

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 538.9

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.003

## МЕТОД ХАРТРИ-ФОКА ДЛЯ КРИСТАЛЛОВ С БАЗИСОМ ПСЕВДО-АТОМНЫХ ОРБИТАЛЕЙ

Алексей Болеславович Гордиенко<sup>1</sup>

<sup>1</sup>ФГБОУ «Кемеровский государственный университет», ул. Красная, 6, 650000, Кемерово, Россия

<sup>1</sup>gordi@kemsu.ru <https://orcid.org/0000-0001-7827-8692>

**Аннотация.** Рассматривается реализация расчетов электронной структуры кристаллов методом Хартри-Фока в приближении псевдопотенциала с использованием базиса локализованных, псевдо-атомных орбиталей (ПАО), включая особенности расчета матрицы обменного оператора, в том числе в смешанном базисе, учитывающим плоские волны (ПАО+ПВ), организацию вычислений для получения самосогласованного решения уравнений Хартри-Фока и последующего расчета зонной структуры, а также обсуждение результатов расчетов, выполненных для группы соединений  $A^{IV}$  (C, Si, Ge,  $\alpha$ -Sn), которые показали хорошее качественное и количественное согласие с результатами, полученными другими методами, в том числе полноэлектронными.

**Ключевые слова:** метод Хартри-Фока, точный обмен, псевдо-атомные орбитали, зонная структура.

---

**Для цитирования:** Гордиенко А.Б. Метод Хартри-Фока для кристаллов с базисом псевдо-атомных орбиталей // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2026. Т. 23, № 1. С. 33-42. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.003.

---

Original article

## HARTREE-FOCK METHOD FOR CRYSTALS WITHIN THE BASIS OF PSEUDO-ATOMIC ORBITALS

Aleksei B. Gordienko<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Kemerovo State University, Krasnaya 6 st, Kemerovo, 650000, Russia

<sup>1</sup>gordi@kemsu.ru <https://orcid.org/0000-0001-7827-8692>

**Abstract.** The implementation is being considered for electronic structure calculations of crystals by the Hartree-Fock method in the pseudo-potential approximation using the basis of localized, pseudo-atomic orbitals (PAO), including the features of calculating the matrix of the exchange operator, within a mixed basis as well that takes into account the plane waves (PAO+PW), the arrangement of calculations to obtain a self-consistent solution of the Hartree-Fock equations and the subsequent calculation of the band structure, as well as a discussion of the results of calculations performed for the group of compounds  $A^{IV}$  (C, Si, Ge,  $\alpha$ -Sn), which demonstrated good qualitative and quantitative agreement with the results obtained by other methods, including all-electron as well.

**Keywords:** Hartree-Fock method, exact exchange, pseudo-atomic orbitals, band structure.

---

**For citation:** Gordienko A.B. (2026). Hartree-Fock method for crystals with the basis of pseudo-atomic orbitals. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 23(1), 33-42. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2026.01.003.

---

## Введение

Метод Хартри-Фока (HF), как известно, является одним из ранних первопринципных (*ab-initio*) подходов к решению задачи описания свойств многоэлектронных систем, который и в настоящее время, в том числе как основа расширенных методов, широко используется для расчета электронной структуры атомов и молекул. Для кристаллов, как систем с пространственной периодичностью, применение метода HF исторически было более ограниченным, что связано не только с более сложной, чем в методе Хартри, математической структурой уравнений HF, но также и с дополнительным и очень заметным, по сравнению с системами конечного размера, увеличением трудоемкости вычислений за счет необходимости учета особенностей, обусловленных трансляционной симметрией. Большой вклад в решение первой из указанных проблем внес статистический  $X_\alpha$ -метод Слэтера [1], где нелокальный обменный оператор в одночастичных уравнениях был заменен приближенным, локальным выражением, зависящим только от электронной плотности, что в дальнейшем привело к формулировке строгого подхода, известного как теория функционала плотности [2, 3] (DFT) и который сейчас является наиболее популярным методом исследования электронной структуры кристаллов. В то же время, в рамках DFT остается открытым вопрос о форме обменно-корреляционного функционала, для которого пока что не существует универсального решения, а для большинства известных локальных (LDA), полулокальных (GGA, meta-GGA), форм, входящих в набор из порядка 400 функционалов [4], присутствует общая погрешность, обусловленная самодействием, что в случае кристаллов приводит к некорректным оценкам значений ширины запрещенной зоны и ряда других важных характеристик. Так как в методе HF вклад самодействия компенсируется полностью, то самая простая идея корректировки DFT состояла бы в том, чтобы использовать обменную часть функционала энергии в форме HF (точный обмен), а для электронных корреляций, которые в методе HF, наоборот, никак не учитываются, применять соответствующие выражения для энергий и потенциалов, разработанные в рамках DFT. Однако, как показано в [5], такой вариант не дает заметных улучшений и, даже с учетом градиентных по-

правок, приводит к погрешностям, выходящим за границы химической точности, так как указанное разделение является искусственным и не имеющим какого-либо строгого физического смысла [6]. Более эффективным является смешанный подход к построению выражения для функционала обменно-корреляционной энергии ( $E_{xc}$ ), предложенный также в работе [6] и основанный на строгой формуле адиабатической связи (*adiabatic connection*). Одной из форм таких гибридных функционалов является, например, однопараметрическое выражение [7]:

$$E_{xc} = E_{xc}^{DFT} + a_0(E_x^{HF} - E_{xc}^{DFT}) \quad (1)$$

где  $E_{xc}^{DFT}$  - обменно-корреляционная энергия в DFT,  $E_x^{HF}$  - обменная энергия в форме HF,  $a_0$  - параметр смешивания. Дальнейшее развитие идеи [6] привело к построению целого семейства гибридных функционалов, из которых наиболее известными являются B3LYP [8], PBE0 [9], HSE [10], а другие типы детально рассматриваются в обзоре [11].

Как следует из (1) и других, подобных выражений, основной вычислительной задачей и в методе HF, и методах DFT с гибридными функционалами, является расчет вкладов, обусловленных точным обменом и для периодических систем к настоящему времени разработано множество вариантов ее решения как в координатном, так и импульсном (обратном) пространстве. Методы первого типа представлены в [12-17], базис плоских волн (PW) используется в [18-27], линейаризованных присоединенных плоских волн (LAPW) в [28-31], линейных muffin-tin орбиталей (LMTO) в [32]. Как показывает анализ приведенных публикаций, задача реализации расчетов с точным обменом продолжает оставаться достаточно актуальной, что определяет цель настоящей работы, состоящую в разработке метода решения уравнений Хартри-Фока, который объединяет преимущества базиса локализованных функций в форме псевдо-атомных орбиталей (РАО) и стандартного для периодических систем базиса плоских волн.

