

04,10,12

## Построение 2D-картин рентгеновской дифракции от модельных кристаллов-вискеров арсенида галлия

© М.Д. Шарков, Н.Д. Прасолов, А.А. Левин, П.Н. Брунков

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,  
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: mischar@mail.ru

Поступила в Редакцию 4 октября 2022 г.

В окончательной редакции 4 октября 2022 г.

Принята к публикации 11 октября 2022 г.

Смоделирована серия кристаллитов-вискеров GaAs в форме шестиугольных призм с осью, параллельной кристаллографическому направлению [111], и структур, составленных из описанных призм. Для модельных образцов GaAs вычислены картины рентгеновской дифракции. На основе анализа модельной картины рентгеновской дифракции построена аппроксимационная структура из фрагментов призм от массива атомов, полученного путем применения к исходному призматическому модельному кристаллиту GaAs методик молекулярной динамики.

**Ключевые слова:** вискеры, моделирование рентгеновской дифракции, полупроводники  $A^{III}B^V$ , арсенид галлия.

DOI: 10.21883/FTT.2023.01.53930.493

### 1. Введение

Наноразмерные объекты (кластеры, домены, кристаллиты) могут проявлять иные физико-химические свойства, чем те же материалы в макроскопическом объеме. В частности, кристаллиты могут существенно отличаться от объемного материала уже на уровне атомной структуры, что может быть отражено, к примеру, на картинах рентгеновской дифракции. Отсюда следует важность задач, связанных с непосредственным расчетом дифракционных картин от наноструктур, в т. ч. кристаллитов. Из сравнения модельной картины рентгеновской дифрактометрии (РД) с экспериментальными данными могут быть сделаны выводы о структурных особенностях кристаллитов в исследуемом образце.

Арсенид галлия GaAs является прямозонным полупроводником с шириной запрещенной зоны 1.4 eV и обладает кубической решеткой со структурой сфалерита (пространственная группа  $F\bar{4}3m$  (216)) и параметром решетки 5.653 Å [1] (карта 01-089-2706 в порошковой базе дифракционных данных PDF-2 [2]). Широко распространены полупроводниковые гетероструктуры на основе GaAs и других элементов 3 и 5 групп таблицы Менделеева [3]. Активно исследуются структуры, основанные на применении GaAs совместно с элементами других групп [4,5]. Арсенид галлия может быть получен как в форме тонких пленок, так и в объемном виде [6], благодаря чему возможны исследования и практическая эксплуатация различных кристаллографических поверхностей GaAs, в т. ч. наиболее плотноупакованной плоскости (111). Отдельный интерес представляют нитевидные кристаллы (вискеры) GaAs [7,8], которые в силу своей квазиодномерной (квази-1D) геометрии по свойствам

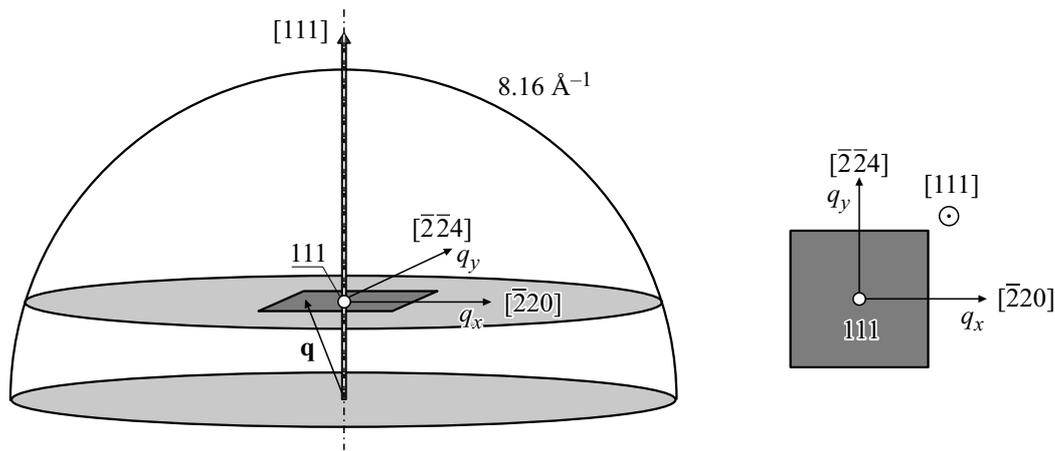
существенно отличаются как от объемного материала, так и от тонких пленок/слоев.

Вычисление структурного фактора рассеяния рентгеновских лучей материалами лежит в основе таких способов анализа дифрактограмм, как методики Ритвелда [9,10], Поли (Pawley's technique) [11] и Ле-Бая (Le Bail's technique) [12]. В перечисленных методиках моделирования картин РД рассматриваются только характеристики элементарных ячеек кристаллических компонент объекта, от которого строится модель РД [13,14]. Однако существуют и такие работы, в которых непосредственно рассчитываются кривые РД от модельных структур, состоящих из сотен [15] и тысяч [16,17] атомов, а в работе [18] строятся дифрактограммы от модельного кристаллита примерно из 400 тысяч атомов Pd.

В данной работе проводится моделирование и последующий анализ двумерных (2D) картин РД от модельных вискерев GaAs, содержащих около миллиона атомов. При этом интенсивность РД вычисляется через суммарный структурный фактор рассеяния рентгеновского излучения по всему заданному массиву атомов вискера.

