

Профессор Б.А. Голоденко, к.ф.-м.н. А.Б. Голоденко
(Воронеж. гос. ун-т. инж. технол.) кафедра информационных и управляющих систем,
тел. (473) 255-38-75

Квантово-химическое моделирование электронных свойств аморфной тетраэдрической структуры

На примере атомной ячейки аморфного кремния рассмотрены методика и результаты применения средств и методов квантовой химии для моделирования электронных свойств локальной атомной структуры твёрдого тела. Показано значение матрицы плотности состояний для практической оценки и расчёта электронных свойств полупроводника по результатам квантово-химического моделирования фрагмента его атомной структуры.

On an example of a nuclear cell of amorphous silicon the technique and results of application of means and methods of quantum chemistry for modelling electronic properties of local nuclear structure of a firm body are considered. Value of a matrix of density of conditions for a practical estimation and calculation of electronic properties of the semiconductor by results of quantum-chemical modelling a fragment of its nuclear structure is shown.

Ключевые слова: квантовая химия, энергетическое состояние, аморфная структура, матрица плотности.

Уникальное сочетание физических свойств аморфных полупроводников относит их к перспективным материалам электронной техники и открывает им пути разнообразного применения. При этом в отличие от затратных технологий выращивания химически чистых полупроводниковых монокристаллов, слабая чувствительность аморфных материалов к примесям позволяет производить их наиболее простыми и экономичными методами, в том числе в виде тонких плёнок обширных площадей на гибких подложках из доступного материала. Среди таких перспективных полупроводников своими эксплуатационно-технологическими возможностями особо выделяется аморфный кремний $a\text{-Si}$ и его сплавы, в частности $a\text{-SiC:H}$.

Однако промышленному освоению подобных материалов препятствует целый ряд взаимосвязанных научных проблем, ключевой из которых по-прежнему остаётся целенаправленное управление типом и концентрацией носителей заряда в полупроводнике [1], исходное множество которых создаётся в процессе синтеза его вещества. К примеру, аморфный сплав $a\text{-SiC:H}$ получают из газовой смеси метана CH_4 и силана SiH_4 плазмохимическим осаждением на ту или иную подложку с одновременным гидрированием растущего материала.

При этом атомная структура конечного вещества, а значит его электропроводность, существенно зависит от пропорций компонентов исходной газовой смеси [2].

Вполне очевидно, что эффективное управление типом и концентрацией носителей заряда в полупроводнике требует отчётливого понимания механизмов квантовых взаимодействий в его атомной структуре и механизмов межатомных и межмолекулярных взаимодействий в процессе его синтеза. Исчерпывающее описание таких механизмов даёт уравнение Шрёдингера и его релятивистский вариант – уравнение Дирака, которые допускают только приближённые решения в рамках зонной теории для твёрдых тел и в рамках молекулярной механики или метода молекулярных орбиталей для химических объектов и процессов. Если при этом математическое описание распределения атомов в кристалле или молекуле особых затруднений не вызывает, то аналогичная задача для аморфного твёрдого тела традиционно воспринимается как практически неразрешимая научная проблема.

Однако интерпретация аморфной структуры в виде строго закономерного фрактала позволила отыскать эту закономерность в системе итерированных функций, построить предопределённую модель атомной решётки аморфного кремния, подтвердить её адекватность [3, 4, 5] и получить новые возможности

теоретического моделирования протекающих в нём электронных процессов. Тем не менее, обрётённые возможности моделирования аморфных структур не устраняют необходимость решения уравнения Шрёдингера, а отсутствие периодического потенциала усложняет эту задачу, исключая применение теоремы Блоха и зонной теории. К тому же построенная аморфная структура виртуальна и потому недоступна для экспериментального исследования традиционными техническими средствами. Отсюда возникает проблема практического применения фрактальной модели аморфной атомной структуры.