## Методы: решение уравнений Хартри-Фока с базисом РАО.

Уравнения Хартри-Фока для периодических систем имеют вид

$$\left[ -\frac{1}{2}\nabla^2 + V_H[\rho; \mathbf{r}] + \hat{V}_x + V_Z \right] \psi_{n\mathbf{k}} = E_{n\mathbf{k}} \psi_{n\mathbf{k}}, \quad (2)$$

$$V_H[\rho; \mathbf{r}] = \int_{(\Omega)} \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}', \quad (3)$$

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{n\mathbf{k}} f_{n\mathbf{k}} |\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})|^2, \quad (4)$$

$$[\hat{V}_x \psi_{n\mathbf{k}}](\mathbf{r}) = -\frac{1}{2} \sum_{m\mathbf{q}} f_{m\mathbf{q}} \psi_{m\mathbf{q}}(\mathbf{r}) \int_{(\Omega)} \frac{\psi_{m\mathbf{q}}^*(\mathbf{r}') \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}', \quad (5)$$

где  $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  – одночастичные функции,  $n\mathbf{k}$  – номер зоны и волновой вектор,  $V_H[\rho; \mathbf{r}]$  – кулоновский потенциал, создаваемый зарядом с плотностью  $\rho(\mathbf{r})$ ,  $V_Z$  – кулоновский потенциал ядер или, в случае метода псевдопотенциала, ионов,  $\Omega$  – объем кристалла,  $f_{n\mathbf{k}}$  – числа заполнения, суммирование в (4) выполняется по первой зоне Бриллюэна, а (5) определяет действие обменного оператора.

Решение уравнений HF (2)–(5) в методе линейной комбинации атомных орбиталей (LCAO) записывается в виде

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mu} C_{n\mathbf{k}\mu} \Phi_{\mathbf{k}\mu}(\mathbf{r}). \quad (6)$$

Базисные блоховские функции в (6) определены как

$$\Phi_{\mathbf{k}\mu}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{a}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{a} + \boldsymbol{\tau}_i)} \varphi_{ilm}(\mathbf{r} - \mathbf{a} - \boldsymbol{\tau}_i), \quad (7)$$

где  $\mathbf{a}$  – вектор решетки,  $\boldsymbol{\tau}_i$  – положение атома  $i$  в элементарной ячейке кристалла,  $\varphi_{ilm}(\mathbf{r})$  – атомные орбитали, которые в настоящей работе имеют вид РАО [33–36],  $\mu \equiv (ilm)$  – объединенный индекс,  $lm$  – орбитальное и магнитное квантовые числа. Представление (6) для одночастичных функций приводит к обобщенной алгебраической задаче, для которой предварительным этапом является вычисление многоцентровых интегралов с атомными функциями и для кристаллов, как показано в [37, 38], очень эффективным является использование свойства периодичности функций  $\Phi_{\mathbf{k}\mu}$ , что позволяет представить их как Фурье-разложение по базису плоских волн

$$\Phi_{\mathbf{k}\mu}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{G})\mathbf{r}} \Phi_{\mathbf{k}\mu}(\mathbf{G}), \quad (8)$$

$$\Phi_{\mathbf{k}\mu}(\mathbf{G}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \int_{(\Omega)} e^{-i(\mathbf{k} + \mathbf{G})\mathbf{r}} \Phi_{\mathbf{k}\mu}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \equiv \langle \mathbf{k} + \mathbf{G} | \Phi_{\mathbf{k}\mu} \rangle \quad (9)$$

Фурье-образы вычисляются достаточно легко, а вычисление матричных элементов в уравнении (1) сводится к суммированию рядов в обратном пространстве [37, 38], сходимость которых контролируется только одним параметром – числом плоских волн в разложении (8). Применение такой схемы к обменному оператору приводит к следующему выражению для соответствующего матричного элемента

$$\langle \Phi_{\mathbf{k}\mu} | \hat{V}_x | \Phi_{\mathbf{k}\nu} \rangle = \sum_{\mathbf{G}} \langle \Phi_{\mathbf{k}\mu} | \mathbf{k} + \mathbf{G} \rangle \langle \mathbf{k} + \mathbf{G} | \hat{V}_x | \Phi_{\mathbf{k}\nu} \rangle \quad (10)$$

и, таким образом, требует вычисления матрицы  $\hat{V}_x$  в смешанном базисе атомных орбиталей и плоских волн, что в работах, приведенных выше не рассматривалось, так как вычисления обычно выполнялись в "однородном" базисе.

Для вычисления смешанного матричного элемента в (10) рассмотрим действие обменного оператора на базисную функцию

$$[\hat{V}_x \Phi_{\mathbf{k}\nu}](\mathbf{r}) = -\frac{1}{2} \sum_{m\mathbf{q}} f_{m\mathbf{q}} \psi_{m\mathbf{q}}(\mathbf{r}) \int_{(\Omega)} \frac{\psi_{m\mathbf{q}}^*(\mathbf{r}') \Phi_{\mathbf{k}\nu}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}'. \quad (11)$$

Записывая парные функции как

$$\psi_{m\mathbf{q}}^*(\mathbf{r}) \Phi_{\mathbf{k}\nu}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{G}} Y_{m\mathbf{q}\nu\mathbf{k}}(\mathbf{G}) e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{q} + \mathbf{G})\mathbf{r}}, \quad (12)$$

$$Y_{m\mathbf{q}\nu\mathbf{k}}(\mathbf{G}) = \frac{1}{\Omega_0} \int_{(\Omega_0)} e^{-i\mathbf{G}\mathbf{r}} u_{m\mathbf{q}}^*(\mathbf{r}) \Phi_{\mathbf{k}\nu}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (13)$$

$u_{m\mathbf{q}}(\mathbf{r})$  – периодическая часть  $\psi_{m\mathbf{q}}$ , определенная как

$$u_{m\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} u_{m\mathbf{q}}(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}}, \quad (14)$$