### 2. Методики

Моделирование кристаллита GaAs осуществлялось методами молекулярной динамики с применением пакета под названием Large-Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) [19,20]. В программе LAMMPS кристаллическая решетка строится на основе элементарной ячейки, информация о которой может быть как взята из готового шаблона, так и введена вручную. В процессе моделирования в качестве дополнительного фактора, способного повлиять на реальное



**Рис. 1.** Область построения модельных дифракционных картин. На рисунке отмечены: узел обратной решетки 111 (светлый кружок); граница области регистрации данных РД для  $\text{Cu } K_{\alpha 1}$ -излучения (большой полукруг); плоскости (111) (светло-серые эллипсы); направления  $[\bar{1}10]$  и  $[\bar{1}\bar{1}2]$ , которым соответствуют компоненты волнового вектора  $q_x$  и  $q_y$ . Более темным тоном выделен диапазон волнового вектора рассеяния  $\mathbf{q}$ , отвечающий области построения дифрактограмм.

расположение атомов в кристаллите, учитывается температура.

Расчет данных РД проводился с помощью стандартных процедур [21–24]. Применялся метод моделирования, основанный на описании интенсивности рассеяния рентгеновского излучения веществом через атомные и структурные факторы [21,22]:

$$I \propto \Phi(\theta)A(\theta)D(\theta) \left| \sum_j f_j(q) \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_j) \right|^2. \quad (1)$$

Здесь  $2\theta$  — угол дифракции рентгеновских лучей;  $\Phi(\theta) = (1 + \cos^2 2\theta)/(\sin^2 \theta \cos \theta)$  — коэффициент, получаемый при теоретическом рассмотрении задачи о рассеянии рентгеновских фотонов [23] и называемый фактором Лоренц-поляризации рентгеновского излучения;  $A(\theta) = \exp(-2\mu t / \sin \theta)$  — величина, характеризующая ослабление интенсивности пучка при его проникновении внутрь образца на глубину  $t$  (с учетом выхода отраженных фотонов) в соответствии с законом Бугера–Ламберта–Бера [22,25];  $\mu$  — коэффициент поглощения материала;  $D(\theta)$  — фактор Дебая–Валлера, обусловленный тепловыми колебаниями атомов модельного материала;  $f_j(q)$  — амплитуда рассеяния рентгеновских фотонов  $j$ -м атомом при волновом векторе рассеяния  $\mathbf{q}$  (который составляет по модулю  $4\pi \sin \theta / \lambda$ ). В первом приближении предполагается, что величина  $A(\theta)D(\theta)$  близка к единице и не оказывает существенного влияния на дифракционную картину.

Атомные факторы рассеяния рассчитаны на основе модели, описанной в литературе [24]:

$$f_j(q) = \sum_k a_k \exp(-c_k q^2) + \text{const}, \quad (2)$$

причем наборы параметров модели ( $a_k$ ,  $c_k$  и const), индивидуальные для каждого атома и/или иона, приведены

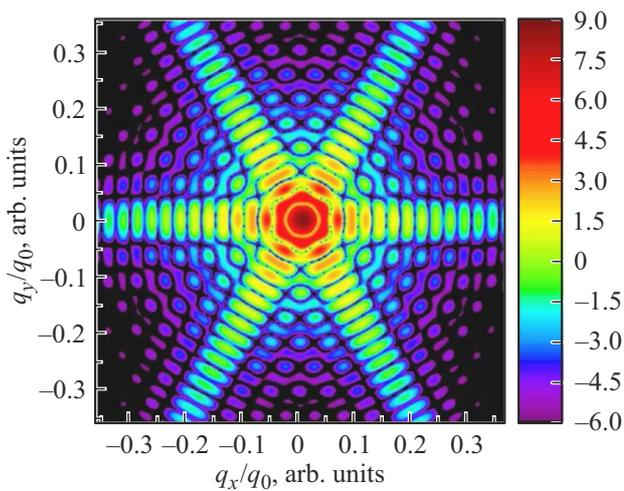
в том же справочнике [24]. Вектора рассеяния, при которых данная модель перестает соответствовать экспериментальным данным, отвечают величинам  $q$  (по модулю) больше или порядка  $25 \text{ \AA}^{-1}$  (которые могут экспериментально наблюдаться на дифрактограммах лишь при излучениях с энергией пучка 25 keV и выше).

### 3. Результаты

Был смоделирован кристаллит-вискер GaAs в форме шестиугольной призмы правильного сечения с диаметром (двойной длиной ребра) шестиугольного основания 15 и высотой 150 nm. Ось призмы отвечает кристаллографическому направлению [111], грани параллельны плоскостям  $(01\bar{1})$ ,  $(\bar{1}01)$  и  $(1\bar{1}0)$ . Ребра основания призмы при этом ориентированы в направлениях  $[\bar{1}\bar{1}2]$ ,  $[\bar{1}2\bar{1}]$ ,  $[2\bar{1}\bar{1}]$ . Модельный кристаллит содержит около  $9.71 \cdot 10^5$  атомов и обладает  $C_{3v}$  симметрией. При моделировании предполагалось, что изначально кристаллит расположен в вакууме и не содержит ни точечных, ни размерных дефектов, а его поверхность не подвержена реконструкции.

Помимо исходного состояния кристаллита, был смоделирован его вид в пространстве через промежутки времени до 32 ps с шагом 20 fs (начиная с исходного состояния) на основе методов молекулярной динамики с применением программы LAMMPS. При моделировании предполагалось, что температура кристаллита постоянна и составляет 300 K.

