

РАСЧЕТ МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ ОДНОСЛОЙНЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК В РАМКАХ МЕТОДА ФУНКЦИОНАЛОВ ПЛОТНОСТИ

О.С. Еркович

erkovitch@mail.ru

П.А. Ивлиев

ivliev-pavel@mail.ru

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Российская Федерация

Аннотация

Представлены результаты теоретического исследования радиально-углового распределения электронной плотности одностенной углеродной нанотрубки металлического типа с учетом межэлектронного взаимодействия в приближении прямого кругового цилиндра. Рассмотренная система является цилиндрически симметричной потенциальной ямой с конечной высотой стенки. В рамках теории Кона — Шэма и приближения самосогласованного поля Хартри — Фока получено радиально-угловое распределение электронной плотности $n(\vec{r})$. Проведен численный расчет радиальной компоненты электронной плотности. Показано, что вид функции $n(\vec{r})$ не зависит от радиуса нанотрубки. Исходя из характера углового распределения вычислена индукция магнитного поля однослойной углеродной нанотрубки

Ключевые слова

Электронная плотность, углеродные нанотрубки, угловое распределение, радиальное распределение, магнитное поле нанотрубки

Поступила в редакцию 02.12.2015

© МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2016

В последние годы возрос интерес к изучению различных свойств наноструктур. В первую очередь, это связано с тем, что наномасштабные объекты обладают параметрами, сильно отличающимися от параметров микрообъектов, а уникальное сочетание механических и электрических характеристик дает возможность разрабатывать устройства, в которых будут использованы наноструктуры. Необычные физико-химические свойства углеродных наноструктур делают их привлекательным объектом исследования фундаментальной науки. Одним из наиболее важных с практической точки зрения объектов исследования являются углеродные нанотрубки (УНТ). Важная отличительная особенность УНТ — экспериментально установленная независимость электропроводности от длины проводящей трубки и ее толщины [1]. Цель настоящей работы — теоретическое исследование распределения электронной плотности нанотрубки, а также ее электропроводности и собственного магнитного поля.

Углеродная нанотрубка представляет собой полую протяженную цилиндрическую структуру диаметром от 0,4 до нескольких десятков нанометров и длиной от одного до сотен микрометров, состоящую из одной или нескольких

свернутых в трубку гексагональных графитовых плоскостей. В настоящей работе нанотрубка рассмотрена как тонкостенный, равномерно заряженный бесконечно длинный цилиндр. Периодичность потенциала цилиндрического слоя не учтена, поскольку высота ячейки Вигнера — Зейтца в таком случае существенно меньше геометрических размеров УНТ [2]. Таким образом, нанотрубка представляет собой цилиндрически симметричную потенциальную яму с конечной высотой стенки, в поле которой находятся взаимодействующие между собой электроны проводимости. В рамках этой модели может быть получена функция электронной плотности, которая позволяет оценить индукцию магнитного поля, создаваемого нанотрубкой. Учет электрон-электронного взаимодействия целесообразно осуществлять в рамках метода самосогласованного поля Хартри — Фока, с помощью которого можно свести многочастичную задачу к одночастичной. Построение самосогласованного поля может осуществляться как методом последовательных приближений, так и прямым вариационным методом [3, 4]. В настоящей работе расчеты электронной плотности выполнены вариационным методом, для чего применены методы теории функционала плотности [5]. Точное соответствие между электронной плотностью многоэлектронной системы, внешним потенциалом и волновой функцией установлено теоремой Кона — Хоэнберга [6]. Согласно теореме, минимуму функционала полной энергии системы $E[n]$ соответствует искомое пространственное распределение электронной плотности $n(\vec{r})$ электронного газа. Полная энергия электронного газа в поле нанотрубки $E[n]$ состоит из вкладов кинетической энергии $T[n]$, обменно-корреляционной энергии $g[n, \nabla n]$, энергии взаимодействия электронов между собой и с внешним полем цилиндра $W[n]$ и $V[n]$: $E[n] = T[n] + V[n] + W[n] + g[n, \nabla n]$. Электрон, движущийся в цилиндрически симметричной потенциальной яме, обладает кинетической энергией $T[n]$, которая может быть аппроксимирована выражением [7]

$$T[n] = \frac{3}{10} (3\pi^2)^{\frac{2}{3}} \int n(\vec{r}, \varphi)^{\frac{5}{3}} d^3\vec{r}.$$