а  $\Omega_0$  – объем элементарной ячейки, соответственно, получим

$$[\hat{V}_x \Phi_{\mathbf{k}\nu}](\mathbf{r}) = -\frac{2\pi}{\Omega_0} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{m\mathbf{q}} f_{m\mathbf{q}} u_{m\mathbf{q}}(\mathbf{r}) \times \sum_{\mathbf{G}} \frac{Y_{m\mathbf{q}\nu\mathbf{k}}(\mathbf{G})}{|\mathbf{k} - \mathbf{q} + \mathbf{G}|^2} e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{G})\mathbf{r}} \quad (15)$$

Прямое использование формулы (15), будет очень неэффективным, так как при  $\mathbf{k} = \mathbf{q}$  и  $\mathbf{G} = 0$  это выражение содержит особенность, которая, хотя и является интегрируемой, но сильно замедляет сходимость сумм по  $\mathbf{q}$ . Метод исключения указанной особенности, который первоначально предложен в [39] и обобщен для произвольного типа решетки в [40], основан на использовании вспомогательной

функции, имеющей особенность, аналогичную (15). Тогда, отделяя в (15) сингулярное слагаемое аналогично [40], после несложных преобразований получим для (15) эквивалентное выражение

$$\begin{aligned} [\hat{V}_x \Phi_{kv}](\mathbf{r}) = & -\frac{2\pi}{\Omega_0} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{m\mathbf{q} \neq \mathbf{k}} f_{m\mathbf{q}} u_{m\mathbf{q}}(\mathbf{r}) \times \\ & \times \sum_{\mathbf{G}} \frac{Y_{m\mathbf{q}v\mathbf{k}}(\mathbf{G})}{|\mathbf{k} - \mathbf{q} + \mathbf{G}|^2} e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{G})\mathbf{r}} - \\ & - \frac{2\pi}{\Omega_0} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_m f_{m\mathbf{k}} u_{m\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \sum_{\mathbf{G} \neq 0} \frac{Y_{m\mathbf{k}v\mathbf{k}}(\mathbf{G})}{|\mathbf{G}|^2} e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{G})\mathbf{r}} + \\ & + \frac{2\pi}{\Omega_0} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_m f_{m\mathbf{k}} u_{m\mathbf{k}}(\mathbf{r}) Y_{m\mathbf{k}v\mathbf{k}}(\mathbf{0}) [\tilde{F} - F] e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \end{aligned} \quad (16)$$

где обозначено

$$\tilde{F} = \sum_{\mathbf{q} \neq 0} f(\mathbf{q}), \quad (17)$$

$$F = \frac{\Omega_0}{(2\pi)^3} \int_{(BZ)} f(\mathbf{q}) d\mathbf{q}, \quad (18)$$

В (17)-(18)  $f(\mathbf{q})$  – вспомогательная функция, имеющая при  $q \rightarrow 0$  особенность типа  $1/q^2$ . В настоящей работе для  $f(\mathbf{q})$  далее использовалась форма, предложенная в [40]

$$f_G(\mathbf{q}) = 4\pi^2 \left[ \frac{4 \sum_{j=1}^3 \mathbf{b}_j \sin \frac{\mathbf{q}\mathbf{a}_j}{2} \cdot \mathbf{b}_j \sin \frac{\mathbf{q}\mathbf{a}_j}{2} + 2 \sum_{j=1}^3 \mathbf{b}_j \sin \mathbf{q}\mathbf{a}_j \cdot \mathbf{b}_{j+1} \sin \mathbf{q}\mathbf{a}_{j+1} \right]^{-1} \quad (19)$$

где  $\mathbf{a}_j, \mathbf{b}_j$  – основные векторы трансляций в координатном и обратном пространстве, суммирование выполняется с учетом замены  $\mathbf{a}_4, \mathbf{b}_4 \rightarrow \mathbf{a}_1, \mathbf{b}_1$ , а интеграл по зоне Бриллюэна (18) вычислялся с использованием схемы, предложенной в [41]. Выражение (16) можно представить в более компактном виде, обозначая

$$\begin{aligned} \bar{Y}_{m\mathbf{q}v\mathbf{k}}(\mathbf{G}) = & \frac{Y_{m\mathbf{q}v\mathbf{k}}(\mathbf{G})}{|\mathbf{k} - \mathbf{q} + \mathbf{G}|^2} (1 - \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}}) + \\ & + \frac{Y_{m\mathbf{k}v\mathbf{k}}(\mathbf{G})}{|\mathbf{G}|^2} (1 - \delta_{\mathbf{G}\mathbf{0}}) \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \\ & - Y_{m\mathbf{k}v\mathbf{k}}(\mathbf{0}) [\tilde{F} - F] \delta_{\mathbf{G}\mathbf{0}} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{q}} \end{aligned} \quad (20)$$

Тогда

$$[\hat{V}_x \Phi_{kv}](\mathbf{r}) = -\frac{2\pi}{\Omega_0} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \sum_{m\mathbf{q}} f_{m\mathbf{q}} u_{m\mathbf{q}}(\mathbf{r}) \bar{Y}_{m\mathbf{q}v\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (21)$$

$$\bar{Y}_{m\mathbf{q}v\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \bar{Y}_{m\mathbf{q}v\mathbf{k}}(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G}\mathbf{r}} \quad (22)$$

и смешанный матричный элемент в (10) окончательно запишется как

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k} + \mathbf{G} | \hat{V}_x | \Phi_{kv} \rangle = & -\frac{2\pi}{\Omega_0} \sum_{m\mathbf{q}} f_{m\mathbf{q}} \times \\ & \times \frac{1}{\Omega_0} \int_{(\Omega_0)} e^{-i\mathbf{G}\mathbf{r}} u_{m\mathbf{q}}(\mathbf{r}) \bar{Y}_{m\mathbf{q}v\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \end{aligned} \quad (23)$$

С использованием полученных формул, а также обозначений для прямого и обратного Фурье-преобразования аналогично [27], общую схему вычислений матрицы обменного потенциала можно записать в следующем виде:

