УДК 538.915, 544.723.5 *Оригинальная статья*

Адсорбция монослоя бериллия на поверхности GaN(0001)

М.Н. Лапушкин
ФГБУН «Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН»
194021, Россия, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
lapushkin@ms.ioffe.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2026.18.409

Аннотация: Методом функционала плотности выполнен расчет адсорбции монослоя атомов бериллия на поверхности *GaN*(0001). Моделирование поверхности осуществлялось в рамках геометрии суперъячейки 2×2, содержащей 10 бислоев *GaN*. Исходная поверхность *GaN*(0001) демонстрирует металлический характер проводимости, обусловленный наличием зоны поверхностных состояний вблизи уровня Ферми. Один монослой бериллия соответствовал концентрации, когда один атом *Be* приходится на один поверхностный атом *Ga*. Расчеты электронной плотности состояний и энергии адсорбции выполнены для устойчивой конфигурации при адсорбции атомов *Be* над поверхностными атомами *Ga* (on-top позиция) и при формировании тримерных кластеров *Be* со стороной 2,036 Å внутри гексагональной ячейки *GaN*. Установлено, что адсорбция энергетически наиболее выгодна в конфигурации тримеров. Такая нестандартная конфигурация стала возможной из-за небольшого размера атома *Be*. Энергия адсорбции *Be* составляет величину 2,125 эВ. Показано, что осаждение монослоя *Be* вызывает лишь незначительную структурную реконструкцию подложки: расстояние между слоями *Ga* и *N* в поверхностном бислое *GaN* увеличивается на 0,102 Å. Адсорбция бериллия приводит к формированию широкой зоны поверхностных состояний ниже уровня Ферми, а химическая связь с подложкой *GaN*(0001) носит ковалентный характер и обеспечивается гибридизацией валентных электронов *Be* и поверхностных атомов *Ga*.

Ключевые слова: метод функционала плотности, электронная структура, интерфейс, поверхность, адсорбция, бериллий, GaN.

Лапушкин Михаил Николаевич – к.ф.-м.н., доцент по специальности, старший научный сотрудник ФГБУН «Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН»

Original paper

Adsorption of a beryllium monolayer on the surface of GaN(0001)

M.N. Lapushkin
Ioffe Institute, St. Petersburg, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2026.18.409

Abstract: The density functional method was used to calculate the adsorption of a monolayer of beryllium atoms on a *GaN*(0001) surface. The surface was modeled within the framework of a 2×2 supercell geometry containing 10 *GaN* bilayers. The initial *GaN*(0001) surface exhibits a metallic conductivity caused by the presence of a band of surface states near the Fermi level. One beryllium monolayer corresponded to a concentration of one *Be* atom per one surface *Ga* atom. Calculations of the electron density of states and the adsorption energy were performed for a stable configuration during the adsorption of *Be* atoms over surface *Ga* atoms (on-top position) and during the formation of trimer *Be* clusters with a side length of 2,036 Å within the hexagonal *GaN* cell. It was found that adsorption is energetically most favorable in the trimer configuration. This non-standard configuration became possible due to the small size of the *Be* atom. The adsorption energy of *Be* is 2,125 eV. It was shown that the deposition of a *Be* monolayer causes only minor structural reconstruction of the substrate: the distance between the *Ga* and *N* layers in the *GaN* surface bilayer increases by 0,102 Å. Beryllium adsorption leads to the formation of a broad band of surface states below the Fermi level,

© М.Н. Лапушкин, 2026

and the chemical bond with the *GaN*(0001) substrate being covalent is ensured by the hybridization of *Be* valence electrons and *Ga* surface atoms.

Keywords: density functional method, electronic structure, interface, surface, adsorption, beryllium, GaN.

Mikhail N. Lapushkin – Ph. D., Docent, Senior Researcher, Ioffe Institute, ORCID 0000-0002-9042-7889

Поступила в редакцию/received: 19.07.2026; после рецензирования/revised: 22.08.2026; принята/accepted 27.08.2026.