Для всех смоделированных кристаллитов GaAs было проведено вычисление данных РД в соответствии с методикой, описанной выше. Модели дифракционных картин построены для излучения с энергией фотонов, соответствующей  $\text{Cu } K_{\alpha 1}$ -излучению (длина волны 1.5406 Å). Область данных, в которой построены ди-



**Рис. 2.** Вычисленная 2D-картина РД от рассматриваемого в настоящей работе модельного кристаллита GaAs в виде шестиугольной призмы с высотой 150 nm и длиной ребра основания 7.5 nm в исходном состоянии (Cu  $K_{\alpha 1}$ -излучение). Величина  $q_0 = 1.925 \text{ \AA}^{-1}$  отвечает длине волнового вектора узла 111 обратной решетки GaAs.

фракционные картины, представляет собой плоскость, параллельную кристаллографической плоскости (111) в решетке GaAs и проходящую через узел обратной решетки GaAs 111 (см. рис. 1). Во всех случаях рассматривались плоскость (111) и узел 111 для решетки GaAs в исходном состоянии кристаллита. Здесь и далее  $q_0$  обозначает величину волнового вектора, которая соответствует модулю вектора рассеяния узла 111 для GaAs (примерно  $1.925 \text{ \AA}^{-1}$ ).

На рис. 2 приведена модель картины рассеяния, полученная от кристаллита GaAs, построенного как регулярный набор атомов и представляющего собой начальную структуру, к которой далее с помощью пакета LAMMPS применялись методы молекулярной динамики. На рис. 3, *a* — то же самое для того же кристаллита при времени моделирования молекулярной динамики 8 ps, на рис. 3, *b, c, d* — через 16, 24 и 32 ps соответственно. Направления  $q_x$  и  $q_y$  на всех картинах-моделях отвечают кристаллографическим направлениям  $[\bar{1}10]$  и  $[\bar{1}\bar{1}2]$  соответственно (для решетки кристаллита в исходном состоянии).

Общий вид картины РД в окрестности узла обратной решетки 111 в начальный момент времени связан с симметрией решетки (пространственная группа  $F\bar{4}3m$  (216)) и с формой кристаллита. Конфигурацией вискера определяются направления, в которых расположены наиболее интенсивные пики-сателлиты. В данном случае — для шестиугольной призмы с осью  $[111]$  и боковыми гранями вдоль плоскостей  $(01\bar{1})$ ,  $(\bar{1}01)$  и  $(1\bar{1}0)$  — наиболее интенсивные пики-сателлиты вокруг узла обратной решетки 111 наблюдаются в направлениях  $[01\bar{1}]$ ,  $[\bar{1}01]$  и  $[\bar{1}\bar{1}0]$ , перпендикулярных плоскостям боковых граней.

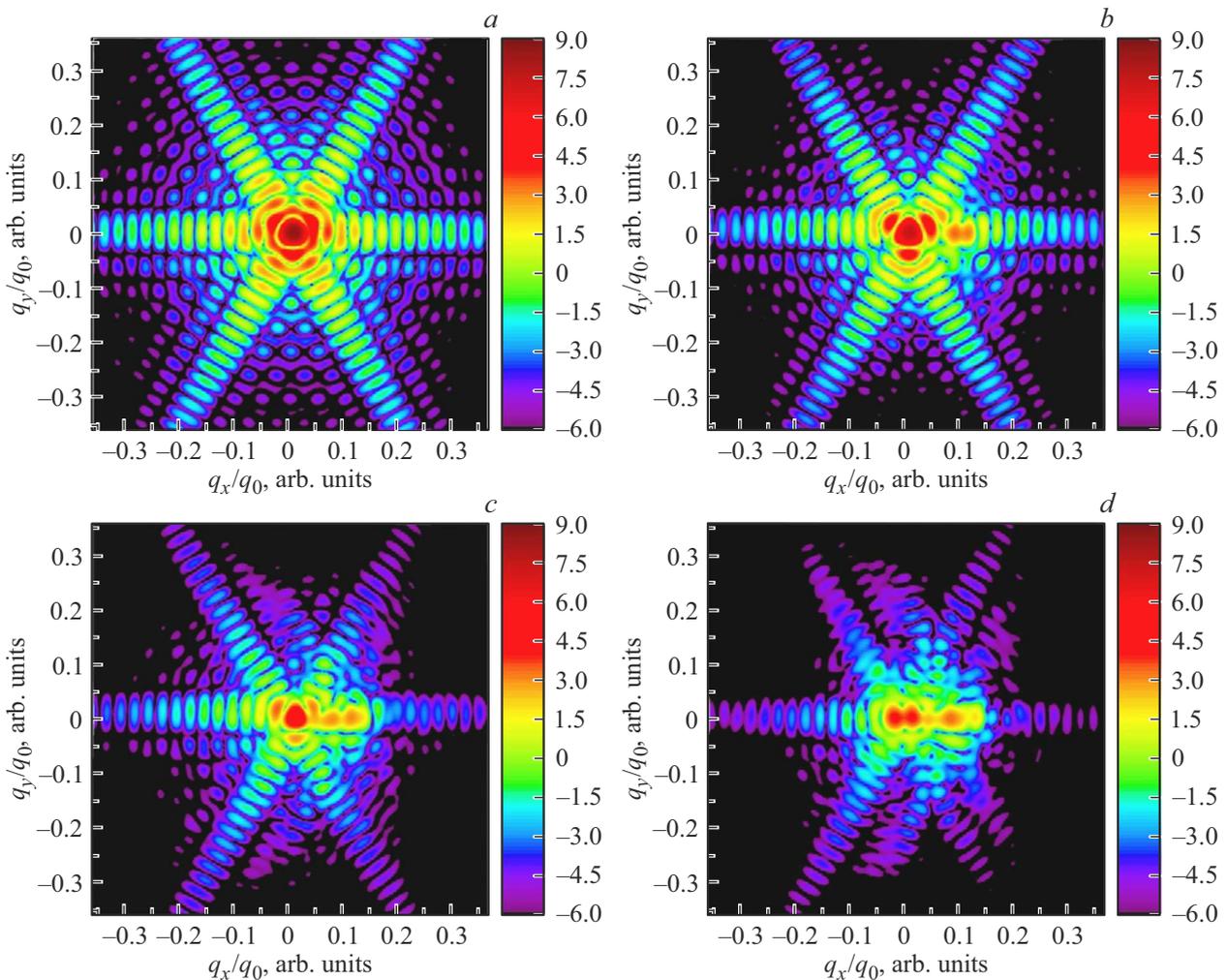
Визуальное наблюдение поведения моделируемого кристаллита в реальном пространстве показывает, что в процессе моделирования молекулярной динамики в интервале времени 0–32 ps его структура существенно изменяется, образуя, по сути, несколько отдельных кристаллических фаз. Наблюдаются несколько областей высокой интенсивности, отклоненных от центра картины на углы до  $7^\circ$  в сторону направления  $[\bar{1}10]$  обратной решетки исходной матрицы кристаллита. Отсюда можно предположить, что модельная структура содержит отдельные домены, сохраняющие в целом форму шестиугольной призмы, но повернутые относительно исходной ориентации модельного кристаллита на небольшие углы (до  $7^\circ$ ) в направлении  $[\bar{1}10]$  изначальной решетки (а также, вероятно, в противоположном направлении  $[1\bar{1}0]$  на углы не более  $1^\circ$ ).