Поскольку предпосылки эффективного управления типом и концентрацией носителей заряда в полупроводнике создаются в процессе химического синтеза его материала, обращает на себя внимание методология квантовой химии. Аппарат квантовой химии ориентирован на изучение механизмов и энергетики процессов образования и превращений вещества и химических соединений [6], располагает отработанными методами решения уравнения Шрёдингера для молекулярных систем, в том

числе лишённых периодического потенциала, и оснащён достаточно мощными программными средствами квантово-химических расчётов, в частности пакетом МОРАС. Отсюда возникает желание применить такой пакет для экспериментального исследования свойств аморфного кремния на фрактальной модели его атомной структуры и формулируется цель выполняемого моделирования – средствами квантово-химического пакета МОРАС выполнить расчёт электронных свойств элементарной ячейки аморфной структуры, рассматривая её как молекулу.

Для выполнения расчёта квантовой системы пакет МОРАС требует описания относительной координации атомов этой системы через её межатомные связи, валентные и диэдрические углы. В нашем случае моделируется тетраэдрическая атомная ячейка аморфного кремния (рисунок 1), образованная пятью атомами. В формате МОРАС такая структура описывается так называемой внутренней системой координат и называется z-матрицей (таблица 1).

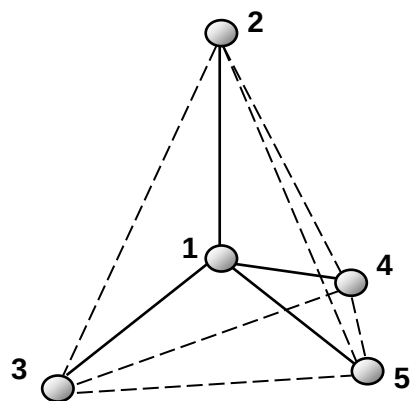


Рисунок 1 - Элементарная тетраэдрическая атомная ячейка

Таблица 1
Внутренняя система координат тетраэдрической атомной ячейки

		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
1	Si	0.00	0	000.0	0	000.0	0	0	0	0	0
2	Si	2.47	0	000.0	0	000.0	0	1	0	0	0
3	Si	3.35	0	104.5	0	000.0	0	1	2	0	0
4	Si	2.75	0	109.1	0	110.0	0	1	2	3	0
5	Si	3.85	0	110.4	0	140.0	0	1	2	4	0
6	0										

Первый столбец таблицы 1 внутренних координат моделируемой ячейки содержит химические обозначения образующих её атомов. Центральный – *первый* атом ячейки рисунка 1 целесообразно поместить в начало координат, а остальные атомы естественным образом скоординировать от него через длины межатомных связей, выраженных в ангстремах, валентные и диэдрические углы, выраженные в градусах. В таблице 1 длины межатомных связей даны в колонке 2, валентные углы – в колонке 4, диэдрические углы – в колонке 6. Привязка длин и углов к опорным атомам содержится в колонках 8-10 таблицы 1.

Численные значения внутренних координат получены в результате фрактального моделирования аморфной структуры по авторской методике, изложенной в [3, 4]. Поскольку оптимизация геометрии моделируемой ячейки не планируется, колонки 3, 5 и 7 заполнены нулями.

В среде МОРАС квантово-химические расчёты выполняются полуэмпирическими методами MINDO/3, MNDO, AM1 или PM3. Подробные характеристики этих методов содержат многие литературные источники, например [6, 7, 8]. Откуда следует, что перечисленные методы упрощают решение уравнения Шрёдингера для атомов и молекул, про-

водя расчёты только для валентных электронов с применением стандартных базисных функций и ряда параметров, полученных в эксперименте. При этом методы MINDO/3, MNDO и AM1 последовательно развивают друг друга, а метод PM3 является специализированной версией AM1. В связи с этим запланированные расчёты выполнены методом AM1

в приближении самосогласованного поля (SCF) и при условии общего нулевого заряда моделируемой атомной ячейки.

В соответствии с данными таблицы 1 система МОРАС визуализирует моделируемую атомную структуру (рисунок 2) и производит расчёт её межатомных расстояний (таблица 2).