1. Введение

В настоящее время наблюдается экспоненциальный рост популярности приборов на основе нитрида галлия. Разработка разнообразных гетероструктур на базе *GaN* открывает широкие перспективы для их внедрения в современные электронные устройства. Данный полупроводник характеризуется широкой запрещенной зоной, высокой теплопроводностью, термической стабильностью и эффективной светоотдачей [1-3]. Эти свойства обуславливают его активное применение при создании светодиодов [4] и мощных силовых компонентов [5]. Переход от трехмерных структур к двумерным приводит к резкому возрастанию роли поверхности *GaN* и ее вклада в формирование физико-химических свойств системы, что наделяет 2D-материалы уникальными характеристиками. В фундаментальном обзоре [6] систематизированы результаты многочисленных экспериментальных и теоретических работ, посвященных изучению физики и химии поверхности *GaN*(0001). Закономерно, что процессы нанесения чужеродных атомов на эту грань также вызывают высокий интерес исследователей. При этом анализу адсорбции щелочных металлов на поверхности *GaN*(0001) к настоящему моменту уделено значительно больше внимания, чем изучению систем со щелочноземельными металлами.

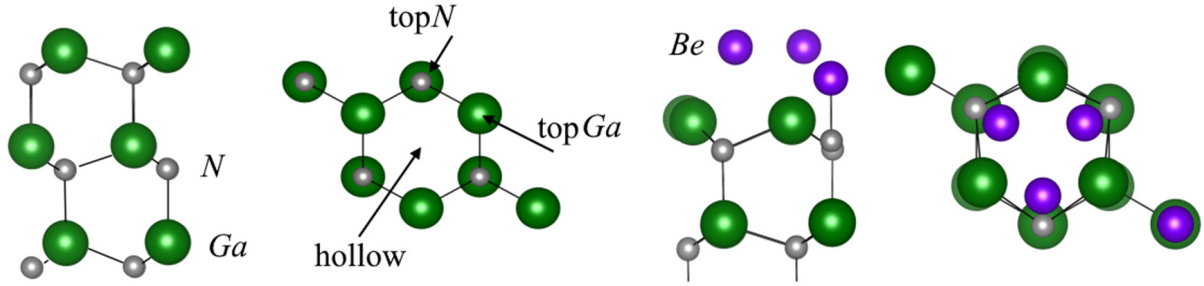
Mg широко используют в качестве допирующего элемента при создании *GaN* *p*-типа [7, 8]. В настоящее время происходит попытка использования других атомов для замены магнию. Одним из таких кандидатов является бериллий. Расчетов взаимодействия *Be* с *GaN* немного [9]. Методом функционала плотности был проведен расчет адсорбции *Be* на монослое $g-GaN$, когда один адатом был адсорбирован на суперъячейки: 2×2, 3×3 и 4×4. Показано, что абсолютное значение энергии адсорбции атома *Be* уменьшается с ростом покрытия от значения –1,94 эВ до –1,61 эВ. Показано, что при этих покрытиях $g-GaN$ сохраняет полупроводниковый характер. Формируется широкая полоса электронных состояний ниже уровня Ферми (E_F) в диапазоне от –3,5 эВ до –1,8 эВ и узким пиком чуть ниже уровня Ферми. При этом происходит незначительный перенос электронной плотности от *Be* к $g-GaN$. С

увеличением покрытия *Be* величина переноса заряда уменьшается от 0,18 *e* до 0.14 *e*. В основном расчеты связаны с исследованием влияния допированных атомов *Be* на *GaN* [10-12].

В работе была поставлена задача: рассчитать электронную структуру адсорбированного монослоя *Be* на поверхности *GaN*(0001) и определить предпочтительные места адсорбции атомов *Be* на поверхности *GaN*(0001). Полученные результаты позволят улучшить понимание начальных этапов процесса легирования бериллием *GaN*(0001). Настоящая работа является продолжением расчета адсорбции атомов щелочноземельных металлов на поверхности *GaN*(0001) [13-14].

2. Методический раздел

Расчеты из первых принципов выполняются в рамках теории функционала плотности DFT, реализованной в пакете QUANTUM ESPRESSO [15] с использованием обменно-корреляционного функционала описанного в аппроксимации локальной плотности (LDA – local density approximation) в форме Perdew-Zunger (PZ) интерполяции [16]. Суперъячейка (0001) 2×2 была изготовлена с использованием графической программы с открытым исходным кодом BURAI-1.3 [17]. Вакуумный зазор с каждой стороны пластины был 26 Å, чтобы избежать влияния паразитных электрических полей. Ограничение кинетической энергии и ограничение плотности заряда были выбраны 45 Ry и 406 Ry. Использована гамма-центрированная сетка по k-точкам 4×4×1 для структурной релаксации и 8×8×1 для электронной релаксации. Сходимость составила $1 \cdot 10^{-6}$ Ry.