1. Вычисление  $u_{m\mathbf{q}}(\mathbf{r})$  и  $\Phi_{kv}(\mathbf{r})$

$$u_{m\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = \text{FT}^{-1}[u_{m\mathbf{q}}(\mathbf{G})], \quad (24)$$

$$\Phi_{kv}(\mathbf{r}) = \text{FT}^{-1}[\Phi_{kv}(\mathbf{G})]. \quad (25)$$

2. Вычисление парной функции (12)

$$Y_{m\mathbf{q}v\mathbf{k}}(\mathbf{G}) = \text{FT}[u_{m\mathbf{q}}^*(\mathbf{r}) \Phi_{kv}(\mathbf{r})]. \quad (26)$$

3. Вычисление  $Y_{m\mathbf{q}v\mathbf{k}}(\mathbf{r})$

$$Y_{m\mathbf{q}v\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \text{FT}^{-1}[Y_{m\mathbf{q}v\mathbf{k}}(\mathbf{G})]. \quad (27)$$

4. Вычисление  $\langle \mathbf{k} + \mathbf{G} | \hat{V}_x | \Phi_{kv} \rangle$  (23)

$$\langle \mathbf{k} + \mathbf{G} | \hat{V}_x | \Phi_{kv} \rangle = -\frac{2\pi}{\Omega_0} \sum_{m\mathbf{q}} f_{m\mathbf{q}} \text{FT}[u_{m\mathbf{q}}(\mathbf{r}) \bar{Y}_{m\mathbf{q}v\mathbf{k}}(\mathbf{r})]. \quad (28)$$

Таким образом, например в случае диэлектриков, для определения матрицы обменного потенциала необходимо выполнить  $5N_{occ}N_qN_\Phi$  Фурье-преобразований, где  $N_{occ}$ ,  $N_q$  и  $N_\Phi$  соответственно число занятых состояний, число точек  $\mathbf{q}$ -сетки в зоне Бриллюэна и размерность орбитального базиса.

В заключение настоящего раздела следует отметить некоторые особенности организации самосогласованного решения уравнений HF (2), а также последующего расчета зонной структуры. Первая задача, как и в других подобных работах, решалась с использованием двойного итерационного цикла, где вклады обменного потенциала обновляются во внешнем цикле, а одночастичные функции и электронная плотность во внутреннем. Расчет зонной структуры в методе HF также отличается по способу от аналогичного расчета в рамках DFT, где стандартной схемой являются вычисления с фиксированной электронной плотностью, когда одночастичные уравнения рассматриваются как линейные, а способ их решения для точек зоны Бриллюэна, которые, как правило, не входят в "самосогласованный" набор, фактически представляет собой интерполяционную схему.

Уравнения HF и для задачи расчета зонной структуры остаются нелинейными, интегро-дифференциальными, поэтому в этом случае также необходимо применение итерационных методов и в настоящей работе использовалась

схема с линейным смешиванием, представленная ранее в [28], при этом для получения решения с точностью для  $E_{nk}$  порядка  $10^{-8} \div 10^{-9}$  а.е. требовалось порядка 10-15 итераций.

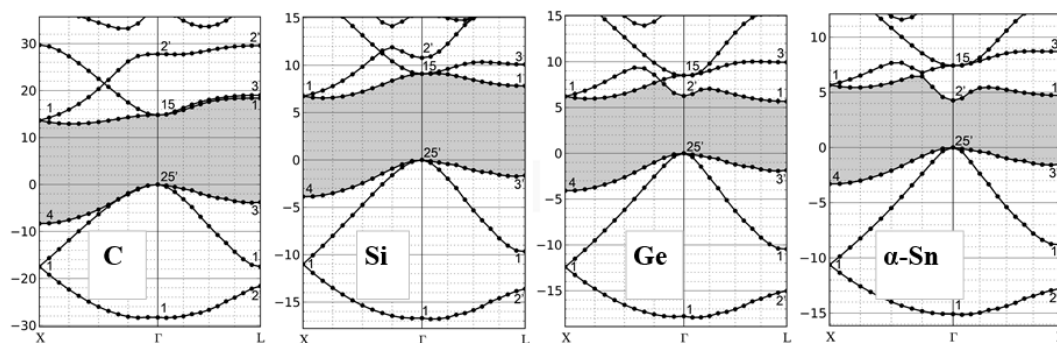


Рис.1. Зонная структура C, Si, Ge,  $\alpha$ -Sn, эВ

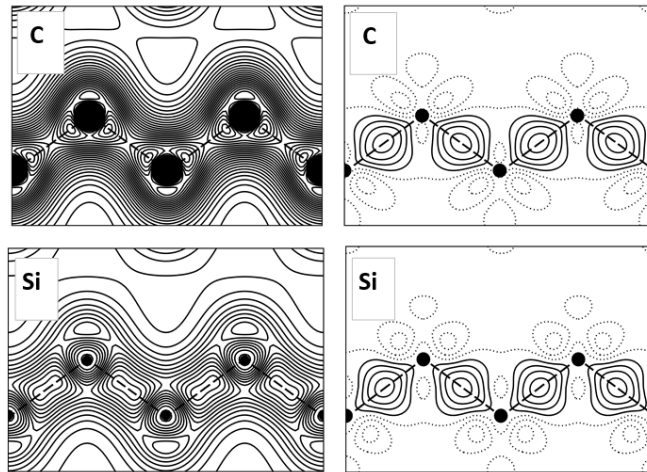
Fig.1. Band structure of C, Si, Ge,  $\alpha$ -Sn, eV

### 3. Результаты вычислений.

Для проверки схемы решения уравнений HF, представленной выше, были выполнены расчеты электронной структуры для ряда соединений  $A^{IV}$ ,  $A = C, Si, Ge, \alpha$ -Sn, со структурой алмаза. Вычисления проводились с базисом PAO, во всех случаях включающим *single*- и *double*- $\zeta$  функции *s*-, *p*- и *d*- типа, в разложениях базисных PAO, согласно (8) использовались плоские волны с энергиями от 20.25 до 121.0 Ry. Для описания электрон-ионного взаимодействия использовались сохраняющие норму, сепарабельные HGH-псевдопотенциалы [42]. Электронная плотность и обменный потенциал вычислялись с использованием метода специальных точек [43, 44], на сетке MP [44] размерностью  $6 \times 6 \times 6$  точек, которая вместе с компенсацией особенностей обеспечивает сходимость обменной энергии порядка  $10^{-4}$  а.е., [41]. Для расчета сингулярных интегралов (18) использовалась схема [41] с равномерной и сферической сетками размерности  $40 \times 40 \times 40$  и  $40 \times 40 \times 80$  соответственно.

