

УДК 538.9
 PACS 71.20.–b, 71.38.–k, 71.20 Nr, 63.20.Dj
 DOI 10.24144/2415-8038.2019.46.40-47

К.Є. Глухов, Л.Ю. Хархаліс, Т.Я. Бабука, М.В. Лях

Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, вул. Волошина, 54, Україна,
 e-mail: lkharkhalis@gmail.com

Ab initio дослідження електрон-фононої взаємодії у халькогенідах індію

Вперше проведено першопринципні дослідження електрон-фононої взаємодії в шаруватих кристалах β -InSe і In_4Se_3 . Одержано константи електрон-фононої взаємодії, спектральні функції Еліашберга та уширення фононних гілок, зумовлених цією взаємодією. Розраховані величини ізотропних параметрів електрон-фононного зв'язку демонструють кількісне збільшення взаємодії електронної та фононої підсистем при переході від β -InSe до In_4Se_3 , що узгоджується зі зростанням середнього перекриття атомних функцій. Встановлено, що основний вклад в означені характеристики вносять високочастотні оптичні моди, відповідні за коливання у перпендикулярному до площини шарів напрямку.

Ключові слова: селеніди індію, електрон-фононна взаємодія, першопринципні розрахунки, спектральна функція Еліашберга.

Вступ

Електрон-фононна взаємодія у кристалах є предметом інтенсивного теоретичного і експериментального дослідження. Сьогодні вона вивчається як в феноменологічних підходах, так і з перших принципів. Електрон-фононна взаємодія відіграє суттєву роль у явищах транспорту. Відомо, що взаємодія електронів з фононами може впливати на електропровідність і теплопровідність, і, відповідно, змінювати термоелектричну ефективність матеріалів. Зокрема, для кристалу In_4Se_3 було доведено, що причиною різкого зростання його коефіцієнта термоелектричної добротності виступають хвилі зарядової густини [1], або конденсонні стани [2, 3], які пов'язуються з електрон-фононою взаємодією. Ми вперше показали, що неоднорідність заряду у вигляді конденсонів (раніше це було можливо лише для одновимірних матеріалів) реалізується в кристалі In_4Se_3 завдяки закону дисперсії з низькоенергетичною непараболічністю і пікоподібною густиною станів типу $E^{-1/4}$ [4, 5]. Недавно в [6], для мо-

ношару InSe було також виявлено аномально сильну електрон-фононну взаємодією, яка зумовлена особливими дірковими станами, що з'являються за рахунок інверсної структури валентної зони, подібно, як це спостерігається у кристалі In_4Se_3 . Як впливає з фотоемісійних досліджень [7], з ростом числа шарів у InSe форма кривизни типу «Мексиканської шляпи» для дисперсії валентної зони в центрі зони Бріллюена трансформується в параболічну. Тому, зважаючи на незвичайні стани електронної підсистеми [8–10] та зумовлені ними унікальні термоелектричні і оптичні властивості в кристалах In_4Se_3 і β -InSe, представляє інтерес провести першопринципні дослідження електрон-фононої взаємодії в розглядуваних селенідах індію. Обидва кристали демонструють шарувату структуру, однак шари у кристалі In_4Se_3 у порівнянні з β -InSe мають більш гофровану будову.

У даній роботі, з метою вивчення інтенсивності електрон-фононої взаємодії у кристалах In_4Se_3 і β -InSe, ми представляємо для них розрахунки фононного спе-

ктру, густини фононних станів, спектральної функції Еліашберга та констант електрон-фононної взаємодії.

Деталі розрахунку електрон-фононної взаємодії з перших принципів

Розрахунки параметрів взаємодії між електронною та фононною підсистемами досліджуваних кристалів проводилися за допомогою програмного пакету ABINIT [11–13]. В цьому пакеті реалізовано методику першопринципної теорії збурень (DFPT) [14, 15] для знаходження електрон-фононної взаємодії (ЕПІ) [16–18]. Нижче відповідну процедуру буде коротко описано.

Фактичний розрахунок елементів матриці ЕПІ виконується під час обчислення параметрів теорії збурень другого порядку, що зазвичай використовується для обчислення частот фононів, ефективних зарядів Борна, векторів поляризації фононів, тощо. Матричні елементи є «побічними продуктами» рівняння Штернхаймера, яке використовується для обчислення хвильових функцій першого порядку $\psi^{(1)}$. У цьому рівнянні га-

мільтоніан основного стану $H^{(0)}$ застосовується до $\psi^{(1)}$, а гамільтоніан першого порядку $H^{(1)}$ діє на функції основного стану $\psi^{(0)}$. Обчислення скалярного добутку $\langle \psi_{k,n}^{(0)} |$ з $H^{(1)} | \psi_{k+q,n'}^{(0)} \rangle$ дає шуканий матричний елемент. $H^{(1)}$ позначає збурений гамільтоніан для заданого вектора q відносно одного атомного положення \mathbf{R}_τ в одному приведеному напрямку α , тобто $H^{q\tau\alpha}$.

