

УДК 51-72, 538.915, 538.911

## КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ И ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ СЦИНТИЛЛЯЦИОННОГО КРИСТАЛЛА $Y_3Al_5O_{12}$

И.И. Врубель<sup>а</sup>, Р.Г. Полозков<sup>а</sup>, И.А. Шелых<sup>б</sup>

<sup>а</sup> Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация

<sup>б</sup> Исландский университет, Институт Науки, Рейкьявик, IS-107, Исландия

Адрес для переписки: ivanvrubel@ya.ru

### Информация о статье

Поступила в редакцию 01.04.16, принята к печати 18.04.16

doi: 10.17586/2226-1494-2016-16-3-409-415

Язык статьи – русский

**Ссылка для цитирования:** Врубель И.И., Полозков Р.Г., Шелых И.А. Квантово-механическое моделирование пространственной и зонной структуры сцинтилляционного кристалла  $Y_3Al_5O_{12}$  // Научно-технический вестник информационных технологий, механики и оптики. 2016. Т. 16. № 3. С. 409–415. doi: 10.17586/2226-1494-2016-16-3-409-415

### Аннотация

Исследована электронная и пространственная структура элементарной ячейки иттрий-алюминиевого граната. Представлена квантово-механическая модель. Для расчета геометрии элементарной ячейки использованы полуэмпирические методы с параметризацией РМ6 и РМ7. Расчет зонной структуры выполнен в рамках теории функционала плотности с использованием обменно-корреляционного РВЕ-функционала. Построены гистограммы длин связей металл–кислород для оптимизированной геометрии элементарной ячейки кристалла. Проведен сравнительный анализ использованных методов, сформирована рекомендация об их применимости к решению задач подобного класса. Произведен расчет одноэлектронных волновых функций и энергии соответствующих состояний. Получена оценка ширины запрещенной зоны. Построены графики конфигурации валентной зоны. Показано, что предложенный алгоритм расчета корректно описывает пространственную и зонную структуру сцинтилляционного кристалла  $Y_3Al_5O_{12}$ . Результаты работы могут быть использованы для улучшения характеристик сцинтилляционных кристаллов на основе гранатов.

### Ключевые слова

иттрий-алюминиевый гранат, сцинтилляционный кристалл, оптимизация геометрии, теория функционала плотности, зонная структура

### Благодарности

Работа выполнена при государственной финансовой поддержке ведущих университетов Российской Федерации (субсидия 074-U01). Авторы также выражают благодарность финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (Соглашение № 14.587.21.0020, уникальный идентификатор проекта RFMEFI58715X0020). И.А.Ш. выражает благодарность программе «ITMO Visiting Professorship».

## QUANTUM-MECHANICAL MODELING OF SPATIAL AND BAND STRUCTURE OF $Y_3Al_5O_{12}$ SCINTILLATION CRYSTAL

I.I. Vrubel<sup>а</sup>, R.G. Polozkov<sup>а</sup>, I.A. Shelykh<sup>б</sup>

<sup>а</sup> ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation

<sup>б</sup> University of Iceland, Science Institute, Reykjavik, IS-107, Iceland

Corresponding author: ivanvrubel@ya.ru

### Article info

Received 01.04.16, accepted 18.04.16

doi: 10.17586/2226-1494-2016-16-3-409-415

Article in Russian

**For citation:** Vrubel I.I., Polozkov R.G., Shelykh I.A. Quantum-mechanical modeling of spatial and band structure of  $Y_3Al_5O_{12}$  scintillation crystal. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2016, vol. 16, no. 3, pp. 409–415. doi: 10.17586/2226-1494-2016-16-3-409-415

### Abstract

Spatial and electronic structures of a unit cell of yttrium-aluminum garnet have been studied. Quantum-mechanical model have been presented. Semi-empirical methods PM6 and PM7 have been used for geometry optimization of the crystal unit cell. Band structure has been calculated within density functional theory with the use of PBE exchange-correlation functional. Histograms of metal-oxygen distances for equilibrium geometry have been constructed. Comparison of the used methods has been carried out and recommendation about their applicability for such problems was given. The single-particle wave functions and energies have been calculated. The bandgap was estimated. The band structure was plotted. It was shown that

the method gives reliable results for spatial and band structure of  $Y_3Al_5O_{12}$  scintillation crystal. The results of this work can be used for improvement of characteristics of garnet scintillation crystals.