Таблица 2

Межатомные расстояния

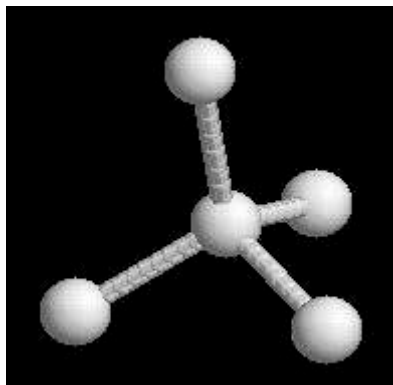


Рисунок 2 - Визуализация моделируемой атомной структуры

INTERATOMIC DISTANCES					
	Si1	Si2	Si3	Si4	Si5
Si 1	.000000				
Si 2	2.470000	.000000			
Si 3	2.350000	3.811832	.000000		
Si 4	2.750000	4.255427	4.008774	.000000	
Si 5	2.850000	4.373894	4.078382	4.952998	.000000

Среди остальных результатов с позиций выполняемого исследования наибольший интерес представляют собственные значения (уровни) энергии и коэффициенты молекулярных орбиталей МО (таблица 3), вычисленные атомные

заряды и дипольные моменты (таблица 4) и, что особенно ценно, матрица плотности состояний моделируемой атомной структуры (таблица 5). Вывод результатов система завершает краткой сводкой обобщённых сведений (таблица 6).

Таблица 3

Фрагмент массива собственных значений (уровней) энергии и коэффициентов молекулярных орбиталей

ROOT NO.	EIGENVECTORS					
	1	2	3	4	5	6
	-12.09927	-11.03140	-10.27681	-9.56523	-8.47907	-8.20236
S Si 1	-.53397	.06196	.09174	-.34199	.25745	.02898
PX Si 1	-.11455	.61444	-.06549	.22330	.16165	-.40953
PY Si 1	-.42771	-.25231	-.14455	.35676	.13299	.22838
PZ Si 1	.02891	.00561	-.66067	-.22728	-.04354	-.04198
S Si 2	-.30019	.60895	-.01290	.01102	-.51539	.42085
PX Si 2	.20256	-.16647	-.02331	.11083	-.40526	.40493
PY Si 2	-.07346	-.05236	-.03000	.10068	-.04120	.11672
PZ Si 2	.00539	-.00004	-.10851	-.04394	-.00179	-.01692
S Si 3	-.51899	-.35186	-.08825	.21318	-.44662	-.44485
PX Si 3	-.11896	.08500	-.02622	.05795	.11881	.00972
PY Si 3	.26973	.09085	-.02472	.16243	-.34236	-.41890
PZ Si 3	.00643	.00494	-.16001	-.06127	-.00614	-.00788
S Si 4	-.07638	-.05907	.60880	-.34922	-.25714	-.15701
PX Si 4	-.03111	.05346	.07758	-.01948	.06411	-.02367
PY Si 4	-.07570	-.04516	.04842	.03587	.01878	.05584
PZ Si 4	-.06734	-.01222	.12536	-.09712	.10804	.08028
S Si 5	-.04049	-.04692	-.28331	-.62948	-.19679	-.10070
PX Si 5	-.02156	.04344	-.04557	-.06188	.04053	-.03430
PY Si 5	-.05956	-.03933	-.05185	-.00489	.00261	.04106
PZ Si 5	.04902	.01290	.04573	.13293	-.05459	-.03497

Атомные заряды и дипольные моменты квантовой системы

NET ATOMIC CHARGES AND DIPOLE CONTRIBUTIONS				
ATOM NO	TYPE	CHARGE	ATOM ELECTRON DENSITY	
1	Si	-1.3752	5.3752	
2	Si	.4245	3.5755	
3	Si	.4531	3.5469	
4	Si	.2852	3.7148	
5	Si	.2124	3.7876	
DIPOLE	X	Y	Z	TOTAL
POINT-CHG	1.509	2.802	-.784	3.277
HYBRID	-.633	-1.850	.220	1.967
SUM	.876	.952	-.564	1.412

Т а б л и ц а 5

Матрица плотности состояний квантовой системы
(фрагмент выходного массива)