Після отримання параметрів та величин основного стану виконуються розрахунки функцій відклику фононів на достатньо щільній сітці q -точок в зоні Бріллюена. Щільність сітки q -точок також є важливим параметром, оскільки обидві k та $k+q$ сітки мають належати FS. Більше того, з міркувань симетрії сітка q -точок має бути підсіткою сітки k -точок, а також обов'язково включати початок координат (точку Γ).

Матричні елементи, які розраховуються в ABINIT, не є саме точно такими, які використовуються в теорії електрон-фононної взаємодії, оскільки ABINIT працює з простими збуреннями одного атома в одному кристалічному напрямку. Визначення «нормального» матричного елемента приведено нижче:

$$g_{k',n';k,n}^{q,j} = \sqrt{\frac{1}{2M_\tau\omega_{q,j}}} \langle \psi_{k',n'}^{q,j} | H_{k',k}^{q,j} | \psi_{k,n} \rangle = \sqrt{\frac{1}{2M_\tau\omega_{q,j}}} \sum_{\tau,\alpha} e_{\tau,\alpha}^{q,j} \langle \psi_{k',n'} | H_{k',k}^{\tau,\alpha} | \psi_{k,n} \rangle, \quad (1)$$

де $\psi_{k,n}$ — це хвильова функція зони n в точці зони Бріллюена k . M_τ — маса атома сорту τ , а $\omega_{q,j}$ та $e_{\tau,\alpha}^{q,j}$ це частота та власний вектор фононної моди j . $H_{k',k}^{\tau,\alpha}$ — збурений (в першому порядку) гамільтоніан системи зі зміщенням у напрямку α атомом τ . Очевидно, що $g_{k',n';k,n}^{q,j}$ визначається фононними модами, а не атомом та напрямком. Оскільки для його обчислення потрібні всі τ, α збурення для даного q , першим етапом розрахунку є одержання всіх матричних елементів $\langle \psi_{k',n'} | H_{k',k}^{\tau,\alpha} | \psi_{k,n} \rangle$, обчислення частот фононів та розрахунок скалярних добутків з $e_{\tau,\alpha}^{q,j}$.

На цьому етапі можуть бути обчислені всі ізотропні константи ($T_c, \lambda, \omega_{log}$) та усереднені по FS ширини фононних лі-

ній. Спочатку $g_{k',n';k,n}^{q,j}$ підсумовуються по n та n' , використовуючи ваговий коефіцієнт $e^{-((\varepsilon_{k,n} - \varepsilon_F)/\sigma)^2}$, де σ — вхідний параметр. Далі, $g_{k',k}^{q,j}$ інтегруються по k , для одержання $g^{q,j}$. Ширини фононних ліній визначаються як $\gamma_{q,j} = 2\pi\omega_{q,j}g^{q,j}$. Ці величини також використовуються для одержання спектральної функції Еліашберга:

$$\alpha^2 F(\omega) = \frac{1}{N(\varepsilon_F)} \sum_{q,j} g^{q,j} \delta(\omega - \omega_{q,j}). \quad (2)$$

Описана методика першопринципних розрахунків електрон-фононної взаємодії була використана при обчисленні параметрів цієї взаємодії в розглядуваних селенідах індію. При цьому було одержано величини

ширин фононних ліній у ряді точок та напрямків відповідних зон Бріллюена, оцінені ізотропні параметри ЕРІ та встановлено форму коливань, найсильніше зв'язаних з електронною підсистемою.

Вплив електрон-фононої взаємодії на фононний спектр селенідів індію

На Рис.1 приведено фононний спектр кристала β -InSe з нанесеними величинами ширин фононних ліній, одержаних *ab initio*. Слід зауважити, що ширина ліній на рисунку наведена в умовних одиницях з метою візуалізації станів з найбільшою електрон-фононою взаємодією, оскільки реальні розраховані значення складають величини порядку 10^{-3} см^{-1} і не можуть бути візуалізовані на тлі дисперсійних гілок фононів (значення порядку 10^2 см^{-1}).

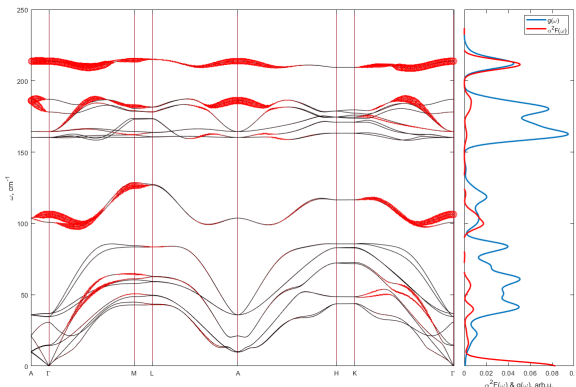


Рис. 1: Розраховані фононний спектр, ширина фононних ліній (в умовних одиницях) та густина фононних станів і спектральна функція Еліашберга для кристала β -InSe

Як впливає з наведених на Рис.2 ширин фононних смуг, та розподілу і інтенсивності екстремумів спектральної функції Еліашберга $\alpha^2 F(\omega)$, найбільший вклад в енергетику електрон-фононої взаємодії дають коливання з номерами 12, 13 ($100 \div 120 \text{ см}^{-1}$) та 23 і 24 ($210 \div 220 \text{ см}^{-1}$). Аналіз форми цих коливань (див. Рис.3) показує, що власні вектори відповідних мод напрямлені в перпендикулярному до площин шарів напрямку і зумовлюють зміну товщин шарів та величини міжшарового проміжку.