#### Keywords

yttrium-aluminum garnet, scintillation crystal, geometry optimization, density functional theory, band structure

#### Acknowledgements

This work was financially supported by the Government of the Russian Federation (Grant 074-U01). The authors acknowledge support from Russia's Federal Program "Scientific and Educational Manpower for Innovative Russia" (grant No RFMEFI58715X0020). I.A.Sh. thanks "ITMO Visiting Professorship" scheme.

### Введение

Гранаты – широко известный класс кристаллов, используемый в качестве люминофоров, твердотельных лазеров или сцинтилляторов [1]. Сцинтиллятор – это объект, преобразующий энергию ионизирующего излучения в фотоны оптического диапазона, которые могут быть легко зарегистрированы современными приемниками и обработаны электронной аппаратурой. Именно сцинтилляционные материалы в настоящее время являются ограничивающим элементом детектирующих систем, построенных на этом принципе. В случае регистрации гамма-излучения к сцинтилляционному кристаллу предъявляется множество требований [2]: большая плотность и эффективный атомный номер вещества, высокая конверсионная эффективность, максимальная скорость люминесценции, отсутствие послесвечения и другие. Улучшение любого из представленных параметров или поиск оптимального соотношения между ними позволяют добиться улучшения технических параметров приборов, таких как динамический диапазон, быстродействие или дозовая нагрузка ионизирующего излучения. Характеристики материалов, соответствующие предъявляемым требованиям, прямо или косвенно определяются химическим составом и электронной структурой материала, а значит, исследование этих параметров с помощью квантово-механического моделирования представляет собой одну из важных компонент многопараметрической задачи оптимизации сцинтилляторов.

Простейшей структурой элементарной ячейки граната является многогранник, в центре которого располагается атом металла, а в вершинах – атомы кислорода. Изучаемый класс гранатов содержит в ячейке комбинацию из 24 додекаэдров, 16 октаэдров и 24 тетраэдров [3], что составляет химическую формулу  $DOD_3(OCT_2TET_3)O_{12}$ . При этом на позициях в центрах додекаэдров «DOD» могут находиться атомы редкоземельных элементов Lu, Y и Gd, а на позициях в центрах октаэдров и тетраэдров «OCT» и «TET» – Al или Ga соответственно [4–6]. В зависимости от атома металла, образующего многогранник, могут получаться фигуры с различной длиной связи и количеством вершин. При согласовании объемов и количества вершин многогранников атомы кислорода способны обобществляться между атомами металла и образовывать элементарную ячейку кристалла. Целью настоящей работы является исследование пространственной и электронной структуры классического материала указанного семейства – иттрий-алюминиевого граната  $Y_3Al_5O_{12}$  (YAG) с помощью методов квантово-механического моделирования.

### Используемые методы и приближения

Как известно, задача о расчете пространственной и электронной структуры любой многоатомной системы сводится к численному решению молекулярного уравнения Шредингера. Существуют два подхода к решению этой задачи: первый составляют методы расчета из первых принципов (*ab-initio*), второй – полуэмпирические. Первые обладают высокой точностью, но, зачастую, очень большим временем расчетов, вторые проигрывают в точности, но существенно выигрывают в скорости вычислений. При этом принципиально с точки зрения подхода к решению уравнения Шредингера эти методы не отличаются. Разница состоит лишь в том, что в процессе расчета вводятся приближения, позволяющие сократить общее количество двухэлектронных интегралов, на вычисление которых расходуется основная часть машинного времени; кроме того, некоторые двухэлектронные и одноэлектронные интегралы, а также интегралы перекрытия не рассчитываются, а оцениваются, опираясь на экспериментальные данные.

Так как процесс оптимизации геометрии предполагает поиск на каждом шаге самосогласованного решения для текущих координат атомов электронной структуры, то использование подхода *ab-initio* становится крайне ресурсозатратным в смысле машинного времени. Исходя из этого, для оптимизации пространственной структуры элементарной ячейки YAG в настоящей работе предлагается использовать полуэмпирические методы расчета, а для вычисления электронной структуры в рамках уже оптимизированной равновесной геометрии – подход *ab-initio*.