Зонная структура  $A^{IV}$  показана на рис.1, где вершина валентной зоны совмещена с началом отсчета по шкале энергий (эВ), а цифрами обозначены символы неприводимых представлений группы  $O_h^7$ . Во всех случаях наблюдаются основные эффекты, характерные для расчетов методом HF: заметное, в сравнении с результа-

тами LDA и экспериментом, уширение валентной зоны, а также сильное увеличение ширины запрещенной зоны  $E_g$ , которое, увеличиваясь по ряду C, Si, Ge, достигает порядка 8.5 раз по отношению к соответствующим экспериментальным значениям. Для  $\alpha$ -Sn происходит и качественное изменение характера электронной структуры, которая приобретает вид, соответствующий прямозонному диэлектрику с шириной запрещенной зоны порядка 4.25 эВ, хотя  $\alpha$ -Sn является полуметаллом. В то же время, сравнение значений для основных энергетических интервалов, приведенных в Таблице 1, показывает достаточное хорошее согласие результатов, полученных в настоящей работе и работах других авторов. При этом наиболее близкими являются результаты полноэлектронного расчета методом LAPW [28], а для метода LMTO [32] значения всех интервалов оказываются несколько меньше, за исключением ширины валентной зоны, где наблюдается обратное. Данная особенность отмечалась в [28], где такой эффект объясняли использованием приближения атомных сфер и не самосогласованным способом вычислений, который, что можно отметить в дополнение к аргументам [28], основан не на прямом решении уравнений HF, а на применении теории возмущений, где в качестве исходного приближения использовались результаты расчетов в локальном приближении.



**Рис.2.** Полная валентная (слева) и разностная ( $\delta\rho = \rho^{\text{HF}} - \rho^{\text{LDA}}$ , справа) плотность в C и Si в плоскости [110] (сплошные линии –  $\delta\rho > 0$ , пунктирные –  $\delta\rho < 0$ )

**Fig.2.** Total valence (left) and difference ( $\delta\rho = \rho^{\text{HF}} - \rho^{\text{LDA}}$ , right) density in C and Si in the [110] plane (solid lines –  $\delta\rho > 0$ , dotted –  $\delta\rho < 0$ )

Таблица 1. Основные энергетические параметры электронной структуры  $A^{\text{IV}}$ , эВ. Значения в столбцах перечислены в порядке: настоящая работа, LAPW [28], LMTO [32], PP [28].

Table 1. The basis energetic parameters for electronic structure of  $A^{\text{IV}}$ , eV. The values in the columns are presented in the order : present work, LAPW [28], LMTO [32], PP [28]

|                                  | C                                | Si                               | Ge                       | $\alpha\text{-Sn}$     |
|----------------------------------|----------------------------------|----------------------------------|--------------------------|------------------------|
| $\Gamma_1^v - \Gamma_{25'}^v$    | 28.29<br>29.40<br>29.90<br>29.10 | 16.68<br>17.10<br>18.00<br>17.10 | 17.77<br>–<br>18.90      | 15.10<br>–<br>16.00    |
| $\Gamma_{25'}^v - \Gamma_{15}^c$ | 14.80<br>14.70<br>14.60<br>15.00 | 9.10<br>9.00<br>8.70<br>9.30     | 8.51<br>–<br>7.90<br>–   | 7.41<br>–<br>6.60<br>– |
| $\Gamma_{25'}^v - \Gamma_2^c$    | 27.78<br>24.50<br>23.70<br>24.80 | 10.78<br>10.60<br>9.30<br>11.00  | 6.26<br>–<br>4.30<br>–   | 4.25<br>–<br>2.60<br>– |
| $X_4^v - X_1^c$                  | 21.96<br>21.50<br>21.30<br>21.30 | 10.60<br>10.50<br>10.00<br>10.70 | 10.29<br>–<br>10.19<br>– | 8.85<br>–<br>8.10<br>– |
| $L_{3'}^v - L_1^c$               | 23.17<br>22.00<br>21.30<br>21.80 | 9.45<br>9.40<br>8.10<br>9.60     | 7.51<br>–<br>6.08<br>–   | 6.22<br>–<br>4.60<br>– |
| $E_g$                            | 12.92<br>12.40<br>12.10          | 6.55<br>6.30<br>5.60             | 5.97<br>–<br>4.20        | 4.25<br>–<br>2.60      |
| Эксп. [32]                       | 12.90<br>5.50                    | 6.40<br>1.20                     | –<br>0.7                 | –<br>0.0               |

На рис.2 для кристаллов алмаза и кремния приведены карты распределений полной валентной, а также разностной  $\delta\rho = \rho^{\text{HF}} - \rho^{\text{LDA}}$  электронной плотности. Как видно, в первом случае картина визуально неотличима от "стандартной", которая получается, например, в LDA расчетах и содержит области значительной локализации заряда в окрестности атомов и на линиях тетраэдрических связей. В то же время, усиление локализирующего действия обменного потенциала HF в сравнении с его локальным вариантом (LDA), приводит к увеличению плотности заряда на линиях связи и появлению областей отрицательной  $\delta\rho$ , имеющих форму лепестков. При этом общая картина разностной плотности (рис.2), включая и мелкие детали, подобна приведенной в [28] для полного электронного метода LAPW, а по абсолютной величине эффект перераспределения заряда также является сравнительно небольшим, на что указывают значения  $\delta\rho$ , которые в максимуме составляют в Si и C порядка  $0.008 \div 0.01$  а.е.<sup>-3</sup>, подтверждая известный вывод о близком подобии одночастичных функций в методах HF и DFT.

### Заключение.

1. В настоящей работе представлена и реализована схема расчета электронной структуры кристаллов методом Хартри-Фока с использованием базиса локализованных, псевдо-атомных функций. Как показали расчеты, выполненные для группы соединений A<sup>IV</sup>, включая C, Si, Ge и  $\alpha$ -Sn, значения основных энергетических характеристик, общая форма и детали распределений плотности заряда находятся в очень хорошем согласии с аналогичными, но полученными, в том числе, с помощью полностью электронных методов.