DENSITY MATRIX IS						
0		S Si1	PX Si1	PY Si1	PZ Si1	S Si2
S Si	1	1.090822				
PX Si	1	-.042925	1.423806			
PY Si	1	.007390	.066928	1.349266		
PZ Si	1	.009724	-.021267	-.015680	1.511320	
S Si	2	.194798	.262442	-.073913	.013455	1.833488
PX Si	2	-.511750	-.654661	.089533	-.019123	.426328
PY Si	2	-.101249	-.050079	.362596	-.034092	.024659
PZ Si	2	.013272	-.001625	-.015630	.292500	-.008206
S Si	3	.206917	-.108567	.262518	.011428	.022449
PX Si	3	.083741	.245554	.273112	-.007407	-.009384
PY Si	3	-.541017	.295912	-.539160	-.022071	-.037389
PZ Si	3	.011763	-.014257	-.008104	.370244	-.002209
S Si	4	.122154	-.071676	-.114123	-.147239	.006335
PX Si	4	.151593	.023582	-.144305	-.240985	-.002596
PY Si	4	.048841	-.014544	.164330	-.141275	.056456
PZ Si	4	.391280	-.285540	-.324869	-.421083	.032621
S Si	5	.097460	-.054928	-.095770	.126219	.002297
PX Si	5	.150541	-.002023	-.147760	.237633	-.002838
PY Si	5	.035885	-.026394	.147056	.095329	.055333
PZ Si	5	-.331659	.250280	.273397	-.392721	-.032142

Т а б л и ц а 6

Краткая сводка основных результатов вычислений

FINAL HEAT OF FORMATION	=	60.16607	KCAL
TOTAL ENERGY	=	-398.55513	EV
ELECTRONIC ENERGY	=	-1020.28155	EV
CORE-CORE REPULSION	=	621.72642	EV
IONIZATION POTENTIAL	=	5.56659	
NO. OF FILLED LEVELS	=	10	
MOLECULAR WEIGHT	=	140.428	
COMPUTATION TIME	=	0 h 0 min 1 sec	

Таблица 2 показывает отсутствие недопустимо малых величин межатомных расстояний заданной атомной структуры (рисунок 1), что свидетельствует о корректности её исходного описания (таблица 1). Таблица 3 в терминологии MOPAC содержит результаты расчёта молекулярных орбиталей (МО) заданной атомной структуры. Однако, выполняя расчёт элементарной атомной ячейки твёрдого вещества, которая условно рассматривается как молекула, понятие молекулярной орбитали столь же условно уместно заменить понятием орбитали атомной структуры (ОАС) и по-прежнему интерпретировать её как решение уравнения Шрёдингера в тех или иных приближениях. В такой терминологии каждый столбец таблицы 3 соответствует отдельной ОАС.

Программа MOPAC рассчитала квантовую систему в приближениях SCF и ограниченного метода Хартри-Фока (RHF) с десятью дважды занятыми электронами орбиталями, о чём и выдала сообщение «**RHF CALCULATION, NO.OF DOUBLY OCCUPIED LEVELS = 10**» и «**SCF CALCULATIONS = 2**». Поэтому таких столбцов в выходном файле всего двадцать, и шесть первых из них показаны в таблице 3. Все ОАС в таблице 3 расположены в порядке увеличения их собственной энергии в эВ или, что равносильно, в порядке увеличения их энергетических уровней. Вычисление ОАС в пакете MOPAC выполнено методом ЛКАО, то есть линейной комбинацией атомных орбиталей (АО), которая в квантовой химии выражается соотношением:

$$\psi_i = \sum_{\mu=1}^n c_{\mu i} \cdot \varphi_{\mu}, \quad (1)$$

где ψ_i – искомая ОАС (волновая функция),

$\sum_{\mu=1}^n c_{\mu i} \cdot \varphi_{\mu}$ – линейная комбинация из n ап-

проксимирующих АО φ_{μ} и $c_{\mu i}$ – весовой коэффициент.