Энергия взаимодействия электрона с внешним полем заряженного цилиндра $V[n]$ может быть записана в следующем виде: $V[n] = \int v(\vec{r})n(\vec{r})d^3\vec{r}$. Межэлектронное взаимодействие можно описать самосогласованным полем Хартри — Фока

$$W[n] = \frac{1}{2} \int \frac{n(\vec{r})n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3\vec{r}.$$

Вклад обменно-корреляционной энергии использован в виде градиентного разложения [8]

$$g[n, \nabla n] = \frac{1}{72} \int \frac{1}{n(\vec{r})} (\nabla n(\vec{r}))^2 d^3\vec{r}.$$

Таким образом, выражение для полной энергии электронного газа в нанотрубке как функционала плотности электронов имеет вид

$$\begin{aligned}
 E[n] &= \frac{3}{10} (3\pi^2)^{\frac{2}{3}} \int n(\vec{r})^{\frac{5}{3}} d^3\vec{r} + \int v(\vec{r})n(\vec{r})d^3\vec{r} + \\
 &+ \frac{1}{2} \int \frac{n(\vec{r})n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3\vec{r} + \frac{1}{72} \int \frac{1}{n(\vec{r})} (\nabla n(\vec{r}))^2 d^3\vec{r}; \\
 E[n] &= \frac{3}{10} (3\pi^2)^{\frac{2}{3}} \int n(\vec{r}, \varphi)^{\frac{5}{3}} d^3\vec{r} + \int v(\vec{r})n(\vec{r}, \varphi)d^3\vec{r} + \\
 &+ \frac{1}{2} \int \frac{n(\vec{r}, \varphi)n(\vec{r}', \varphi)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3\vec{r} + \frac{1}{72} \int \frac{1}{n(\vec{r}, \varphi)} (\nabla n(\vec{r}, \varphi))^2 d^3\vec{r}; \\
 E[n] &= \frac{3}{10} (3\pi^2)^{\frac{2}{3}} \int n(\vec{r}, \varphi)^{\frac{5}{3}} d^3\vec{r} + \int v(\vec{r})n(\vec{r}, \varphi)d^3\vec{r} + \\
 &+ \frac{1}{2} \int \frac{n(\vec{r}, \varphi)n(\vec{r}', \varphi)}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3\vec{r} + \frac{1}{72} \int \frac{1}{n(\vec{r}, \varphi)} (\nabla n(\vec{r}, \varphi))^2 d^3\vec{r}.
 \end{aligned}$$

Метод Кона — Шэма предполагает минимизацию функционала $E[n]$. С учетом условия нормировки $\int n(\vec{r}) d^3\vec{r} = N$ (N — число частиц в системе) условие экстремума функционала $E[n]$ может быть записано в виде $\frac{\delta E[n]}{\delta n} - \mu = 0$, где μ — неопределенный множитель Лагранжа, имеющий смысл химического потенциала и равный нулю в силу условия нормировки. Вариационная производная $\frac{\delta E[n]}{\delta n(\vec{r})}$ может быть определена как [9]

$$\begin{aligned}
 \frac{\delta E[n]}{\delta n(\vec{r})} &= \frac{\delta T[n]}{\delta n(\vec{r})} + \frac{\delta g[n, \nabla n]}{\delta n(\vec{r})} + \frac{\delta V[n]}{\delta n(\vec{r})} + \frac{\delta W[n]}{\delta n(\vec{r})}; \\
 \frac{\delta T[n]}{\delta n(\vec{r})} &= \frac{1}{2} (3\pi^2)^{\frac{2}{3}} n(\vec{r})^{\frac{2}{3}}.
 \end{aligned}$$