### Список литературы

1. Слэтер Дж. Методы самосогласованного поля для молекул и твердых тел. М. Мир. 1978. 658 С.
2. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous Electron Gas // Phys. Rev. B. – 1964. – V. 136. – P. 864-871.
3. Kohn W., Sham L.J. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects // Phys. Rev. – 1965. – V.140. – P. A1133-A1138.
4. Lehtola S., Steigemann C., Oliveira M.J.T., Marques M.A.L. Recent developments in libxc —

A comprehensive library of functionals for density functional theory // SoftwareX. – 2018. – V.7. – P. 1-5.

5. Clementi E., Chakravorty S.J. A comparative study of density functional models to estimate molecular atomization energies // J. Chem. Phys. – 1990. – V.93. – P. 2591-2602.

6. Becke A.D. A new mixing of Hartree-Fock and local density functional theories // J. Chem. Phys. – 1993. – V.98. – P. 1372-1377.

7. Becke A.D. Density functional thermochemistry. IV. A new dynamical correlation functional and implications for exact exchange mixing // J. Chem. Phys. – 1996. – V.104. – P. 1040-1046.

8. Becke, A.D. Density functional thermochemistry. III. The role of exact exchange // J. Chem. Phys. – 1993. – V.98. – P. 5648-5652.

9. Perdew J. P., Ernzerhof M., Burke K. Rationale for mixing exact exchange with density functional approximations // J. Chem. Phys. – 1996. – V.105. – P. 9982-9985.

10. Heyd J., G. E. Scuseria G. E., Ernzerhof M. Hybrid functionals based on a screened Coulomb potential // J. Chem. Phys. – 2003. – V. 118. – P. 8207-8215.

11. Арбузников А.В. Гибридные обменно-корреляционные функционалы и потенциалы. Развитие концепции // Ж. Структ. Химии – 2007. – Т.48. – С. S5-S38

12. Dovesi R., Orlando R., Roetti C., Pisani C., Saunders V.R. The Periodic Hartree-Fock Method and Its Implementation in the Crystal Code // Phys. stat sol.(b) – 2000. – V.217. – P. 63-88.

13. Levchenko S.V., Ren X., Wieferink J., Johanni R., Rinke P., Blum V., Scheffler M. Hybrid functionals for large periodic systems in an all-electron, numeric atom-centered basis framework // Comput. Phys. Comm. – 2015. – V.192. – P. 60-69.

14. Fernández J.J., Tablero C., Wahnón P. Development and implementation of the exact exchange method for semiconductors using a localized basis set // Comput. Mat. Sci. 2003. – V.28. – P. 274-286.

15. Bussy A., Hutter J. Efficient periodic resolution-of-the-identity Hartree-Fock exchange method with k-point sampling and Gaussian basis sets // J. Chem. Phys. – 2024. – V.160. – P. 064116(1-12).

16. Boffi N., Jain M., Natan A. Efficient Computation of the Hartree-Fock Exchange in Real-Space with Projection Operators // J. Chem. Theory Comput. – 2016. – V.12. – P. 3614-3622.

17. Guidon M., Hutter J., Vondele V. Robust Periodic Hartree-Fock Exchange for Large-Scale Simulations Using Gaussian Basis Sets // J. Chem. Theory Comput. – 2009. – V.5. – P. 3010-3021.

18. Ohkoshi I. An ab initio Hartree-Fock pseudopotential approach to the ground-state properties of Si // *J. Phys. C: Solid State Phys.* – 1985. – V.18. – P. 5415-5427.
19. Lin L. Adaptively Compressed Exchange Operator // *J. Chem. Theory Comput.* – 2016. – V.12. – P. 2242-2249.
20. Carnimeo I., Baroni S., Gianozzi P. Fast hybrid density-functional computations using plane-wave basis sets // *Electron. Struct.* – 2019. – V.1. – P. 015009(1-10)
21. Duchemin I., Gygi F. A scalable and accurate algorithm for the computation of Hartree-Fock exchange // *Comput. Phys. Comm.* – 2010. – V.181. – P. 855-860.
22. Paier J., Marsman M., Hummer K., Kresse G., Gerber I.C., Ángyán J.G. Screened hybrid density functionals applied to solids // *J. Chem. Phys.* – 2006. – V.124. – P. 154709 (1-13).
23. Clark S.J., Robertson J. Screened exchange density functional applied to solids // *Phys. Rev. B* – 2010. – V.82. – P. 085208(1-11).
24. Holzwarth N.A.W., Xu X. Analysis of numerical methods for evaluating the Fock exchange integral in a plane-wave basis // *Phys. Rev. B* – 2011. – V.84. – P. 113102(1-4).
25. Sorouri A., Foulkes W.M.C., Hine N.D.M. Accurate and efficient method for the treatment of exchange in a plane-wave basis // *J. Chem. Phys.* – 2006. – V.124. – P. 064105(1-7).
26. Barnes T.A., Kurth T., Cerrier P., Wichmann N., Prendergast D., Kent P.R.C., Deslippe J. Improved treatment of exact exchange in Quantum ESPRESSO // *Comput. Phys. Comm.* – 2017. – V.214. – P. 52-58.
27. Chawla S., Voth G.A. Exact exchange in ab initio molecular dynamics: An efficient plane-wave based algorithm // *J. Chem. Phys.* – 1998. – V.108(12). – P. 4697-4700.
28. Massidda S., Posternak M., Baldareshi A. Hartree-Fock LAPW approach to the electronic properties of periodic systems // *Phys. Rev. B* – 1993. – V.48(8). – P. 5058.-5068
29. Schlipf M., Betzinger M., Friedrich C., Ležaić M., Blügel S. HSE hybrid functional within the FLAPW method and its application to GdN // *Phys. Rev. B* – 2011. – V.84. – P. 125142 (1-11).
30. Betzinger M., Friedrich C., Blügel S. Hybrid functionals within the all-electron FLAPW method: Implementation and applications of PBE0 // *Phys. Rev. B* – 2010. – V.81. – P. 195117(1-13).
31. Redies M., Michalíček G., Bouaziz J., Terboven C., Müller M.S., Blügel S., Wortmann D. Fast All-Electron Hybrid Functionals and Their Application to Rare-Earth Iron Garnets // *Front. Matter.* 2022. – V.9. – P. 851458(1-11).
32. Svane A. Hartree-Fock band-structure calculations with the linear muffin-tin-orbital method: Application to C, Si, Ge, and  $\alpha$ -Sn // *Phys. Rev. B* – 1987. – V.35(11). – P. 5496-5502.
33. Jansen R.W., Sankey O.F. Ab initio linear combination of pseudo-atomic-orbital scheme for the electronic properties of semiconductors: Results for ten materials // *Phys. Rev. B* – 1987. – V.36(12). – P. 6520-6531.
34. Jansen R.W., Sankey O.F. Theory of relative native- and impurity-defect abundances in compound semiconductors and the factors that influence them // *Phys. Rev. B* – 1989. – V.39(5). – P. 3192-3206.
35. Гордиенко А.Б., Поплавной А.С. Расчет электронной структуры кристаллов в базисе псевдоорбиталей // *Изв. вузов. Физика.* – 1997. – т.40(1). – С.54-58
36. Gordienko A.B., Poplavnoi A.S. The Application of ab-initio Linear Combination of Pseudo-Atomic-Orbital Scheme for the Electronic Structure of Lithium Azide  $\text{LiN}_3$  // *Phys. stat. slo.(b)* – 1997. – V.202(2). – P. 941-949.
37. Zunger A., Cohen M. L. Self-consistent pseudopotential calculation of the bulk properties of Mo and W // *Phys. Rev. B* – 1979. – V.19(2). – P. 568-582.
38. Louie S., Ho K.-M., Cohen M. L. Self-consistent mixed-basis approach to the electronic structure of solids // *Phys. Rev. B* – 1979. – V.19(4). – P. 1774-1782.
39. Gygi F., Baldareshi A. Self-consistent Hartree-Fock and screened-exchange calculations in solids: Application to silicon // *Phys. Rev. B.* – 1986. – V.34. – P.4405-4408.
40. Carrier P., Rohra S., Görling A. General treatment of the singularities in Hartree-Fock and exact-exchange Kohn-Sham methods for solids // *Phys. Rev. B.* – 2007. – V.75. – P. 205126 (1-10).
41. Гордиенко А.Б., Коробко К.В. Вычисление сингулярных интегралов по зоне Бриллюэна // *Изв. вузов. Физика.* – 2024. – Вып. 67.(3) – С.82-89.
42. Hartwigsen C., Goedecker S., Hütter Relativistic separable dual-space Gaussian pseudopotentials from H to Rn // *J. Phys. Rev. B.* – 1998. – V.58(7), – P. 3641-3662.
43. Chadi D. J., Cohen M. L. Special Points in the Brillouin Zone // *Phys. Rev. B.* – 1973. – V. 8. – P. 5747-5753.
44. Monkhorst H. J., Pack J. D. Special points for Brillouin-zone integrations // *Phys. Rev. B.* – 1976. – V. 13. – P. 5188–5192.