Тогда первое число в каждом столбце таблицы 3 показывает значение собственной энергии соответствующей ОАС в эВ, а последующие числа того же столбца дают значения весовых коэффициентов отдельных аппроксимирующих её АО. В частности, из таблицы 3 следует, что энергия первой орбитали атомной структуры рисунка 1 заданной своими внутренними координатами (таблица 1) составляет -12,09927 эВ, а безразмерные коэф-

фициенты аппроксимирующей её АО первого атома кремния равны -0,53397 (1s), -0,11455 (p_x), -0,42771 (p_y) и 0,02891 (p_z). Аналогичные показатели второй ОАС принимают значения, соответственно, -11,03140 эВ, 0,06196 (1s), 0,61444 (p_x), -0,25231 (p_y) и 0,00561 (p_z). Таким образом, таблица 3 даёт исчерпывающую информацию о структуре ОАС и вкладе каждого атома в каждую орбиталь моделируемой атомной ячейки. При этом произведение комплексно сопряжённых коэффициентов $c_{\mu i} \cdot c_{\mu i}^*$ определяет вероятность обнаружения электрона на орбитали, а распределение орбиталей по интервалам энергии валентных электронов позволяет вычислить плотность их энергетических состояний – важнейшую характеристику квантовой системы с широким применением в практических расчётах полупроводниковых приборов.

Моделированию электронных свойств отдельной атомной ячейки твёрдого тела, в частности аморфного кремния, средствами квантовой химии несколько не мешает предположение о нейтральном заряде этой ячейки. Такое предположение логически выделяет элементарную ячейку из общей атомной структуры твёрдого тела, где она нейтральна, и позволяет применить к ней методологию квантовой химии. Данные таблицы 4 подтверждают нейтральность заряда моделируемой структуры и сообщают её дипольный момент, вычисленный как векторная сумма вкладов всех точечных зарядов атомной ячейки. Такие данные полезны для инженерных расчётов твёрдотельных полупроводниковых приборов и могут быть использованы при разработке технологий изготовления полупроводниковых материалов.

Особый интерес вызывает матрица плотности электронных состояний моделируемой квантовой системы, фрагмент которой содержит таблица 5. Такая матрица исчерпывающе описывает так называемое смешанное состояние квантовой системы – в данном случае элементарной ячейки аморфного кремния (рисунок 1, 2), как статистический ансамбль сразу нескольких квантовых состояний системы. В квантовой механике [9] подобная матрица плотности служит аналогом вероятностно-фазового пространства распределения координат и импульсов частицы в статистической физике (рисунок 3). Смешанное состояние допускает, что квантовая система с вероятностью p_1 может находиться в состоянии $|\psi_1\rangle$, с вероятностью p_2 в состоянии $|\psi_2\rangle$, с вероятностью p_3 в состоянии $|\psi_3\rangle$ и так далее, что и иллюстрирует рисунок 3.

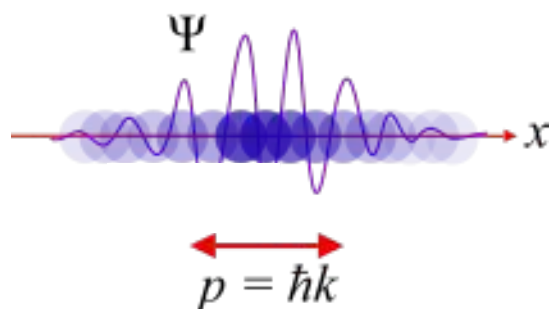


Рисунок 3 - Графическая интерпретация понятия плотности электронных состояний

Для такой системы матрица плотности определяется как оператор:

$$\hat{\rho} = \sum_i p_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| \quad (2)$$

Тогда содержимое матрицы таблицы 5 составляют возможные электронные состояния $|\psi_i\rangle$ и соотнесённые с ними численные значения вероятностей p_i обнаружения в этих состояниях электронов квантовой системы рисунка 1.