Учитывая осевую симметрию задачи, используем цилиндрическую систему координат $n(\vec{r}) = n(r, \varphi, z)$. Трансляционная симметрия системы позволяет предположить, что зависимость электронной плотности от координаты z отсутствует $n(\vec{r}) = n(r, \varphi)$:

$$\frac{\delta g[n, \nabla n]}{\delta n(\vec{r}, \varphi)} = \frac{1}{72} \frac{1}{n(\vec{r}, \varphi)^2} (\nabla n(\vec{r}, \varphi))^2 - \frac{1}{36} \frac{1}{n(\vec{r}, \varphi)} \Delta n(\vec{r}, \varphi).$$

Сумма вариаций функционалов $V[n] + W[n]$ должна удовлетворять уравнению Пуассона [9]

$$\frac{\delta V[n]}{\delta n(\bar{r})} + \frac{\delta W[n]}{\delta n(\bar{r})} = \frac{24\pi}{r^2} n(\bar{r}). \quad (1)$$

Условию минимума функционала $\frac{\delta E[n]}{\delta n(\bar{r})} = 0$ с учетом (1) соответствует уравнение

$$-\frac{\partial^2}{\partial r^2} n(r, \varphi) - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} n(r, \varphi) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} n(r, \varphi) + \frac{\pi}{3r^2} n(r, \varphi). \quad (2)$$

Уравнение (2) является уравнением с разделяющимися переменными $n(r, \varphi) = R(r)\Phi(\varphi)$. Дифференциальное уравнение для радиальной компоненты представляет собой модифицированное уравнение Куммера [10], решение которого имеет вид [11]

$$R(r) = \frac{1}{M(-6, 51, 1, 2\sqrt{3\pi})^2} e^{-2\sqrt{3\pi}r^2} \left\{ U(-6, 51, 1, 2\sqrt{3\pi}r^2) M(-6, 51, 1, 2\sqrt{3\pi}) - \right. \\ \left. - M(-6, 51, 1, 2\sqrt{3\pi}r^2) U(-6, 51, 1, 2\sqrt{3\pi}) \right\}^2,$$

где $U(a, 1, x)$, $M(a, 1, x)$ — линейно независимые функции Куммера [10]. Как было показано в работе [11], в центре сечения нанотрубки электронная плотность достигает наибольшего значения, а по мере приближения к стенкам цилиндра, плотность электронов уменьшается. Функция $R(r)$ при увеличении радиуса УНТ согласно результатам численного расчета имеет с учетом условий нормировки сходное поведение, не зависящее от ее радиуса.

Дифференциальное уравнение для углового распределения электронной плотности имеет вид

$$\frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2} = -k\Phi(\varphi) + \frac{1}{k}. \quad (3)$$

Вещественное решение уравнения (3) удобно искать в виде

$$\Phi(\varphi) = A \sin(\sqrt{k}\varphi + \varphi_0) + \frac{1}{k^2}.$$

Условие нормировки можно записать как $\int_0^{2\pi} |\Phi(\varphi)|^2 d\varphi = 1$. Очевидно, что одновременное выполнение условий нормировки и периодичности приводит к значению $k = 1$. Таким образом, нормированное на единицу решение уравнения (3) имеет вид

$$\Phi(\varphi) = \frac{1}{3\pi} \sin(\varphi + \varphi_0) + 1,$$

где φ_0 — произвольная фаза, которая связана с выбором начала отсчета φ и может быть принята равной нулю. Ключевым остается факт формирования стоячей волны электронной плотности.

Исходя из того, что угловое распределение электронной плотности имеет характер стоячей волны, можно рассчитать индукцию магнитного поля внутри однослойной углеродной нанотрубки. По закону Био-Савара — Лапласа вектор индукции магнитного поля \vec{B} в точке \vec{r} находим по выражению

$$\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_S \frac{\vec{j}}{r^2} d\vec{S}.$$

Вклад в плотность кольцевого тока нанотрубки j_i от электронов с энергией E_i можно выразить как произведение заряда электрона, плотности электронов и скорости носителей заряда: $j_i = |e| n_i v_i$.