Семейство полуэмпирических методов (AM1, PM3, PM6, PM7) квантово-механического моделирования [7] основывается на расчете молекулярных орбиталей соединений с помощью параметризованных наборов, описывающих различные межатомные взаимодействия. Исторически это направление развивается по пути увеличения числа параметров, их точности и расширению набора опорных (референсных) химических соединений, используемых для вычисления величин параметров. Среди достоинств метода стоит отметить высокую вычислительную эффективность и приемлемую достоверность результатов [8] для «характерных» для метода соединений, а именно, схожих с опорными соединениями, использован-

ными для параметризации. Однако следует понимать, что при использовании полуэмпирических методов для моделирования «нехарактерных» соединений вычисления могут давать сомнительные результаты.

Наиболее известной реализацией подхода *ab-initio* является теория функционала плотности. Основу данной теории составляют две теоремы. Первая теорема была сформулирована в 1964 г. Хоэнбергом и Коном [9], и ее суть заключается в том, что все свойства электронной структуры в основном состоянии определяются электронной плотностью  $n(\mathbf{r})$ . Причем полная энергия системы, записанная как функционал этой плотности, имеет единственный минимум, равный энергии основного состояния:

$$\delta E[n(\mathbf{r})] = \delta(T[n(\mathbf{r})] + U_{\text{ext}}[n(\mathbf{r})] + U_{\text{H}}[n(\mathbf{r})] + E_{\text{xc}}[n(\mathbf{r})]) = 0,$$

где  $T[n(\mathbf{r})]$  – вклад кинетической энергии;  $U_{\text{ext}}[n(\mathbf{r})]$  – потенциальная энергия во внешнем поле;  $U_{\text{H}}[n(\mathbf{r})]$  – энергия межэлектронного кулоновского отталкивания;  $E_{\text{xc}}[n(\mathbf{r})]$  – обменно-корреляционный функционал, вид которого в общем случае неизвестен.

Вторая – теорема Кона–Шэма [10] – имеет практическое значение и позволяет вывести с помощью вариационного принципа, примененного к полной энергии системы, одночастичные уравнения:

$$\begin{cases} \left[ -\frac{1}{2}\Delta + V_{\text{eff}} \right] \phi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \phi_i(\mathbf{r}), \\ V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + \int \frac{n(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r}' - \mathbf{r}|} + V_{\text{xc}}(\mathbf{r}); \\ V_{\text{xc}}(\mathbf{r}) = \frac{\delta E_{\text{xc}}[n(\mathbf{r})]}{\delta n(\mathbf{r})}; \\ n(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N |\phi_i(\mathbf{r})|^2, \end{cases}$$

где  $\phi_i$  – волновые функции молекулярных орбиталей;  $\varepsilon_i$  – соответствующие им энергии;  $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$  – потенциал внешнего поля;  $V_{\text{xc}}(\mathbf{r})$  – обменно-корреляционный потенциал. Очевидно, что полная электронная плотность  $n(\mathbf{r})$  определяется видом молекулярных орбиталей  $\phi_i(\mathbf{r})$ .

Общий вид обменно-корреляционного функционала неизвестен в принципе, поэтому существует множество его аппроксимаций. Самой простой и исторически первой аппроксимацией являлось приближение локальной плотности (Local Density Approximation) [10], в рамках которого обменно-корреляционный функционал определяется из модели однородного электронного газа. Как следствие, разрабатываемые аппроксимации обменно-корреляционной энергии были полностью локальными, т.е. величина функционала полностью определялась величиной электронной плотности в заданной точке. Позже был разработан класс аппроксимаций GGA (generalized gradient approximation) [11], которые учитывали в функциональной зависимости также градиентную компоненту электронной плотности. В наших расчетах мы использовали именно GGA-аппроксимацию, сформулированную группой ученых J. Perdew, K. Burke и M. Ernzerhof, имеющую название PBE [11]. Преимуществами этого приближения являются отсутствие параметризации и хорошие результаты вычислений электронной структуры для широкого класса веществ.