а б в г

Рис. 1. Три верхних бислоя *GaN*: вид сбоку (а). Положение адатомов *Be* на 2*D*-слое *GaN*: вид сверху (б). Окончательная конфигурация положения адсорбированных атомов Be на 2*D*-слое *GaN*: вид сверху (в), вид сбоку (г). Зелёный шар – атом *Ga*, серый шар – атом *N*, фиолетовый шар – атом *Be*.

GaN имеет структуру вюрцита с следующими параметрами решетки: $a = b = 3{,}21629$ Å и $c = 5{,}23996$ Å. Четыре атома *Be* приходится на 4 поверхностных атомов *Ga*. Суперъячейка состоит из 10 бислоев *GaN*. Релаксации подвергался только верхний (S) бислой *GaN*. Нумерация слоев идет от поверхностного бислоя *GaN*. Положение остальных бислоев *GaN* было зафиксировано для моделирования объёма *GaN*. Связи атомов азота

нижнего бислоя GaN были насыщены псевдоатомами водорода. Стадия релаксации параметров ячейки суперъячейки длится до достижения давления менее 0,5 кбар.

3. Результаты и обсуждение

Результаты расчета плотности состояний (DOS) чистой поверхности GaN представлены на рис. 2, а для с адсорбированным бериллием представлены на рис. 4.

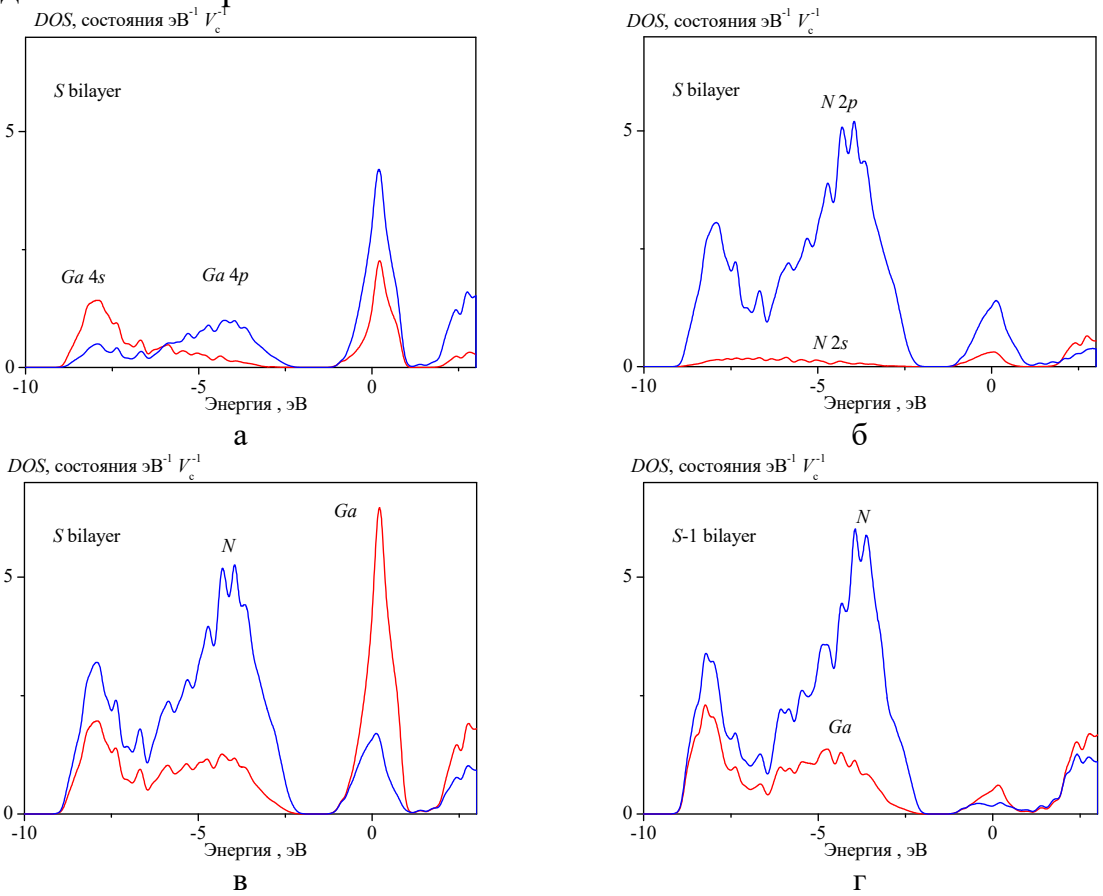
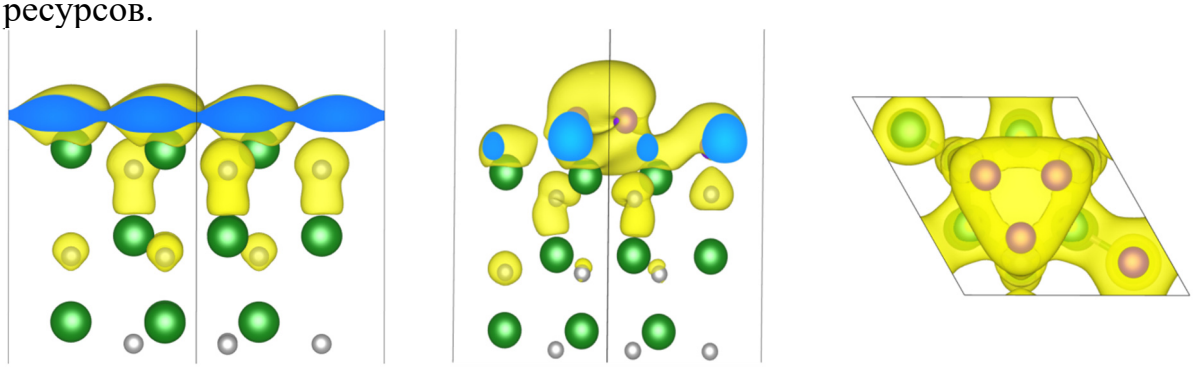