На нескольких следующих рисунках представлены результаты моделирования дифракционных картин от модельных кристаллитов GaAs, различающихся по протяженности вдоль оси призмы (30 и 75 nm) и углу отклонения ( $4$  и  $7^\circ$ ), а также структур, составленных из повернутого и неповернутого кристаллита.

На рис. 4, *a, b* представлены дифракционные картины, построенные для модельных кристаллитов длины 30 и 75 nm, повернутых на угол  $4^\circ$  в направлении  $[1\bar{1}0]$  (вокруг оси в направлении  $[\bar{1}\bar{1}2]$ ) относительно исходной ориентации кристаллита. На рис. 5, *a, b* показаны аналогичные дифракционные картины для угла поворота  $7^\circ$ .

Для дифракционных картин, вычисленных от повернутых модельных кристаллитов, наблюдается смещение дифракционной структуры примерно на угол поворота с сохранением (в целом) внешнего вида звездчатой звезды (симметрия  $C_{6v}$ ) в центральной части звездообразной фигуры и ее ближайших окрестностях. При этом плоскость, в которой построены дифракционные картины, уже не отвечает плоскости с узлами обратной решетки и отклонена от последней на угол поворота модельного кристаллита. По этой причине центр звездообразной фигуры, наблюдаемой на картинах, смещен относительно узла 111 обратной решетки повернутого кристаллита на величину  $q_0(1/\cos\alpha - 1)$  (где  $\alpha$  — угол поворота кристаллита) в направлении новой оси кристаллита. Похожая картина наблюдается на рис. 3, *d* для дифрактограммы, вычисленной от структуры, полученной из исходного кристаллита с помощью процессов моделирования молекулярной динамики в течение модельного времени 32 ps.

Вследствие поворота кристаллографической плоскости (111) интенсивность рассеяния в области звездообразной фигуры ожидаемо падает. С ростом угла поворота центральная часть звездообразной фигуры все сильнее отклоняется от узла 111 обратной решетки повернутого кристаллита, в силу чего обстоятельства при возрастании длины повернутого кристаллита интенсивность дифракционной картины в центральной части звездообразной фигуры снижается. Расчеты показывают,



**Рис. 3.** Вычисленные 2D-картины РД от рассматриваемого в настоящей работе модельного кристаллита GaAs в виде шестиугольной призмы с высотой 150 nm и длиной ребра основания 7.5 nm для  $\text{Cu } K\alpha$ -излучения в расчетные моменты времени моделирования молекулярной динамики: (a) 8 ps, (b) 16 ps, (c) 24 ps, (d) 32 ps. Величина  $q_0 = 1.925 \text{ \AA}^{-1}$  отвечает длине волнового вектора узла 111 обратной решетки GaAs.