### Расчет равновесной пространственной структуры ячейки YAG

Для расчета равновесной геометрии всего класса композиций на базе гранатов была сформирована стартовая геометрия (рис. 1), в которой присутствуют 64 позиции для атомов металлов и 96 – для атомов кислорода, координаты которых масштабируются в соответствии с постоянной решетки структуры. Позиции всех атомов были подвергнуты возмущению (не более 10% от длины связи металл–кислород), что позволило получить больше информации о корректности работы используемых методов и создать стартовую напряженность в ячейке, требующую релаксации. Оптимизация геометрии искаженной ячейки производилась с помощью двух полуэмпирических методов PM6 и PM7 с использованием программного пакета МОРАС2012 [12, 13] с целью сравнения и формирования вывода об их применимости. Так как оба метода являются параметрическими, то априори неизвестно, какой из них даст лучший результат для конкретной системы. Из общих соображений можно лишь сказать, что метод PM7 более адаптирован к моделированию кристаллических структур, чем PM6, за счет включения в процедуру расчета большего количества параметров при учете парных взаимодействий. При моделировании были использованы некоторые общие ограничения на позиции атомов. Первое ограничение связано с размерами ячейки, а именно, шаг решетки был фиксирован при расчетах, а его величина взята из экспериментальных данных [3]. Второе ограничение заключается в том, что атомы, находящиеся на плоскостях ячейки, образованных векторами трансляции и началом координат, могут перемещаться только внутри них.

Для проверки результатов оптимизации геометрии были использованы экспериментальные данные о длине связи металл–кислород [14]. Для алюминиевых тетраэдрических позиций длина связи равна 0,178 нм, а для октаэдрических позиций – 0,191 нм. Додекаэдр, образованный атомами иттрия, является геометрически искаженным и имеет два характерных размера: 0,230 нм и 0,243 нм. Для полноценного сравнения результатов расчета с экспериментальными данными к элементарной ячейке было добавлено 26 копий, смещенных на различные комбинации векторов трансляции, в результате чего была образована

«макроячейка». В этой структуре для металлов, принадлежавших к исходной ячейке, были построены гистограммы распределений длин связей до ближайших атомов кислорода. Результаты для стартовой и оптимизированных с помощью РМ6 и РМ7 методов структур приведены рис. 2 и 3.

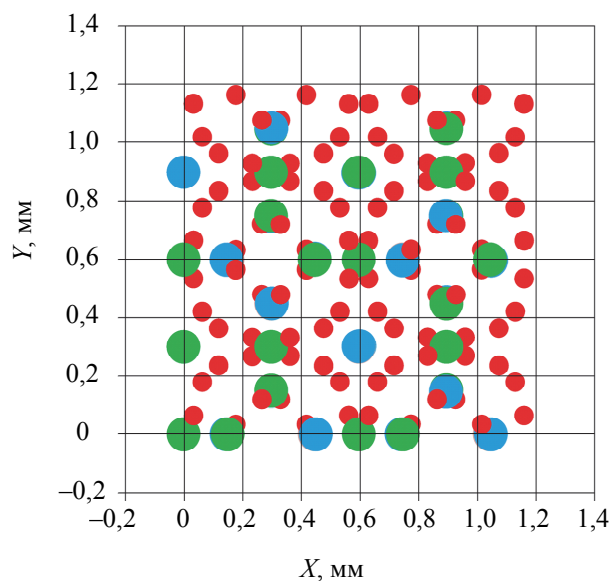


Рис. 1. XY-проекция структуры граната  $Y_3Al_5O_{12}$ , где позиции «Y» обозначены синими кругами, позиции «Al» – зелеными, а атомы кислорода – красными