Рис. 2. Парциальная плотность состояний GaN (0001). $E_F = 0$ эВ. V_c – объем элементарной ячейки.

На рис. 2 а-в представлена парциальная плотность состояний в поверхностном бислое GaN для которой можно выделить два пика, с максимумом в районе -3,8 и -8,0 В. Вклад в первый пик вносит в основном $N\ 2p-$состояния с примесью $Ga\ 4p-$состояний. Вклад во второй пик вносит в основном $N\ 2p-$состояния с примесью $Ga\ 4s-$ состояний. Наличие на E_F пика поверхностных состояний указывает на металлизацию поверхности. Зона поверхностных состояний сформирована в основном $Ga\ 4p-$состояниями с примесью $N\ 2p-$ и $Ga\ 4s-$состояний. Для S-1 бислоя пик поверхностных состояний уменьшается в 10 раз. Для S-5

бислоя вид валентной зоны совпадает с валентной зоной кристалла GaN. На рис. 3 представлено пространственное распределение плотности заряда, соответствующее занятым поверхностным состояниям диапазоне от -1 эВ до E_F, для чистого $GaN(0001)$. Видно, что именно электроны Ga оборванных связей находятся на поверхности. Состояния $N\,2p$ локализованы в области связи $N-Ga$ из S-1 бислоя. Ширина запрещенной зоны (E_g) ~1,8 эВ, что меньше экспериментального значения. Занижение значений E_g является общеизвестным фактом при расчетах [18]. Такое же значение E_g для GaN при расчете с использованием LDA было получено, например, в работе [18]. Близкие значения к экспериментальным можно получить как введением дополнительных параметров, например, потенциала Хаббарда, так и с использованием псевдопотенциалов, требующих для расчетов больше на пару порядков компьютерных ресурсов.



а б в

Рис. 3. Парциальная плотность заряда, соответствующая занятым поверхностным состояниям, для чистого $GaN(0001)$ (а) и после адсорбции монослоя Be (б,в). Вид сбоку (а, б) и вид сверху (в).

Была рассчитана энергия адсорбции (E_{ads}) атомов Be на поверхности GaN в устойчивых позициях: над поверхностными атомами Ga и как показано на рис. 1 г по следующей формуле:

$$E_{ads} = (E_{Be/GaN} - E_{GaN} - E_{Be})/4, \quad (1)$$

где $E_{Be/GaN}$ и E_{GaN} – полные энергии поверхности с адсорбированным Be и без него, E_{Be} – полная энергия атома Be. E_{ads} атомов Be в позиции T_{Ga} равна –0,932 эВ. Максимальная E_{ads} = –2,125 эВ получена при адсорбции Be в позиции (см. рис. 1 в и 1 г), в которой атомы Be образуют треугольник со стороной 2,036 Å внутри гексагона, образованного атомами Ga. Расстояние между атомами Be и поверхностными атомами Ga равно 1,90 Å. При адсорбции атомов Be в позиции T_{Ga} E_{ads} составляет величину –1,448 эВ. Атомы Be, которые адсорбированы над поверхностными атомами N. Как и в случае адсорбции монослоя Mg [14] наиболее выгодна адсорбция атомов в нестандартной позиции, что связано с небольшими

размерами атомов. Ожидалась, что наиболее выгодна будет адсорбция атомов Be над атомами N. E_{ads} атомов Be имеет большее значение на 1,05 эВ, чем для E_{ads} атомов Mg.