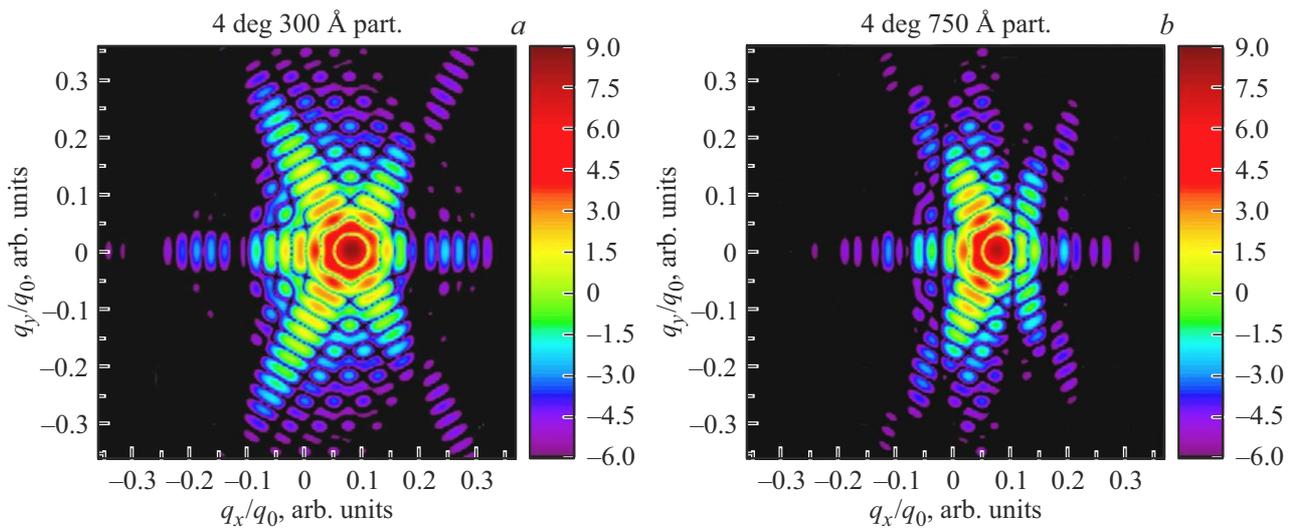
что при нормировке, использованной в построении дифракционных картин в рамках данной работы, зависимость интенсивности в центре звездообразной фигуры от протяженности повернутого модельного кристаллита при малых отклонениях от узла обратной решетки пропорциональна величине, примерно равной  $\exp(-l^2/L_0^2)$ , где  $l$  — длина повернутого фрагмента, а  $L_0$  — некий характерный пространственный размер. Для вискера GaAs, ориентированного в направлении [111], при отклонении  $7^\circ$  от узла 111 величина  $L_0$  составляет около 24 nm.

Как сказано выше, плоскость, в которой построены дифракционные картины на рис. 4 и 5, повернута относительно плоскости с узлами обратной решетки на угол поворота кристаллита. Поэтому на дифракционных картинах, показанных на рис. 4 и 5, присутствуют вертикальные полосы пониженной интенсивности. Данные полосы представляют собой пересечения области построения дифракционных картин с регионами пони-

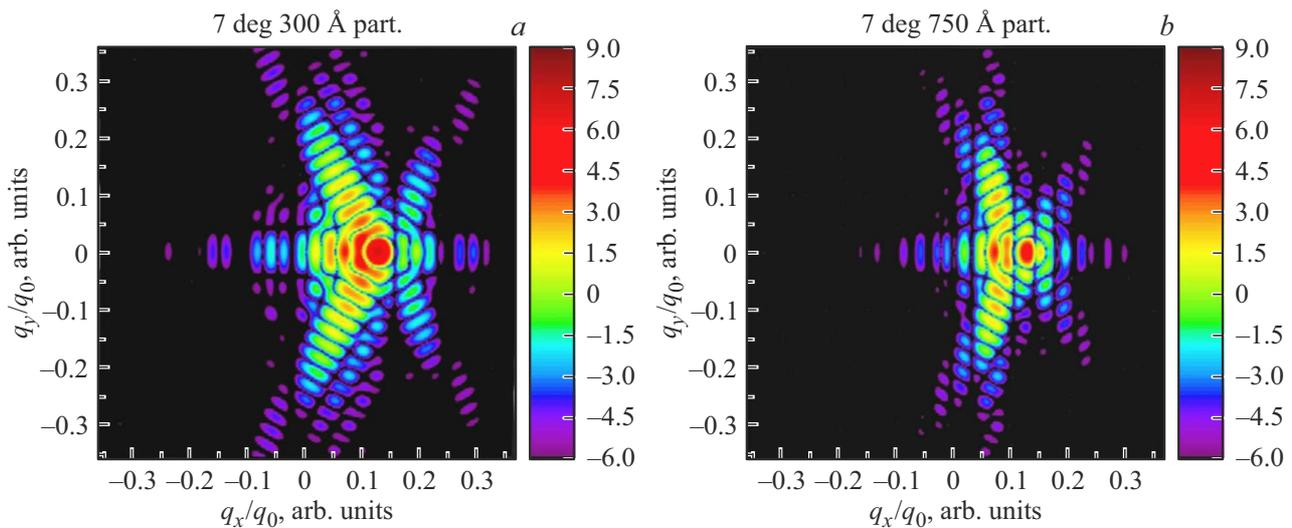
женной интенсивности, формирующимися вокруг плоскостей, перпендикулярных оси призмы. Соответственно расстояния между полосами низкой интенсивности определяется размером кристаллита в направлении вдоль оси призмы.

На рис. 6 приведены дифракционные картины, построенные для модельных образцов, состоящих двух однородных фрагментов, один из которых является частью исходного модельного кристаллита, а второй повернут относительно первого в направлении  $[1\bar{1}0]$ . Картины на рис. 6 получены для углов поворота второго фрагмента  $4$  и  $7^\circ$ , когда длины неповернутой и повернутой частей составляют в одном случае 50 и 100 nm, а в другом — 30 и 120 nm соответственно.