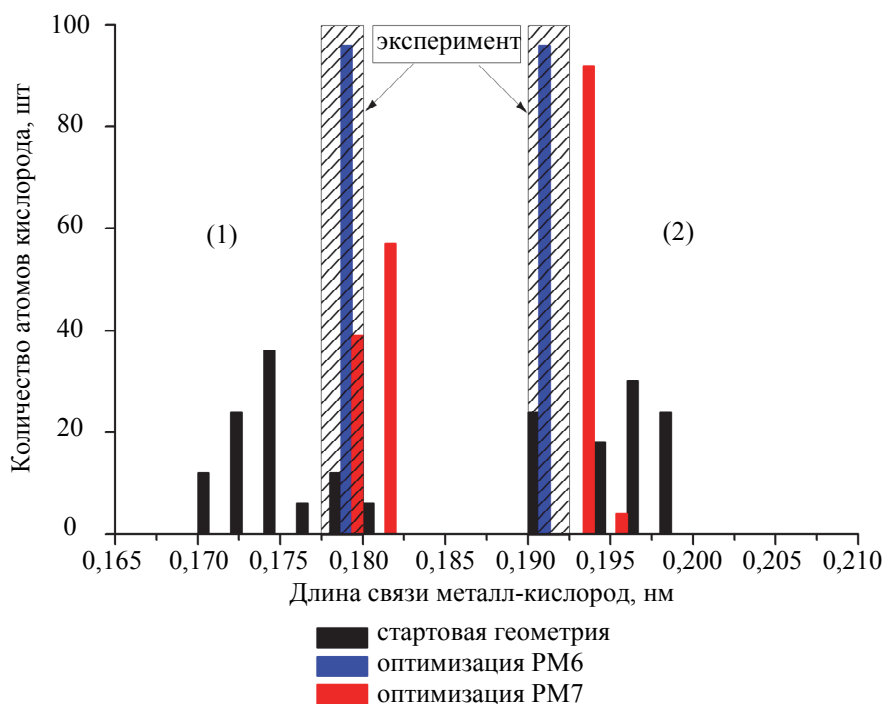


Рис. 2. Гистограмма длин связей Al-O в макроячейке YAG.  
(1) – тетраэдрические позиции; (2) – октаэдрические позиции

На рис. 2 каждая структура имеет два распределения на гистограмме, отвечающие тетраэдрическим (1) и октаэдрическим (2) позициям атомов Al. Соответствующие экспериментальные значения [14] обозначены штрихованными областями. Число атомов кислорода в обоих пиках равно количеству вершин соответствующих образующих многогранников:  $24 \times 4 = 96$  для тетраэдрических позиций и  $16 \times 6 = 96$  для октаэдрических позиций. Необходимо отметить, что в результате оптимизации геометрии характер распределений изменяется. До оптимизации распределение имеет большую дисперсию и не может быть с высокой точностью характеризовано одним определенным значением длины связи. В результате оптимизации геометрии распределения принимают форму монолиний с точностью до дискрета гистограммирования. Из рис. 2 видно, что результаты, полученные с помощью метода РМ6, несколько лучше согласуются с экспериментальными данными, чем с помощью метода РМ7.