#### **Информация об авторах**

*А. Б. Гордиенко - доктор физико-математических наук, профессор Кемеровского государственного университета.*

## References

1. Slater J. C. Self-consistent Field for Molecules and Solids. 1974. New-York, McGraw-Hill. - 640 P.
2. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous Electron Gas // *Phys. Rev. B.* – 1964. – V. 136. – P. 864-871.
3. Kohn W., Sham L.J. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects // *Phys. Rev.* – 1965. – V.140. – P. A1133-A1138.
4. Lehtola S., Steigemann C., Oliveira M.J.T., Marques M.A.L. Recent Developments in libxc — A Comprehensive Library of Functionals for Density Functional Theory // *SoftwareX.* – 2018. – V.7. – P. 1-5.
5. Clementi E., Chakravorty S.J. A Comparative Study of Density Functional Models to Estimate Molecular Atomization Energies // *J. Chem. Phys.* – 1990. – V.93. – P. 2591-2602.
6. Becke A.D. A New Mixing of Hartree-Fock and Local Density Functional Theories // *J. Chem. Phys.* – 1993. – V.98. – P. 1372-1377.
7. Becke A.D. Density Functional Thermochemistry. IV. A New Dynamical Correlation Functional and Implications for Exact Exchange Mixing // *J. Chem. Phys.* – 1996. – V.104. – P. 1040-1046.
8. Becke, A.D. Density Functional Thermochemistry. III. The Role of Exact Exchange // *J. Chem. Phys.* – 1993. – V.98. – P. 5648-5652.
9. Perdew J. P., Ernzerhof M., Burke K. Rationale for Mixing Exact Exchange with Density Functional Approximations // *J. Chem. Phys.* – 1996. – V.105. – P. 9982-9985.
10. Heyd J., G. E. Scuseria G. E., Ernzerhof M. Hybrid Functionals Based on a Screened Coulomb Potential // *J. Chem. Phys.* – 2003. – V. 118. – P. 8207-8215.
11. Arbuznikov, A.V. Hybrid Exchange Correlation Functionals and Potentials: Concept Elaboration // *J Struct Chem* – 2007. V.48 (Suppl 1). – S1-S31
12. Dovesi R., Orlando R., Roetti C., Pisani C., Saunders V.R. The Periodic Hartree-Fock Method and Its Implementation in the Crystal Code // *Phys. stat sol.(b)* – 2000. – V.217. – P. 63-88.
13. Levchenko S.V., Ren X., Wieferink J., Johanni R., Rinke P., Blum V., Scheffler M. Hybrid Functionals for Large Periodic Systems in an All-electron, Numeric Atom-centered Basis Framework // *Comput. Phys. Comm.* – 2015. – V.192. – P. 60-69.
14. Fernández J.J., Tablero C., Wahnón P. Development and Implementation of the Exact Exchange Method for Semiconductors Using a Localized Basis Set // *Comput. Mat. Sci.* 2003. – V.28. – P. 274-286.
15. Bussy A., Hutter J. Efficient Periodic Resolution-of-the-identity Hartree-Fock Exchange Method with k-point Sampling and Gaussian Basis Sets // *J. Chem. Phys.* – 2024. – V.160. – P. 064116(1-12).
16. Boffi N., Jain M., Natan A. Efficient Computation of the Hartree-Fock Exchange in Real-Space with Projection Operators // *J. Chem. Theory Comput.* – 2016. – V.12. – P. 3614-3622.
17. Guidon M., Hutter J., Vondel V. Robust Periodic Hartree-Fock Exchange for Large-Scale Simulations Using Gaussian Basis Sets // *J. Chem. Theory Comput.* – 2009. – V.5. – P. 3010-3021.
18. Ohkoshi I. An ab initio Hartree-Fock Pseudopotential Approach to the Ground-state Properties of Si // *J. Phys. C: Solid State Phys.* – 1985. – V.18. – P. 5415-5427.
19. Lin L. Adaptively Compressed Exchange Operator // *J. Chem. Theory Comput.* – 2016. – V.12. – P. 2242-2249.
20. Carnimeo I., Baroni S., Gianozzi P. Fast Hybrid Density-functional Computations Using Plane-wave Basis Sets // *Electron. Struct.* – 2019. – V.1. – P. 015009(1-10)
21. Duchemin I., Gygi F. A Scalable and Accurate Algorithm for the Computation of Hartree-Fock Exchange // *Comput. Phys. Comm.* – 2010. – V.181. – P. 855-860.
22. Paier J., Marsman M., Hummer K., Kresse G., Gerber I.C., Ángyán J.G. Screened Hybrid Density Functionals Applied to Solids // *J. Chem. Phys.* – 2006. – V.124. – P. 154709 (1-13).
23. Clark S.J., Robertson J. Screened Exchange Density Functional Applied to Solids // *Phys. Rev. B* – 2010. – V.82. – P. 085208(1-11).
24. Holzwarth N.A.W., Xu X. Analysis of Numerical Methods for Evaluating the Fock Exchange Integral in a Plane-wave Basis // *Phys. Rev. B* – 2011. – V.84. – P. 113102(1-4).
25. Sorouri A., Foulkes W.M.C., Hine N.D.M. Accurate and Efficient Method for the Treatment of Exchange in a Plane-wave Basis // *J. Chem. Phys.* – 2006. – V.124. – P. 064105(1-7).
26. Barnes T.A., Kurth T., CARRIER P., Wichmann N., Prendergast D., Kent P.R.C., Deslippe J. Improved Treatment of Exact Exchange in Quantum ESPRESSO // *Comput. Phys. Comm.* – 2017. – V.214. – P. 52-58.
27. Chawla S., Voth G.A. Exact Exchange in ab-initio Molecular Dynamics: An Efficient Plane-wave Based Algorithm // *J. Chem. Phys.* – 1998. – V.108(12). – P. 4697-4700.
28. Massidda S., Posternak M., Baldareshi A. Hartree-Fock LAPW Approach to the Electronic Properties of Periodic Systems // *Phys. Rev. B* – 1993. – V.48(8). – P. 5058-5068
29. Schlipf M., Betzinger M., Friedrich C., Ležaić M., Blügel S. HSE Hybrid Functional within the FLAPW Method and Its Application to