Дифракционные картины, приведенные на рис. 6, содержат характерные компоненты от обоих фрагментов модельного образца. Центральный участок звездообразной фигуры, отвечающей неповернутому фрагменту, в



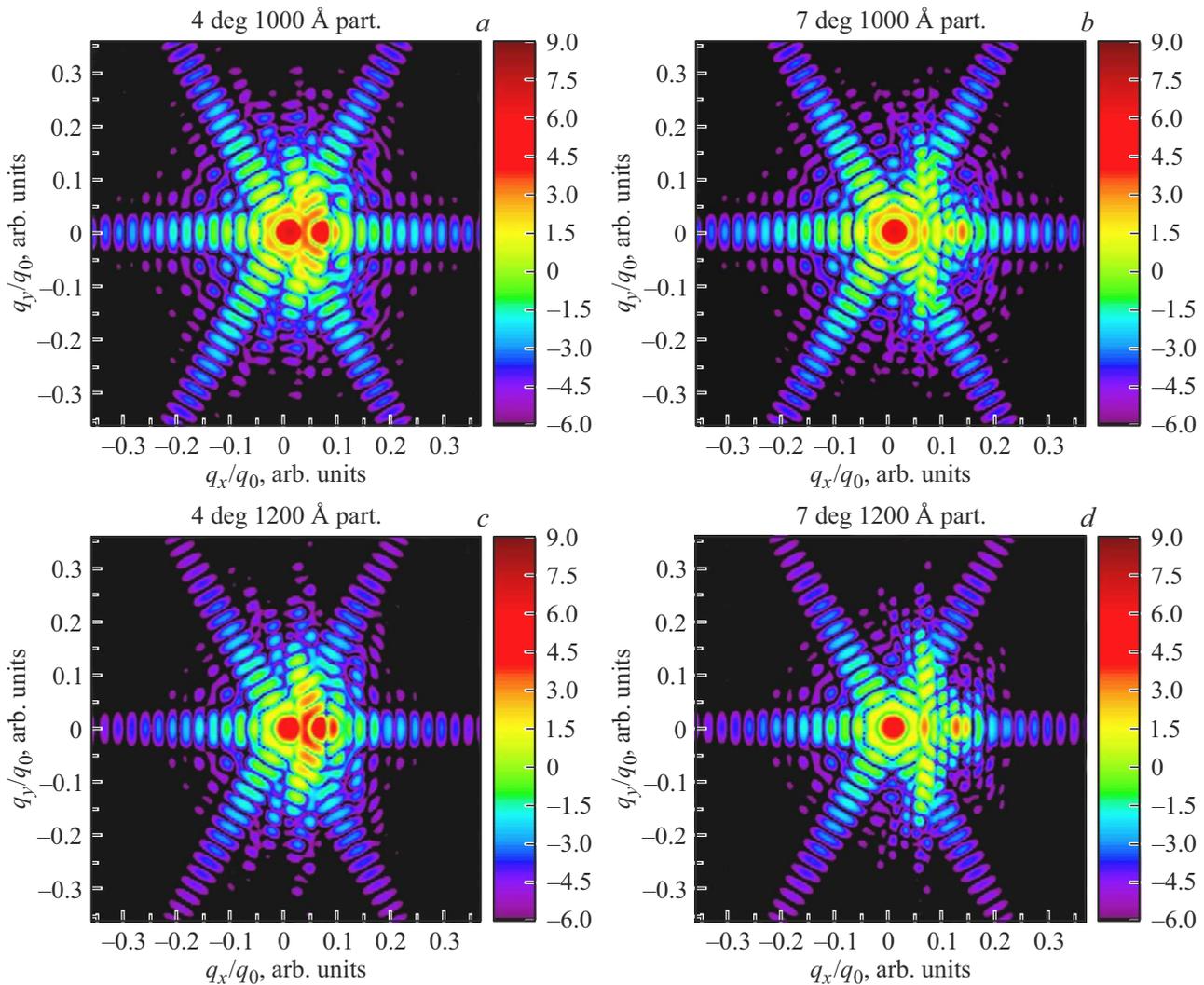
**Рис. 4.** Дифракционные картины ( $\text{Cu } K_{\alpha 1}$ -излучение) от модельных кристаллитов в виде шестиугольных призм, повернутых в направлении  $[1\bar{1}0]$  на  $4^\circ$  относительно исходной ориентации, при высоте призм 30 нм (a) и 75 нм (b) и длине ребра основания 7.5 нм. Центр картин соответствует узлу волнового вектора узла 111 обратной решетки GaAs в исходном (неповернутом) положении. Величина  $q_0 = 1.925 \text{ \AA}^{-1}$  отвечает длине волнового вектора узла 111 обратной решетки GaAs.



**Рис. 5.** Дифракционные картины ( $\text{Cu } K_{\alpha 1}$ -излучение) от модельных кристаллитов в виде шестиугольных призм, повернутых в направлении  $[1\bar{1}0]$  на  $7^\circ$  относительно исходной ориентации, при высоте 30 нм (a) и 75 нм (b) и длине ребра основания 7.5 нм. Центр картин соответствует узлу волнового вектора узла 111 обратной решетки GaAs в исходном (неповернутом) положении. Величина  $q_0 = 1.925 \text{ \AA}^{-1}$  отвечает длине волнового вектора узла 111 обратной решетки GaAs.