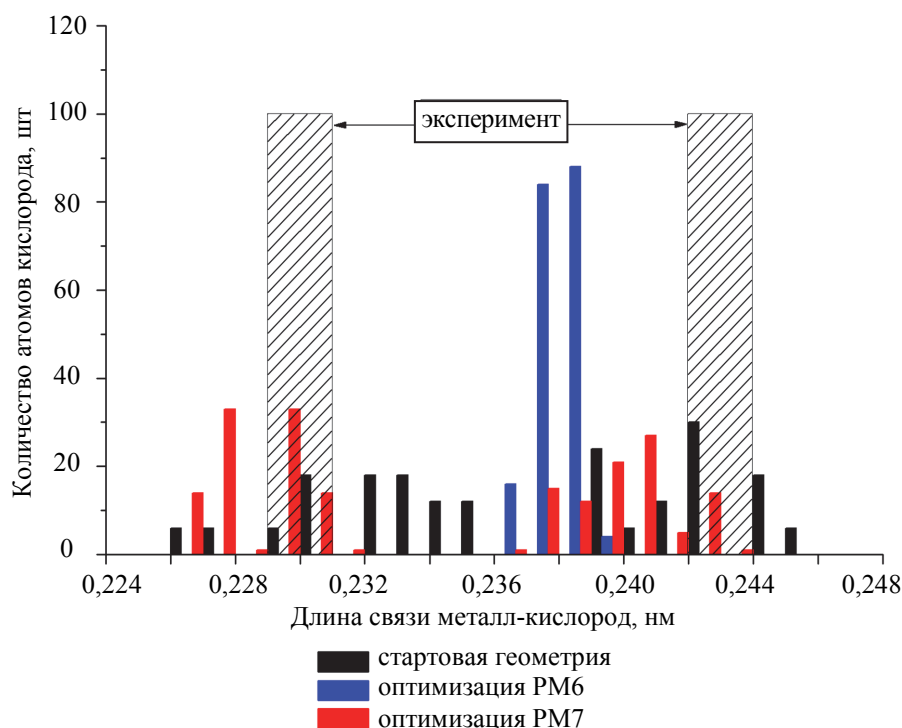


Рис. 3. Гистограмма длин связей Y-O в макроячейке YAG

Распределение на рис. 3 соответствует позициям атомов Y. Интеграл под всеми тремя распределениями равен 192, что согласуется с суммарным количеством вершин в иттриевых позициях ( $24 \times 8 = 192$ ). Видно, что после оптимизации с использованием алгоритма PM7 распределение длин связей Y-O разбивается на две группы, центры которых хорошо согласуются с экспериментальными значениями. При этом распределение, полученное методом PM6, не имеет подобного расщепления. Такое отсутствие расщепления длин связей металл-кислород для додекаэдрических позиций свидетельствует о наличии существенных недостатков в параметризации PM6.

### Расчет электронной структуры ячейки YAG

Расчет электронной структуры элементарной ячейки граната был произведен в рамках теории функционала плотности в базе плоских волн с использованием PBE-аппроксимации обменно-корреляционного функционала для каждого типа геометрии. Вычисления производились с помощью программ «pw» (planewave) и «dos» (density of states) из пакета квантово-механического моделирования QuantumEspresso [15], с использованием псевдопотенциалов атомов с конфигурациями Y( $5s^2 4d^1$ ), Al( $3s^2 3p^1$ ) и O( $2s^2 2p^4$ ). Полученные в результате расчетов числа заполнения молекулярных орбиталей и соответствующие им значения энергий использовались для построения распределения электронных состояний по энергии для всех типов геометрий.

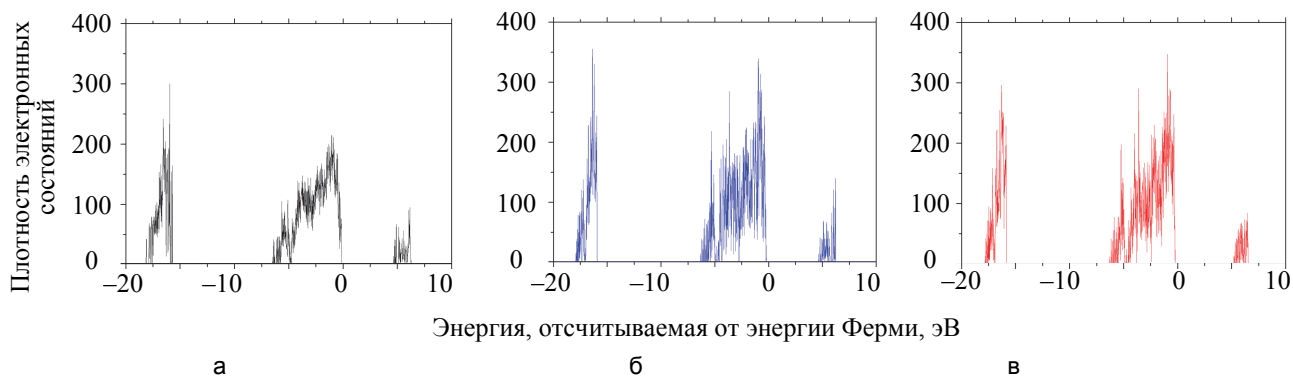


Рис. 4. Плотность энергетических состояний электронов в элементарной ячейке YAG, рассчитанная для трех типов геометрий: стартовая геометрия (а); геометрия, оптимизированная методом PM6 (б); геометрия, оптимизированная методом PM7 (в)

На рис. 4 представлена плотность электронных состояний в зависимости от энергии для трех типов геометрий. Во всех случаях энергия Ферми систем приведена к нулю. Диапазону отрицательных