Число электронов с энергией E_i определяется распределением Ферми

$$n_i = \frac{1}{\exp\left(\frac{E_i - \mu}{kT}\right) + 1};$$

скорость носителей заряда, обладающих энергией E_i , можно представить в виде $v_i = \sqrt{2E_i/m_e}$. Таким образом, получаем выражение для плотности тока

$$j_i = \sqrt{\frac{1}{8}} \frac{|e|}{m_e} \frac{\sqrt{E_i}}{\exp\left(\frac{E_i - \mu}{kT}\right) + 1}.$$

Проинтегрировав это выражение по всем допустимым значениям энергии носителей зарядов, запишем соотношение для полного кольцевого тока однослойной УНТ:

$$j = \sqrt{\frac{1}{8}} \frac{|e|}{m_e} \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \frac{\sqrt{E_i}}{\exp\left(\frac{E_i - \mu}{kT}\right) + 1} dE_i.$$

Задача определения максимальной энергии носителей заряда в рассматриваемой системе может быть решена исходя из сравнения распределения Ферми и полученного радиально-углового распределения электронной плотности. Результат интегрирования распределения Ферми от минимально до максимально возможной энергии носителей должен в точности совпасть с результатом интегрирования электронной плотности по внутреннему пространству нанотрубки:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^R r n(r, \varphi) dr d\varphi = \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \frac{\sqrt{E_i}}{\exp\left(\frac{E_i - \mu}{kT}\right) + 1} dE_i. \quad (4)$$

После интегрирования соотношения (4) получим алгебраическое уравнение, решением которого является выражение для максимальной энергии E_{\max} . Введем обозначение $\int_0^{2\pi} \int_0^R rn(r, \varphi) dr d\varphi = N$ и запишем выражение для определения максимальной энергии носителей заряда

$$E_{\max} = \mu + kT \ln \left(\frac{1}{\exp\left(-\frac{N}{kT}\right) + \exp\left(\frac{\mu - N}{kT}\right) - 1} \right). \quad (5)$$

В рассматриваемом случае величина N представляет собой число свободных электронов, относящихся к единице длины нанотрубки. Подставляя (5) в выражение для кольцевого тока УНТ, получаем

$$j = \sqrt{\frac{1}{8}} \frac{|e|}{m_e} \left\{ \mu + (kT)^2 \ln \left[\frac{\exp\left(-\frac{\mu}{kT}\right) + 1}{\left(\exp\left(\frac{\mu}{kT}\right) + 1\right) \exp\left(-\frac{N}{kT}\right)} \right] \right\}. \quad (6)$$

Химический потенциал чистого беспримесного графена μ равен нулю [12]. Поэтому выражение (6) значительно упрощается и может быть записано в виде

$$j = \sqrt{\frac{1}{8}} \frac{|e|}{m_e} NkT.$$

Используя для N соотношение (4), получаем выражение для кольцевого тока одностенной углеродной нанотрубки:

$$j = \sqrt{\frac{1}{8}} \frac{|e|}{m_e} kT \int_0^{2\pi} \int_0^R rn(r, \varphi) dr d\varphi. \quad (7)$$

Учитывая (7) для индукции магнитного поля, запишем окончательное выражение для магнитной индукции на оси нанотрубки

$$B = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\sqrt{\frac{1}{8}} \frac{|e|}{m_e} kT \int_0^{2\pi} \int_0^R rn(r, \varphi) dr d\varphi}{\bar{r}^2}. \quad (8)$$

Формула (8) выражает зависимость индукции магнитного поля на оси однослойной углеродной нанотрубки металлического типа от температуры трубки и ее радиуса. Численный расчет был проведен для нанотрубки радиусом 10 нм при значениях температуры 100 и 273,15 К. При температуре 100 К индукция магнитного поля составила $B = 85$ мТл, а при температуре 273,15 К — $B = 0,23$ Тл. Полученные результаты соответствуют результатам качественного эксперимента, описанного в работе [13], а также экспериментальным результатам, приведенным в работе [14].