целом сохраняет свою форму и симметрию  $C_{6v}$ , однако его интенсивность существенно понижена по сравнению с исходным модельным кристаллитом (пропорционально квадрату протяженности неповернутой части). Составляющая дифракционной картины, отвечающая повернутому фрагменту, сохраняет основные характерные особенности, в частности, полосы пониженной интенсивности. Однако из-за того, что дифрагирующий объект составной, контрастность данных полос значительно понижена по сравнению с картинами, полученными исключительно от повернутых фрагментов.

В целом дифракционная картина, полученная от кристаллита, подвергнутого моделированию процессов молекулярной динамики в течение 32 ps, выглядит похожей на картину от набора отдельных кристаллитов, повернутых на различные углы преимущественно в направлении  $[1\bar{1}0]$ . В таблице приведены углы, отвечающие локальным максимумам, и оценки протяженности фрагментов, которую каждый из них должен был бы иметь, чтобы дать интенсивность, отвечающую соответствующему максимуму на дифракционной картине на рис. 3, d.



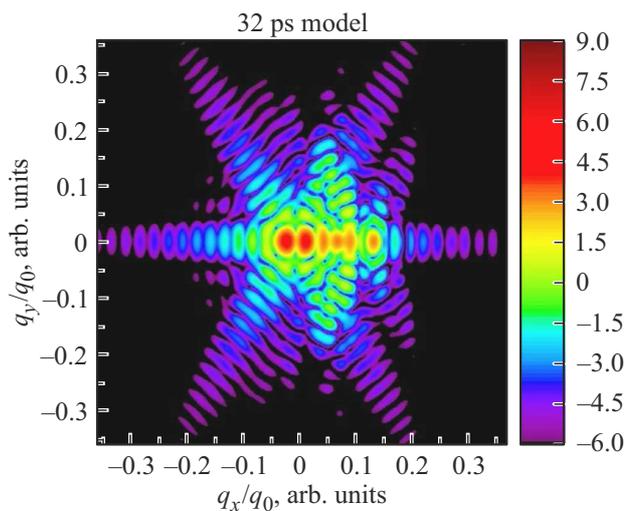
**Рис. 6.** Дифракционные картины ( $\text{Cu } K_{\alpha 1}$ -излучение) от модельных образцов, состоящих из двух фрагментов в виде шестиугольных призм: неповернутого и повернутого в направлении  $[1\bar{1}0]$ . Протяженности (высоты призм) неповернутой части, повернутой части и угла поворота составляют соответственно: 50, 100 nm,  $4^\circ$  (a); 50, 100 nm,  $7^\circ$  (b); 30, 120 nm,  $4^\circ$  (c); 30, 120 nm,  $7^\circ$  (d). Длина ребра основания во всех случаях составляет 7.5 nm. Центр картин соответствует узлу волнового вектора узла 111 обратной решетки GaAs в исходном (неповернутом) положении. Величина  $q_0 = 1.925 \text{ \AA}^{-1}$  отвечает длине волнового вектора узла 111 обратной решетки GaAs.

Оценки углов поворота и длин гипотетических составных фрагментов (высот составных фрагментов в виде шестиугольных призм с длиной ребра основания 7.5 nm) кристаллита GaAs, сформированного по итогам моделирования процессов молекулярной динамики при заданной величине времени моделирования 32 ps

| Положение максимума, $^\circ$ | Интенсивность, arb. units | Длина фрагмента (оценка), nm |
|-------------------------------|---------------------------|------------------------------|
| -1.4                          | 66.5                      | 15.6                         |
| 0.4                           | 63.6                      | 15.2                         |
| 2.2                           | 11.3                      | 6.4                          |
| 4.4                           | 26.9                      | 10.0                         |
| 7.0                           | 6.7                       | 52.4                         |

На рис. 7 показана модель дифракционной картины, полученная от модельной структуры, составленной из однородных фрагментов GaAs с таким же сечением, как и у исходного кристаллита, и протяженностью и углами поворота, соответствующими данным из таблицы.

Между картинками, приведенными на рис. 3, d и рис. 7, есть отличия, в т.ч. менее выраженные вертикальные линии ослабления интенсивности на рис. 3, d. На рис. 7 таковые ведут к появлению еще одного локального максимума в направлении  $[1\bar{1}0]$  (т.е. горизонтальной оси) от центра картины. Данное обстоятельство может свидетельствовать как о меньшей протяженности составных фрагментов, так и об их искажении в направлении  $[1\bar{1}0]$  локальных решеток фрагментов. Кроме того, при построении модельной картины на рис. 7 не учиты-



**Рис. 7.** Дифракционная картина ( $\text{Cu } K_{\alpha 1}$ -излучение) от модельной структуры, составленной из однородных фрагментов GaAs в виде шестиугольных призм с таким же сечением, как и у исходного кристаллита, и протяженностью (высотой призм) и углами поворота, соответствующими данным из таблицы.

валась часть вискера, не включенная в гипотетические фрагменты, перечисленные в таблице (около трети вискера в общей сложности). Тем не менее, наблюдается существенное сходство между дифракционными картинами на рис. 3, *d* и рис. 7, особенно в окрестностях пятен максимальной интенсивности в центральной части дифракционных картин.

#### 4. Заключение

Разработана методика моделирования картин РД от модельных атомных матриц на основе расчета суммарной амплитуды рассеяния монохроматического рентгеновского излучения от всех атомов матрицы.

