - V. 41. - P.1011-1019.
5. Lürßen D., Blener R., Kalt H. // Phys. Rev. B. - 2000. - V. 61. - P. 15 812-15 816.
6. Gunn B. // Solid State Commun. - 1963. –V.1. - P. 88-92.

7. Pernot J., Zawadzki W., Contreras S., Robert J.L., Neyret E., Di Cioccio L. // J. Appl. Phys. - 2001. - V.90. - P. 1869-1874.
8. Rossi F., Kuhn T. // Rev. Mod. Phys. - 2002. - V. 74. - P. 895-950.
9. Shah J., Deveaud B., Damen T.C., Tsang W.T., Gossard A.C., Lugli P. // Phys. Rev. Lett. - 1987. - V.59. - P. 2222-2225.
10. Jacoboni C., Reggiani L. // Rev. Mod. Phys. - 1983. - V.55. - P. 645-705.
11. Prinnila M., Kivinen P., Savin A., Torma P., Ahopelto J. // Phys. Rev. Lett. - 2005. - V.95. - P. 206602-1-206602-4.
12. Zollner S., Gopalan S., Cardona M. // J. Appl. Phys. - 1990. - V.68. - P.1682-1685; Zollner S., Kircher J., Cardona M., Gopalan S. // Solid State Electron. - 1989. - V.32. - P. 1585-1592; Zollner S. et al. // Phys. Rev.B. - 1993. - V.48. - P. 7915-7929; Zollner S., Gopalan S., Cardona M. // Phys. Rev.B. - 1991. - V. 44. - P.13446 - 13451.
13. Гриняев С.Н., Караваев Г.Ф., Тютереv В.Г., Чалдышев В.А. // ФТТ. - 1988. - Т.30. - С. 2753-2756.
14. Гриняев С.Н., Караваев Г.Ф., Тютереv В.Г. // ФТТ. - 1989. - Т.23. - С. 1458-1451.
15. Wang J.Q., Gu Z.Q., Li M.F., Lai W.Y. // Phys. Rev. B. - 1992. - V.46. - P. 12358-12364.
16. Baroni S., de Gironcoli S., Corso A.D., Giannozzi P. // Rev. Mod. Phys. - 2001. - V. 73. - P. 515-562;
17. Baroni S. et al. // <http://www.pwscf.org>.
18. Sjakste J., Tyuterev V., Vast N. // Appl. Phys. A. - 2007. - V. 86. - P. 301-307.
19. Sjakste J., Tyuterev V., Vast N. // Phys. Rev. B. - 2006. - V. 74. - P. 235216-1-7.
20. Sjakste J., Vast N., Tyuterev V.G. // Phys. Rev. Lett. - 2007. - V.99. - P. 236405-1-4.
21. Tyuterev V.G., Vast N. // Comp. Mat. Science. - 2006. - V.38. - P. 350-353.
22. Никитина Л.Н., Обухов С.В., Тютереv В.Г. // Деп. ВИНТИ. - 2008. - (в печати).
23. Onida G., Reining L., Rubio A. // Rev. Mod. Phys. - 2002. - V.74. - P.601-659; Hyberstsen M.S., Louie S.G. // Phys. Rev.B. - 1986. - V.34. - P.5390-5413.
24. Landolt-Bornstein, Numerical data and Functional Relationships in Science and Technology, New Series. - V. 22a - Springer-Verlag, 1987. - 451 с.
25. Gianozzi P., de Gironcoli S., Pavone P., Baroni S. // Phys. Rev.B. - 1991. - V. 43. - P. 7231-7242.
26. Birman J.L., Lax M., Loudon R. // Phys. Rev. - 1966. - V.145. - P. 620-622.

Томский государственный педагогический университет
 E-mail: vgt@phys.tsu.ru