Заключение. На основе методов теории функционалов плотности проведено теоретическое исследование распределения электронной плотности нанотрубки в приближении прямого кругового цилиндра. Установлено, что электронная плотность нанотрубки может быть представлена в виде суперпозиции стоячих волн. Получена зависимость индукции магнитного поля внутри однослойной углеродной нанотрубки от электронной температуры и радиуса исследуемого объекта.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Four-point resistance of individual single-wall carbon nanotubes* / B. Gao, Y.F. Chen, M.S. Fuhrer, D.C. Glatli, A. Bachtold // *Physical Review Letters*. 2005. No. 95. P. 1–4.
2. *Винтайкин Б.Е.* Физика твердого тела. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2006. 360 с.
3. *Хартри Д.* Расчеты атомных структур. М.: ИИЛ, 1960. 256 с.
4. *Фок В.А.* Начала квантовой механики. М.: Наука, 1976. 376 с.
5. *Сарры А.М., Сарры М.Ф.* К теории функционала плотности // *Физика твердого тела*. 2012. Т. 54. № 6. С. 1237–1243.
6. *Кон В.* Электронная структура вещества — волновые функции и функционалы плотности // *УФН*. 2002. Т. 172. № 3. С. 336–348. DOI: 10.3367/UFNr.0172.200203e.0336
7. *Thomas L.H.* The calculation of atomic fields // *Proc. Cambridge Philos. Soc.* 1927. Vol. 23. No. 5. P. 542–548.
8. *Прут В.В.* Уравнение состояния в квазиклассическом приближении // *ЖТФ*. 2004. Т. 74. № 12. С. 10–20.
9. *Ивлиев П.А., Еркович О.С.* Углеродные нанотрубки: распределение электронной плотности, возможные применения // *Физическое образование в вузах*. 2014. Т. 20. № 1С. С. 18.
10. *Абрамовиц М., Стиган И.* Справочник по специальным функциям. М.: Наука, 1979. 834 с.
11. *Ивлиев П.А.* Радиальное распределение электронной плотности углеродной нанотрубки // *Электрон. журн. Молодежный научно-технический вестник. МГТУ им. Н.Э. Баумана*. 2014. № 9. С. 6–16. URL: <http://sntbul.bmstu.ru/doc/732012.html>
12. *Novoselov K.S.* Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene // *Nature*. 2005. Vol. 438. P. 197–200.
13. *Броздниченко А.Н., Пономарев А.Н., Пронин В.П., Чистотин И.А.* Магнитные свойства углеродных нанотрубок при отборе автоэмиссионного тока // *Известия Российского государственного педагогического университета им. А.И. Герцена*. 2006. № 6 (15). С. 58–64.
14. *Ramirez A.P., Haddon R.C., Zhou O.* Magnetic susceptibility of molecular carbon: Nanotubes and fullerite // *Science*. 1994. Vol. 265. P. 84–86.

Еркович Ольга Станиславовна — канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры «Физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана (Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5).

Ивлиев Павел Александрович — магистрант кафедры «Физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана (Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5).

Просьба ссылаться на эту статью следующим образом:

Еркович О.С., Ивлиев П.А. Расчет магнитных свойств однослойных углеродных нанотрубок в рамках метода функционалов плотности // *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки*. 2016. № 4. С. 56–64. DOI: 10.18698/1812-3368-2016-4-56-64

CALCULATION OF THE MAGNETIC PROPERTIES OF SINGLE-WALLED CARBON NANOTUBES IN THE FRAMEWORK OF DENSITY FUNCTIONAL THEORY

O.S. Erkovich

erkovitch@mail.ru

P.A. Ivliev

ivliev-pavel@mail.ru

Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation

Abstract

The study tested radial angular distribution of electron density of a single-walled metal type carbon nanotube. Within the research we took into account the electron-electron interaction in the approximation of a right circular cylinder having a constant electrostatic potential. The system under consideration is a cylindrically symmetric potential well with a final height of the wall. In the framework of Kohn — Sham theory and Hartree — Fock self-consistent field approximation we obtained radial and angular distribution of the electron density $n(\vec{r})$ in such structures. We presented graphically the radial component of the electron density and concluded that nature of the electron density distribution does not depend on the nanotube radius. Relying on the obtained radial distribution we made a conclusion about the nature of the electrical conductivity of nanotubes, as well as an estimate of their electrical resistance. Taking into consideration the nature of the angular distribution we calculated the magnetic field induction of single-walled carbon nanotubes