энергий соответствуют заполненные молекулярные орбитали, а положительному – незаполненные. Таким образом, на рис. 4 ширина запрещенной зоны соответствует левой границе состояний в области положительных энергий. В результате анализа рассчитанных плотностей электронных состояний были получены значения ширины запрещенной зоны в трех случаях: без оптимизации, с оптимизацией в рамках РМ6 и РМ7. Полученные результаты сравнивались с известным экспериментальным значением ширины запрещенной зоны для YAG, равным по разным данным [1, 3] порядка 7 эВ. Наиболее точный результат, 5,5 эВ, достигнут с использованием пространственной структуры, полученной в рамках метода РМ7. Оптимизация геометрии в рамках метода РМ6 и стартовая искаженная геометрия дают примерно равную и менее точную величину – 5 эВ. Стоит отметить, что при расчете с использованием теории функционала плотности с учетом только локальных корреляций, даже в рамках достаточно точного приближения РВЕ, значение энергии нижнего незаполненного состояния определяется с систематической ошибкой, обусловленной ограничением теории. Как следствие, в расчетных данных возникает систематическая ошибка ширины запрещенной зоны порядка 20%, т.е. в рассматриваемом случае –  $7 \times 0,2 = 1,4$  эВ. А значит, ожидаемое расчетное значение должно быть равным примерно 5,6 эВ, что позволяет сделать вывод об адекватном описании ширины запрещенной зоны материала с помощью комбинации методов РМ7 и РВЕ.

### Заключение

Пространственная структура и плотность электронных состояний элементарной ячейки YAG были исследованы с помощью комплекса методов квантово-механического моделирования. Для определения равновесной геометрии был использован полуэмпирический метод расчета с параметрическими наборами РМ6 и РМ7. В результате оптимизации геометрии элементарной ячейки YAG установлено, что параметризация РМ7 является более предпочтительной. Квантово-механическое моделирование электронной структуры из первых принципов позволили визуализировать электронный спектр элементарной ячейки и оценить ширину запрещенной зоны материала. Расчет показал актуальность выбора корректного алгоритма оптимизации геометрии, так как ошибка в 0,01 нм (по сравнению с длиной связи 0,2 нм), допущенная при оптимизации геометрии, приводит к значительным искажениям (0,5 эВ при рассчитанной величине запрещенной зоны 5,5 эВ) в зонной структуре элементарной ячейки.

В результате проведенного исследования был сформирован алгоритм квантово-механического моделирования, позволяющий в дальнейшем проводить более сложные многопараметрические исследования многокомпонентных гранатов. Представлен способ контроля результатов оптимизации геометрии, основанный на построении гистограммы длин связи металл-кислород всех позиций элементарной ячейки. Показана актуальность достоверности оптимизации пространственной структуры на примере ее влияния на зонную структуру.

### Литература

1. Chen L., Chen X., Liu F. et al. Charge deformation and orbital hybridization: intrinsic mechanisms on tunable chromaticity of Y3Al5O12:Ce3+ luminescence by doping Gd3+ for warm white LEDs // *Scientific Reports*. 2015. V. 5. Art. 11514. doi:10.1038/srep11514
2. Ronda C., Wiczorek H., Khanin V., Rodnyi P. Review-scintillators for medical imaging: a tutorial overview // *ECS Journal of Solid State Science and Technology*. 2016. V. 5. N 1. P. 3121–3125. doi:10.1149/2.0131601jss
3. Huang Z., Zhang L., Pan W. Antisite defect in nonstoichiometric yttrium aluminum garnet: Experimental and first-principles calculation // *Journal of the European Ceramic Society*. 2014. V. 34. N 3. P. 783–790. doi:10.1016/j.jeurceramsoc.2013.09.007
4. Dorenbos P. Electronic structure and optical properties of the lanthanide activated RE<sub>3</sub>(Al<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>)<sub>5</sub>O<sub>12</sub> (RE=Gd, Y, Lu) garnet compounds // *Journal of Luminescence*. 2013. V. 134. P. 310–318. doi: 10.1016/j.jlum.2012.08.028
5. Fasoli M., Vedda A., Nikl M., Jiang C., Ueberuaga B.P., Andersson D.A., McClellan K.J., Stanek C.R. Band-gap engineering for removing shallow traps in rare-earth Lu3Al5O12 garnet scintillators using Ga3+ doping // *Physical Review B*. 2011. V. 84. Art. 081102(R). doi: 10.1103/PhysRevB.84.081102
6. Munoz-Garcia A.B., Seijo L. Structural, electronic, and spectroscopic effects of Ga codoping on Ce-doped yttrium aluminum garnet: first-principles study // *Physical Review B*. 2010. V. 82. Art. 184118. doi: 10.1103/PhysRevB.82.184118
7. Stewart J.J.P. Optimization of parameters for semiempirical methods VI: more modifications to the NDDO approximations and re-optimization of parameters // *Journal of Molecular Modeling*. 2013. V. 19. N 1. P. 1–32. doi: 10.1007/s00894-012-1667-x
8. Puzyn T., Suzuki N., Haranczyk M., Rak J. Calculation of quantum-mechanical descriptors for QSPR at the DFT level: is it necessary? // *Journal of Chemical Information and Modeling*. 2008. V. 48. N 6. P. 1174–1180. doi: 10.1021/ci800021p
9. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous electron gas // *Physical Review*. 1964. V. 136. N 3B. P. B864–B871. doi: 10.1103/PhysRev.136.B864