Практическое значение полученной матрицы (таблица 5) на этом не исчерпывается, а простирается гораздо дальше и повод к такому выводу даёт формальная конструкция $|\psi_i\rangle\langle\psi_i|$. Дело в том, что для выполнения запланированного моделирования элементарная атомная ячейка твёрдого тела рассмотрена как изолированная молекула. Однако любое твёрдое тело составляет великое множество подобных ячеек и его свойства создаются всей их структурированной совокупностью в диалектическом отрицании собственных свойств. Поэтому прямой перенос на твёрдое тело результатов количественного расчёта его элементарной атомной ячейки и даже их ансамбля, полученных теми или иными методами, неправилен. Твёрдое тело можно представить как некую большую молекулу. Принципиальных запретов на это нет [10], но размерность такой молекулы порождает непреодолимые технические трудности в её описании и моделировании современными средствами, в том числе квантовой химии. Возникает острое принципиальное противоречие между возможностью и выполнимостью подобного моделирования.

Теперь самое время вновь обратить внимание на конструкцию $|\psi_i\rangle\langle\psi_i|$, обычно называемую проектором. Символ ψ_i в ней означает i -ю волновую функцию или орбиталь. В нашем случае это орбиталь атомной структуры (ОАС) – аналог молекулярной ор-

битали (МО) в квантовой химии. Все орбитали моделируемой структуры рисунка 1 вычислены и представлены столбцами матрицы в таблице 3. Если те же орбитали представить не столбцами, а одноимёнными строками ψ_i , то появляется возможность выполнить матричное умножение $|\psi_i\rangle\langle\psi_i|$ состояний квантовой системы и в итоге получить матрицу плотности, несущую всю информацию о квантовой системе [9]. Для элементарной ячейки аморфного кремния такая матрица реально получена (таблица 5), а поскольку атомами 2, 3, 4 и 5 моделируемая ячейка связана и взаимодействует с атомной структурой, в которую она интегрирована как часть, то через эти взаимодействия на неё проецируются свойства системы в целом. Подобные проекции системных свойств чётко отражаются в матрицах плотности любой части всякой системы, в том числе в матрице плотности любой элементарной атомной ячейки. Таким образом, отпадает необходимость моделирования всей системы целиком, так как все её свойства принципиально выводятся из матрицы плотности любой её части. Технология такого анализа выходит за рамки настоящего исследования и здесь не рассматривается.

Краткая сводка обобщённых сведений о результатах моделирования (таблица 6) включает конечную теплоту образования атомной структуры равную 60,16607 Ккал, общую энергию структуры -398,55513 эВ, суммарную энергию всех её электронов -1020,28155 эВ, энергию межъядерного отталкивания величиной 621,72642 эВ и вычисленный потенциал ионизации 5,56659.

Результаты выполненного моделирования подтверждают возможность и целесообразность применения средств и методов квантовой химии к расчёту электронных свойств локальных атомных структур твёрдого тела. Такую возможность обеспечивает единая методология и математический аппарат квантовой химии и физики твёрдого тела, направленные на изучение межатомных взаимодействий и электронных процессов атомных структур путём решения стационарного уравнения Шрёдингера в одних и тех же приближениях. Квантовая химия, однако, ограничивается моделированием и расчётом отдельных молекул, что в сравнении с атомной структурой твёрдого тела существенно снижает размерность задачи, упрощает и позволяет автоматизировать её решение, не снижая качества получаемых результатов. При этом отсутствие принципи-

ального отличия локальной атомной структуры твёрдого тела от молекулы даёт возможность эффективного применения средств и методов квантовой химии к её моделированию и расчёту, а получаемая при этом матрица плотности состояний несёт полную информацию о свойствах всего твёрдого тела.