Адсорбция атомов Be приводит к незначительной реконструкции поверхности GaN, которая вызвана взаимодействием валентных электронов адсорбционной системы. Атомы Ga в поверхностном бислое S сдвигаются вверх на 0,053 Å. Атомы N в поверхностном S бислое GaN (см. рис. 1 б) сдвигаются вниз на 0,059 Å.

Адсорбция монослоя Be приводит к большим изменениям в электронной структуры поверхности (см. рис. 4). Наблюдается широкая зона Be занятых состояний простирающихся от E_F до –9 эВ, т.е. формирована валентная зона адсорбата. Максимальная плотность состояний расположена вблизи E_F, где расположены три пика с максимумами при –0,73 эВ, –1,57 эВ и –2,27 эВ, которые сформированы $Be\ 2p-$ и $Be\ 2s-$состояниями. Также 3 пика поверхностных состояний было найдено для адсорбции монослоя Mg [14]. Следует отметить, что поверхностными атомами являются атомы Ga, атомы азота в в поверхностном бислое расположены ниже и они не принимают участие в формировании связи адатом-подложка. Из рис. 3 б видно, что электроны $N\ 2p-$состояний образуют связь атомами Ga как из S, так и из S-1 бислоев. Также видно образование области локализации поверхностных состояний Be в образованном им треугольнике из атомов Be. Образуется связь атомов Be с поверхностными атомами Ga (см. рис. 3 б, 3 в). Так как оптимальная конфигурация атомов Mg [14] отличается от таковой для Be, то и пространственное распределение поверхностных состояний также отличается. Т.е. размер адсорбированного атома является важным фактором в процессах взаимодействия адатомов с подложкой. Для S бислоя исчезает псевдощель между уровнем максимума валентной зоны и дном зоны поверхностных состояний. Адсорбция атомов приводит к подавлению пиков поверхностных состояний подложки ~6 раз. Интенсивность пиков поверхностных состояний резко убывает с удалением от поверхности: так для бислоя S-1 она в 7 раз меньше, чем в бислое S. Для S-5 бислоя GaN изменения в форме спектра валентной зоны после адсорбции Be практически незаметны.

Край валентной зоны сдвигается в сторону меньших энергий на 0,18 эВ по сравнению с чистой поверхностью GaN (0001), что указывает на изгиб валентной зоны верх и характерно для полупроводников $p-$ типа. Это в 5 раз меньше, чем при адсорбции магния.