10. Kohn W., Sham L.J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects // Journal of Physical Review. 1965. V. 140. N 4A. P. 1133. doi: 10.1103/PhysRev.140.A1133
11. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple // Physical Review Letters. 1996. V.77. N 18. P. 3865–3868. doi: 10.1103/PhysRevLett.77.3865
12. Stewart J.J.P. General description of MOPAC2012 [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://openmopac.net/manual/index.html>, свободный. Яз. англ. (дата обращения 21.04.2016).
13. Maia J.D.C., Carvalho G.A.U., Manguiera Jr. C.P. et al. GPU linear algebra libraries and GPGPU programming for accelerating MOPAC semiempirical quantum chemistry calculations // Journal of Chemical Theory and Computation. 2012. V. 8. N 9. P. 3072–3081. doi: 10.1021/ct3004645
14. Furman J.D., Gundiah G., Page K., Pizarro N., Cheetham A.K. Local structure and time-resolved photoluminescence of emulsion prepared YAG nanoparticles // Chemical Physics Letters. 2008. V. 465. N 1–3. P. 67–72. doi:10.1016/j.cplett.2008.09.045
15. Giannozzi P., Baroni S., Bonini N. et al. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials // Journal of Physics: Condensed Matter. 2009. V. 21. N 39. Art. 395502. doi: 10.1088/0953-8984/21/39/395502

- |  |   |
|--|---|
| <i><b>Врубель Иван Игоревич</b></i>      | – аспирант, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, <a href="mailto:ivanvrubel@ya.ru">ivanvrubel@ya.ru</a>   |
| <i><b>Полозков Роман Григорьевич</b></i> | – кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник, Университет ИТМО, Санкт-Петербург, 197101, Российская Федерация, <a href="mailto:polozkov@corp.ifmo.ru">polozkov@corp.ifmo.ru</a> |
| <i><b>Шелых Иван Андреевич</b></i>       | – кандидат физико-математических наук, профессор, Исландский университет, Институт Науки, Рейкьявик, IS-107, Исландия, <a href="mailto:shelykh@raunvis.hi.is">shelykh@raunvis.hi.is</a>             |
| <i><b>Ivan I. Vrubel</b></i>             | – postgraduate, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, <a href="mailto:ivanvrubel@ya.ru">ivanvrubel@ya.ru</a>   |
| <i><b>Roman G. Polozkov</b></i>          | – PhD, leading researcher, ITMO University, Saint Petersburg, 197101, Russian Federation, <a href="mailto:polozkov@corp.ifmo.ru">polozkov@corp.ifmo.ru</a>  |
| <i><b>Ivan A. Shelykh</b></i>            | – PhD, Professor, University of Iceland, Science Institute, Reykjavik, IS-107, Iceland, <a href="mailto:shelykh@raunvis.hi.is">shelykh@raunvis.hi.is</a>  |