- GdN // Phys. Rev. B – 2011. – V.84. – P. 125142 (1-11).
30. Betzinger M., Friedrich C., Blügel S. Hybrid Functionals within the All-electron FLAPW Method: Implementation and Applications of PBE0 // Phys. Rev. B – 2010. – V.81. – P. 195117(1-13).
31. Redies M., Michalick G., Bouaziz J., Terboven C., Müller M.S., Blügel S., Wortmann D. Fast All-Electron Hybrid Functionals and Their Application to Rare-Earth Iron Garnets // Front. Matter. 2022. – V.9. – P. 851458(1-11).
32. Svane A. Hartree-Fock Band-Structure Calculations with the Linear Muffin-tin-orbital Method: Application to C, Si, Ge, and  $\alpha$ -Sn // Phys. Rev. B – 1987. – V.35(11). –P. 5496-5502.
33. Jansen R.W., Sankey O.F. Ab-initio Linear Combination of Pseudo-atomic-orbital Scheme for the Electronic Properties of Semiconductors: Results for Ten Materials // Phys. Rev. B – 1987. – V.36(12). –P. 6520-6531.
34. Jansen R.W., Sankey O.F. Theory of Relative Native- and Impurity-defect Abundances in Compound Semiconductors and the Factors That Influence Them // Phys. Rev. B – 1989. – V.39(5). –P. 3192-3206.
35. Gordienko A. B., Poplavnoi A.S. Calculation of the Electronic Structure of Crystals Using a Pseudoorbital Basis // Russian Physics Journal. – 1997. V. 40(1). –P. 47-50.
36. Gordienko A.B., Poplavnoi A.S. The Application of Ab-initio Linear Combination of Pseudo-Atomic-Orbital Scheme for the Electronic Structure of Lithium Azide  $\text{LiN}_3$  // Phys. stat. slo.(b) – 1997. –V.202(2). – P. 941-949.
37. Zunger A., Cohen M. L. Self-consistent Pseudopotential Calculation of the Bulk Properties of Mo and W // Phys. Rev. B – 1979. – V.19(2). – P. 568-582.
38. Louie S., Ho K.-M., Cohen M. L. Self-consistent Mixed-basis Approach to the Electronic Structure of Solids // Phys. Rev. B – 1979. – V.19(4). –P. 1774-1782.
39. Gygi F., Baldareshi A. Self-consistent Hartree-Fock and Screened-exchange Calculations in Solids: Application to Silicon // Phys. Rev. B. – 1986. –V.34. – P.4405-4408.
40. Carrier P., Rohra S., Görling A. General Treatment of the Singularities in Hartree-Fock and Exact-exchange Kohn-Sham Methods for Solids // Phys. Rev. B. – 2007. – V.75. – P. 205126 (1-10).
41. Gordienko A. B., Korobko K. V. Calculation of Singular Integrals over Brillouin Zone. // Izv. vusov, Fizika. – 2024. – V. 67.(3) –P.82-89. (in Russ.)
42. Hartwigsen C., Goedecker S., Hütter J. Relativistic Separable Sual-space Gaussian Pseudopotentials from H to Rn // J. Phys. Rev. B. – 1998. – V.58(7),– P. 3641-3662.
43. Chadi D. J., Cohen M. L. Special Points in the Brillouin Zone // Phys. Rev. B. – 1973. – V. 8. – P. 5747-5753.
44. Monkhorst H. J., Pack J. D. Special Points for Brillouin-zone Integrations // Phys. Rev. B. – 1976. – V. 13. – P. 5188–5192.

#### **Information about the authors**

*A. B. Gordienko - Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor of the Kemerovo State University.*

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.  
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 22.12.2025; одобрена после рецензирования 23.02.2026; принята к публикации 02.03.2026.

The article was received by the editorial board on 22 Dec. 2025; approved after reviewing 23 Feb. 2026; accepted for publication 02 Mar. 2026.