С помощью разработанной методики вычислены картины РД от ряда модельных образцов GaAs в форме шестиугольной призмы с осью, ориентированной вдоль направления [111], а также от модельных образцов, составленных из призматических фрагментов кристаллитов GaAs, повернутых друг относительно друга на небольшие углы (до  $7^\circ$ ). Кроме того, рассчитаны картины РД от модельных образцов, представляющих собой результаты моделирования процессов молекулярной динамики при температуре 300 К для исходного образца — призматического кристаллита GaAs с осью, ориентированной вдоль направления [111], в течение расчетных интервалов времени до 32 ps с шагом по временной шкале 20 fs. Получена оценка размеров и углов поворота призматических однородных фрагментов структуры, полученной моделированием процессов молекулярной динамики при температуре 300 К для исходного образца в течение расчетного интервала времени 32 ps.

#### Финансирование работы

Работа выполнена в рамках Государственного задания № 0040-2019-0009.

#### Благодарности

Авторы благодарят С.А. Руколайне и А.Г. Панфилова (ФТИ им. А.Ф. Иоффе) за плодотворное сотрудничество.

#### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

#### Список литературы

- [1] Г.В. Озолиньш, Г.К. Аверкиева, А.Ф. Иевиньш, Н.А. Горюнова. Кристаллография **7**, 850 (1962).
- [2] International Centre for Diffraction Data (ICDD). Powder Diffraction File-2 Release 2014. ICDD: Newton Square, PA, USA (2014).
- [3] Zh.I. Alferov, V.M. Andreev, V.D. Romyantsev. Springer Ser. Opt. Sci. **130**, 25 (2007).
- [4] С.С. Хлудков, О.П. Толбанов, М.Д. Вилисова, И.А. Прудаев. Полупроводниковые приборы на основе арсенида галлия с глубокими примесными центрами. Издательский дом ТГУ, Томск (2016). 256 с.
- [5] Н.Г. Филонов, И.В. Ивонин. Электрофизические свойства структур с барьером Шоттки на основе арсенида галлия. Изд. дом ТГУ, Томск (2018). 364 с.
- [6] Crystal Growth Technology / Eds H.J. Scheel, T. Fukuda. John Wiley & Sons Ltd., Chichester, UK (2003). 668 p.
- [7] Г.Э. Цырлин, В.Г. Дубровский, Н.В. Сибирев, И.П. Сошников, Ю.Б. Самсоненко, А.А. Тонких, В.М. Устинов. ФТП **39**, 5, 587 (2005).
- [8] П.А. Алексеев, М.С. Дунаевский, А.О. Михайлов, С.П. Лебедев, А.А. Лебедев, И.В. Илькив, А.И. Хребтов, А.Д. Буравлев, Г.Э. Цырлин. ФТП **52**, 12, 1507 (2018).
- [9] М.Г. Кржижановская, В.А. Фирсова, Р.С. Бубнова. Применение метода Ритвельда для решения задач порошковой дифрактометрии. Изд-во СПбГУ, СПб (2016). 68 с.
- [10] Tsubota M., Kitagawa J. Sci. Rep. **7**, 1, 15381 (2017).
- [11] G.S. Pawley. J. Appl. Cryst. **14**, 6, 357 (1981).
- [12] A. Le Bail. Powder Diffraction **20**, 4, 316 (2005).
- [13] Handbook on Big Data and Machine Learning in the Physical Sciences /Eds K.K. van Dam, K.G. Yager, S.I. Campbell, R. Farnsworth, M. van Dam. Advanced Analysis Solutions for Leading Experimental Techniques. World Scientific Publishing Co, N.J. (2020). V. 2. 1000 p.
- [14] International Tables for Crystallography / Eds C.J. Gilmore, J.A. Kaduk, H. Schenk. Wiley (2019). V. H: Powder Diffraction. 932 p.
- [15] A. Tlahuice-Flores. Phys. Chem. Chem. Phys. **17**, 8, 5551 (2015).
- [16] M. Suleiman, C. Borchers, M. Guerdane, N.M. Jisrawi, D. Fritsch, R. Kirchheim, A. Pundt. Z. Phys. Chem. **223**, 1–2, 169 (2009).
- [17] P. Andreatza, C. Mottet, C. Andreatza-Vignolle, J. Penuelas, H.C.N. Tolentino, M. De Santis, R. Felici, N. Bouet. PRB **82**, 15, 155453 (2010).

- [18] A. Leonardi, P. Scardi. *Metal. Mater Trans. A* **47**, 12, 5722 (2016).
- [19] S. Plimpton. *J. Comp. Phys.* **117**, 1, 1 (1995).
- [20] Sandia Corporation. LAMMPS User Manual. Sandia National Laboratories, Albuquerque, NM / Livermore, CA (2003).
- [21] Б.Ф. Ормонт. Введение в физическую химию и кристаллохимию полупроводников. Высш. шк., М. (1982). 528 с.
- [22] М.Е. Бойко, М.Д. Шарков, А.М. Бойко, А.В. Бобыль, С.Г. Конников, Н.С. Будкина. *ЖТФ* **85**, 11, 1 (2015).
- [23] W.H. Zachariasen. *Theory of X-Ray Diffraction in Crystals*. Dover Publications, NYC (1967). 256 p.
- [24] *International Tables for Crystallography* / Ed. E. Prince. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, Boston London (2004). V. C: Mathematical Physical and Chemical Tables. 1000 p.
- [25] И.В. Савельев. *Курс общей физики. Т. 2. Электричество и магнетизм, волны, оптика*. Наука, М. (1988). 496 с.

*Редактор Т.Н. Василевская*