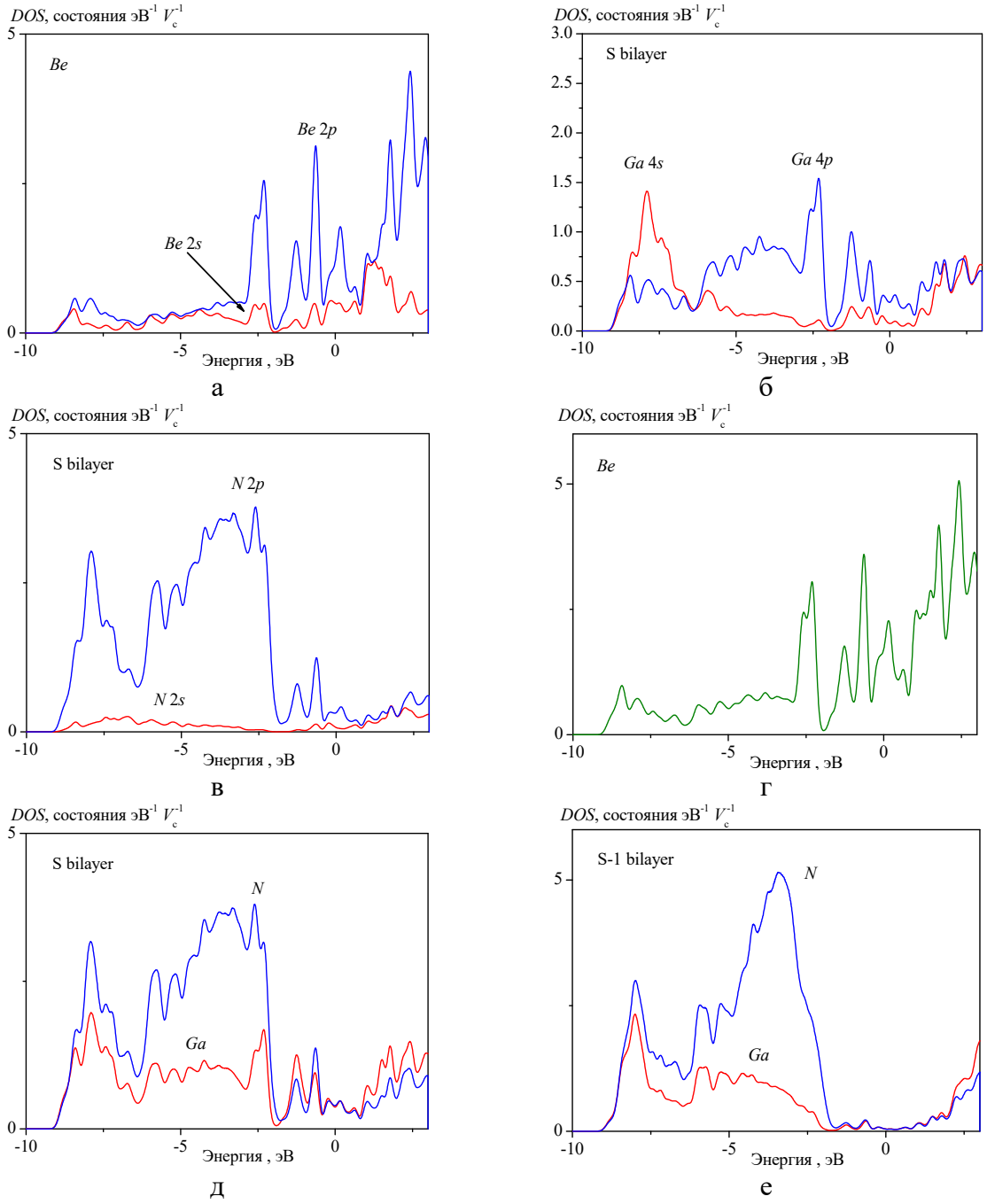


Рис. 4. Парциальная плотность состояний после адсорбции монослоя *Be* на *GaN* (0001). $E_F = 0$ эВ. V_c – объем элементарной ячейки.

4. Заключение

Впервые проведен расчет адсорбции монослоя *Be* на поверхности *GaN* (0001) методом функционала плотности. Валентная зона *GaN* (0001) сформирована основном $N\ 2p$ – состояниями с примесью $Ga\ 4p$ – и $Ga\ 4s$ – состояний. Ширина запрещенной зоны равна 1,80 эВ. На уровне Ферми расположена зона поверхностных состояний, образованных электронами оборванных связей *Ga*, что указывает на металлизацию поверхности.

Показано, что адсорбция монослоя атомов *Be* предпочтительна в вершинах равностороннего треугольника, расположенного в центре шестиугольника, сформированным из поверхностных атомов галлия и азота. Энергия адсорбции атомов *Be* равна 2,125 эВ. Наблюдается незначительная реконструкция поверхности *GaN*(0001) при адсорбции монослоя *Be*. Адсорбция *Be* приводит к образованию широкой зоны поверхностных состояний.

Библиографический список:

1. **Qian, X.** Phonon-engineered extreme thermal conductivity materials / X. Qian, J. Zhou, G.Chen // Nature Materials. – 2021. – V. 20. – I. 9. – P. 1188-1202. DOI: 10.1038/s41563-021-00918-3.
2. **Buffolo, M.** Defects and reliability of GaN-based LEDs: review and perspectives / M. Buffolo, A. Caria, F. Piva et al. // Physica Status Solidi (a). – 2022. – V. 219. – I. 8. – Art № 2100727. – 22 p. DOI: 10.1002/pssa.202100727.
3. **Emon, A.I.** A review of high-speed GaN power modules: state of the art, challenges, and solutions / A.I. Emon, A.B. Mirza, J. Kaplun et al. // IEEE Journal of Emerging and Selected Topics in Power Electronics. – 2022. – V. 11. – I. 3. – P. 2707-2729. DOI: 10.1109/JESTPE.2022.3232265.
4. **Zhang, Y.** Recent advances on gan-based micro-leds / Y. Zhang, R. Xu, Q. Kang et al. // Micromachines. – 2023. – V. 14. – I. 5. – Art. № 991. – 19 p. DOI: 10.3390/mi14050991.
5. **Sun, R.** GaN power integration for high frequency and high efficiency power applications: a review / R. Sun, J. Lai, W. Chen, B. Zhang // IEEE Access. – 2020. – V. 8. – P. 15529-15542. DOI: 10.1109/ACCESS.2020.2967027.
6. **Bermudez, V.M.** The fundamental surface science of wurtzite gallium nitride / V.M. Bermudez // Surface Science Reports. – 2017. – V. 72. – I. 4. – P. 147-315. DOI: 10.1016/j.surfrep.2017.05.001.
7. **Lyons, J.L.** First-principles theory of acceptors in nitride semiconductors / J.L. Lyons, A. Alkauskas, A. Janotti, C.G. Van de Walle // Physica Status Solidi (b). – 2015. – V. 252. – I. 5. – P. 900-908. DOI: 10.1016/j.cossms.2024.101148.
8. **Reshchikov, M.A.** Photoluminescence from vacancy-containing defects in GaN / M.A. Reshchikov // Physica Status Solidi (a). – 2023. – V. 220. – I. 10. – Art. № 2200402. – 8 p. DOI: 10.1002/pssa.202200402.
9. **Yeoh, K.H.** Monolayer GaN functionalized with alkali metal and alkaline earth metal atoms: a first-principles study / K.H. Yeoh, T.L. Yoon, T.L. Lim, Rusi, D.S. Ong // Superlattice Microstructures**. –** 2019**. –** V. 130**. –** P. 428-436. DOI: 10.1016/j.spmi.2019.05.011.
10. **Northrup, J.E.** Incorporation of beryllium on the clean and indium-terminated GaN(0001) surface / J.E. Northrup // Applied Physics Letters. – 2001. – V. 78. – I. 19. – P. 2855-2857. DOI: 10.1063/1.1368369.
11. **Tian, J**., Theoretical research on p-type doping two-dimensional GaN based on first-principles study / J.Tian, L.Liu, F.Lu // International Iournal of Energy Research. – 2020. – V. 44. – I. 7. – P. 6058-6067. DOI: 10.1002/er.5380.
12. **Van de Walle, C.G.** First-principles studies of beryllium doping of GaN / C.G. Van de Walle, S. Limpijumnong, J. Neugebauer // Physical Review B. – 2001. – V. 63. – I. 24. – P. 245205-1-245205-17. DOI: 10.1103/PhysRevB.63.245205.
13. **Лапушкин, М.Н.** Адсорбция бария на поверхности GaN(0001) / М.Н. Лапушкин // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2024. – Вып. 16. – С. 210-218. DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.210.
14. **Лапушкин, М.Н.** Адсорбция монослоя магния на поверхности GaN(0001) / М.Н. Лапушкин // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2025. – Вып. 17. – С. 447-454. DOI: 10.26456/pcascnn/2025.17.447
15. **Giannozzi, P.** QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials / P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2009. – V. 21. – №. 39. – Art. № 395502. – 19 p. DOI: 10.1088/0953- 8984/21/39/395502.
16. **Perdew, J.P.** Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems / J.P. Perdew, A. Zunger // Physical Review B. – 1981. – V. 23. – I. 10. – P. 5048-5079. DOI: 10.1103/PhysRevB.23.5048.
17. **Nishihara, S.** BURAI 1.3 A GUI of Quantum ESPRESSO / S. Nishihara. – Режим доступа: www.url: https://nisihara.wixsite.com/burai. – 20.06.2026.

18. **Nielsen, D.O.** First-principles approach to closing the 10–100 eV gap for charge-carrier thermalization in semiconductors/ D.O. Nielsen, C.G. Van de Walle, S.T. Pantelides et al. // Physical Review B. – 2023. – V. 108. – I. 15. – P. 155203-1-155203-20. DOI: 10.1103/PhysRevB.108.155203.