ЛИТЕРАТУРА

- 1 Хамакава, Й. Аморфные полупроводники и приборы на их основе [Текст] / Й. Хамакава. – М.: Металлургия, 1986. – 376 с.
- 2 Терехов, В.В. Исследование локальной электронной и атомной структуры в аморфных сплавах $a\text{-Si}_x\text{C}_{1-x}$ методом ультрамягкой рентгеновской спектроскопии [Текст] / В.В. Терехов, Е.И. Теруков, И.Н. Трапезникова и др. // Физика и техника полупроводников. – 2005. – № 7 (39). – С. 863-867.
- 3 Голоденко, А. Б. Фрактальное моделирование атомной структуры аморфного кремния на основе систем итерированных функций [Текст] / А.Б. Голоденко // Инженерная физика. – 2009. – № 8. – С. 27-30.
- 4 Голоденко, А.Б. Фрактальное моделирование механизма порождения аморфности тетраэдрической атомной структуры [Текст] / А.Б. Голоденко, Б.А. Голоденко // Нано- и микросистемная техника. – 2012. – № 11. – С. 23-27.
- 5 Голоденко, А.Б. Оценка адекватности фрактальной модели атомной структуры аморфного кремния [Текст] / А.Б. Голоденко // Физика и техника полупроводников. – 2010. – № 1 (44). – С. 87-91.
- 6 Барановский, В. И. Квантовая механика и квантовая химия [Текст]: учебное пособие / В.И.Барановский. – М.: Издательский центр «Академия», 2008. – 384 с.
- 7 Блатов, В.А. Полуэмпирические расчётные методы квантовой химии [Текст]: учебное пособие / В.А. Блатов, А.П. Шевченко, Е.В. Пересыпкина. – Самара: Изд-во «Универс-групп», 2005. – 32 с.
- 8 Ермаков, А.И. Квантовая механика и квантовая химия [Текст]: учебное пособие / А.И.Ермаков. – М.: ИД Юрайт, 2010. – 555 с.

9 Блум, К. Теория матрицы плотности и её приложения [Текст] / К. Блум. – М.: Мир, 1983. – 248 с.

10 Минкин, В.И. Теория строения молекул [Текст] / В.И. Минкин, Б.Я. Симкин, Р.М. Миняев. – Ростов-на-Дону: «Феникс», 1997 – 560 с.

REFERENCES

- 1 Hamakava , J. Amorphous semiconductors and devices based on them [Text] / J. Hamakava . – M.: Metallurgiya , 1986 . - 376 p .
- 2 Terekhov , V.V. Investigation of the local electronic and atomic structure in amorphous $a\text{-Si}_x\text{C}_{1-x}$ by ultrasoft X-ray spectroscopy [Text] / V.V. Terekhov, E.I. Terukov, I.N. Trapeznikova et al // Semiconductors. - 2005 . - № 7 (39). - P. 863-867 .
- 3 Golodenko , A.B. Fractal modeling of the atomic structure of amorphous silicon -based iterated function systems [Text] / A. B. Golodenko // Engineering physics. - 2009 . - № 8. - P. 27-30 .
- 4 Golodenko , A.B. Fractal modeling of the mechanism of generation of tetrahedral amorphous atomic structure [Text] / A.B. Golodenko, B.A. Golodenko // Nano- and microsystems. - 2012 . - № 11.-P. 23-27 .
- 5 Golodenko, A.B. Evaluate the adequacy of the fractal model of the atomic structure of amorphous silicon [Text] / A.B. Golodenko // Semiconductors . - 2010 . - № 1 (44). - P. 87-91 .
- 6 Baranovsky, V.I. Quantum mechanics and quantum chemistry [Text]: a textbook / V.I. Baranovsky. - M: Publishing Center "Academiya", 2008. - 384 p .
- 7 Blatov, V.A. Semi-empirical methods for the even distribution of quantum chemistry [Text]: a textbook / V. A. Blatov, A.P. Shevchenko, E.V. Peresyapkina . – Samara: Publishing House "Univers-group", 2005. - 32 p.
- 8 Ermakov, A.I. Quantum mechanics and quantum chemistry [Text]: a textbook / A.I. Ermakov. – M.: PH Yurayt, 2010. - 555 p.
- 9 Blum, K. Density matrix theory and its applications [Text] / K. Bloom. – M.: Mir, 1983. -248 p.
- 10 Minkin, V.I. The theory of the structure of molecules [Text] / V.I. Minkin, B.J. Simkin, R.M. Minyaev. - Rostov- on-Don: " Phoenix", 1997 - 560 p.