Keywords

Electron density, carbon nanotubes, angular distribution, radial distribution, magnetic field of nanotube

REFERENCES

- [1] Gao B., Chen Y.F., Fuhrer M.S., Glattli D.C., Bachtold A. Four-point resistance of individual single-wall carbon nanotubes. *Physical Review Letters*, 2005, no. 95, pp. 1–4.
- [2] Vintaykin B.E. Физика твердого тела [Solid state physics]. Moscow MGTU im. N.E. Baumana Publ., 2006. 360 p.
- [3] Hartree D.R. The calculation of atomic structures. N.Y., Wiley; London, Chapman and Hall, 1957.
- [4] Fock V.A. Fundamentals of quantum mechanics. Moscow, Mir Publ., 1978. 367 p.
- [5] Sarry A.M., Sarry M.F. On the density functional theory. *Physics of the Solid State*, 2012, vol. 54, no. 6, p. 1315. DOI: 10.1134/S1063783412060297
- [6] Kohn W. Electronic structure of matter — wave functions and density functionals. *Rev. Mod. Phys.*, 1999, vol. 71, iss. 5, pp. 1253–1266. Available at: <http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.71.1253>
- [7] Thomas L.H. The calculation of atomic fields. *Proc. Cambridge Philos. Soc.*, 1927, vol. 23, no. 5, pp. 542–548.
- [8] Prut V.V. Quasiclassical equation of state. *J. Tech. Phys.*, 2004, vol. 74, no. 12, pp. 10–20 (in Russ.).

[9] Ivliev P.A., Erkovich O.S. Carbon nanotubes: The electron density distribution, possible applications. *Fizicheskoe obrazovanie v vuzakh* [Physics in Higher Education], 2014, vol. 20, no. 1S, p. 18 (in Russ.).

[10] Abramovits M., Stigan I. *Spravochnik po spetsial'nym funktsiyam* [Special function handbook]. Moscow, Nauka Publ., 1979. 834 p.

[11] Ivliev P.A. The radial distribution of the electron density in carbon nanotubes. *Jelektr. zhur. "Molodezhnyy nauchno-tekhnicheskiy vestnik". MGTU im. N.E. Baumana* [El. J. Youth Sci.&Tech. Herald of Bauman MSTU], 2014, no. 9, pp. 6–16. Available at: <http://sntbul.bmstu.ru/doc/732012.html>

[12] Novoselov K.S. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in grapheme. *Nature*, 2005, vol. 438, pp. 197–200.

[13] Brozdnicenko A.N., Ponomarev A.N., Pronin V.P., Chistotin I.A. Magnetic properties of nanotubes in the process of auto emission current removal. *Izv. Ross. gos. ped. univ. im. A.I. Gertsena* [Izvestia: Herzen University Journal of Humanities & Sciences], 2006, no. 6 (15), pp. 58–64 (in Russ.).

[14] Ramirez A.P., Haddon R.C., Zhou O. Magnetic susceptibility of molecular carbon: Nanotubes and fullerite. *Science*, 1994, vol. 265, pp. 84–86.

Erkovich O.S. — Cand. Sci. (Phys.-Math.), Assoc. Professor of Physics Department, Bauman Moscow State Technical University (2-ya Baumanskaya ul. 5, Moscow, 105005 Russian Federation).

Ivliev P.A. — Master of Physics Department, Bauman Moscow State Technical University (2-ya Baumanskaya ul. 5, Moscow, 105005 Russian Federation).

Please cite this article in English as:

Erkovich O.S., Ivliev P.A. Calculation of the Magnetic Properties of Single-Walled Carbon Nanotubes in the Framework of Density Functional Theory. *Vestn. Mosk. Gos. Tekh. Univ. im. N.E. Baumana, Estestv. Nauki* [Herald of the Bauman Moscow State Tech. Univ., Nat. Sci.], 2016, no. 4, pp. 56–64. DOI: 10.18698/1812-3368-2016-4-56-64