References:

1. Qian X., Zhou J., Chen G. Phonon-engineered extreme thermal conductivity materials, *Nature Materials*, 2021, vol. 20, issue 9, pp. 1188-1202. DOI: 10.1038/s41563-021-00918-3.
2. Buffolo M., Caria A., Piva F. et al. Defects and reliability of GaN-based LEDs: review and perspectives, *Physica Status Solidi (a)*, 2022, vol. 219, issue 8, art. no. 2100727, 25 p. DOI: 10.1002/pssa.202100727.
3. Emon A.I., Mirza, A. B., Kaplun, J. et al. A review of high-speed GaN power modules: state of the art, challenges, and solutions, *IEEE Journal of Emerging and Selected Topics in Power Electronics*, 2022, vol. 11, issue 3, pp. 2707-2729. DOI: 10.1109/JESTPE.2022.3232265.
4. Zhang Y., Xu R., Kang Q. et al. Recent advances on gan-based micro-leds, *Micromachines*, 2023, vol. 14, issue 5, art. no. 991, 19 p. DOI: 10.3390/mi14050991.
5. Sun R., Lai J., Chen W., Zhang B. GaN power integration for high frequency and high efficiency power applications: a review, *IEEE Access*, 2020, vol. 8, pp. 15529-15542. DOI: 10.1109/ACCESS.2020.2967027.
6. Bermudez V.M. The fundamental surface science of wurtzite gallium nitride, *Surface Science Reports*, 2017, vol. 72, issue 4, pp. 147-315. DOI: 10.1016/j.surfrep.2017.05.001.
7. Lyons J.L., Alkauskas A., Janotti A., Van de Walle C.G. First-principles theory of acceptors in nitride semiconductors, *Physica Status Solidi (b)*, 2015, vol. 252, issue 5, pp. 900-908. DOI: 10.1016/j.cossms.2024.101148.
8. Reshchikov M.A. Photoluminescence from vacancy-containing defects in GaN, *Physica Status Solidi (a)*, 2023, vol. 220, issue 10, art. no. 2200402, 8 p. DOI: 10.1002/pssa.202200402.
9. Yeoh K.H., Yoon T.L., Lim T.L, Rusi, Ong D.S., Monolayer GaN functionalized with alkali metal and alkaline earth metal atoms: A first-principles study, *Superlattice Microstructures*, 2019, vol. 130, pp. 428-436. DOI: 10.1016/j.spmi.2019.05.011.
10. Northrup J. E.. Incorporation of beryllium on the clean and indium-terminated GaN(0001) surface, *Applied Physics Letters*, 2001, vol. 78, issue 19, pp. 2855-2857. DOI: 10.1063/1.1368369.
11. Tian J., Liu L., Lu F., Theoretical research on p-type doping two-dimensionalGaN based on first-principles study, *International Journal of Energy Research*, 2020, vol. 44, issue 7, pp. 6058-6067. DOI: 10.1002/er.5380
12. Van de Walle C. G., Limpijumnong S., Neugebauer J. First-principles studies of beryllium doping of GaN, *Physical Review B*, 2001, vol. 63, issue 24, pp. 245205-17. DOI: 10.1103/PhysRevB.63.245205.
13. Lapushkin M.N. Adsorbtsiya bariya na poverhnosti GaN(0001) [Adsorption of barium on the surface of GaN(0001)], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2024, issue 16, pp. 210-218. DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.210. (In Russian).
14. Lapushkin M.N. Adsorbtsiya monosloya magniya na poverhnosti GaN(0001) [Adsorption of a magnesium monolayer on the surface of GaN(0001)], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2025, issue 17, pp. 447-454. DOI: 10.26456/pcascnn/2025.17.447. (In Russian).
15. Giannozz, P., Baroni S., Bonini N. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2009, vol. 21, no. 39, art. no. 395502, 19 p. DOI: 10.1088/0953- 8984/21/39/395502.
16. Perdew J.P., Zunger A. Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems, *Physical Review B*, 1981, vol. 23, issue 10, pp. 5048-5079. DOI: 10.1103/PhysRevB.23.5048.
17. Nishihara S. BURAI 1.3 A GUI of Quantum ESPRESSO. Available at: https://nisihara.wixsite.com/burai (accessed 20.06.2026).
18. Nielsen D.O., Van de Walle C.G., Pantelides S.T. et al. First-principles approach to closing the 10–100 eV gap for charge-carrier thermalization in semiconductors, *Physical Review B*, 2023, vol. 108, issue 15, pp. 155203-1-155203-20. DOI: 10.1103/PhysRevB.108.155203.