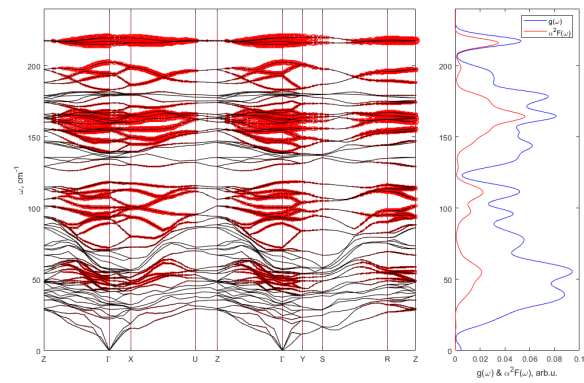


Рис. 2: Розраховані фононний спектр, ширина фононних ліній (в умовних одиницях) та густина фононних станів і спектральна функція Еліашберга для кристала In_4Se_3

Розрахована функція Еліашберга подібна до густини станів фононів, але зважена у відповідності до величини взаємодії електронів та фононів. Перший обернений момент функції $\alpha^2 F(\omega)$, дає загальну величину сили взаємодії, або масовий ренормалізуючий фактор λ . Також, в результаті усереднення цієї величини по різних напрямках та для всіх фононних гілок, одержано величину $\lambda_{iso}(\beta\text{-InSe}) = 0.01423$, що може вважатися усередненим параметром інтенсивності електрон-фононої взаємодії в матеріалі.

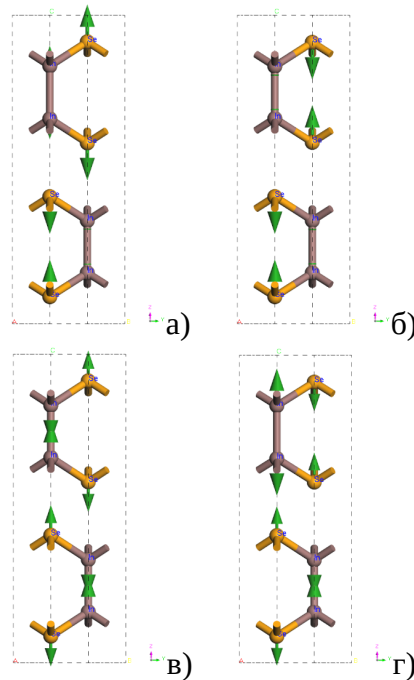


Рис. 3: Форма коливань, які дають найбільший вклад в спектральну функцію Еліашберга $\alpha^2 F(\omega)$. Смуги: (а) – 12, (б) – 13, (в) – 23, (г) – 24.

Аналогічні розрахунки були проведені для кристалу In_4Se_3 , шари якого у порівнянні з $\beta\text{-InSe}$, сильніше ув'язані між собою. Результати розрахунку спектра, густини станів та спектральної функції представлені на Рис.2. Також тут нанесені величини ширин фононних ліній. На відміну від кристалу $\beta\text{-InSe}$, у взаємодії електронної та фононної підсистем участь приймає більша кількість коливних станів. Це зумовлено сильнішим зчепленням гофрованих шарів та більш розвиненою топологією хімічних зв'язків у цьому кристалі. Оцінка величини усередненого масового ренормалізуючого фактора $\lambda_{iso}(\text{In}_4\text{Se}_3) = 0.03724$ також свідчить про зростання енергообміну між коливними та електронними станами.

Висновки

Базуючись на першопринципних розрахунках, нами отримані основні характеристики електрон-фононної взаємодії (ізотропний

параметр взаємодії електронної та фононної підсистем, спектральна функція Еліашберга та уширення фононних гілок) для об'ємних кристалів $\beta\text{-InSe}$ і In_4Se_3 . Такий підхід дає змогу прослідкувати за зміною інтенсивності електрон-фононної взаємодії по мірі ускладнення кристалічної структури та хімічного зв'язку у розглядуваних матеріалах. Проведене дослідження стимулює пошуки нових ефектів у кристалі In_4Se_3 , подібних до виявлених у моношарі InSe . Авторами [6] було показано, що завдяки сильному електрон-фононному зв'язку, зумовленого характером взаємодії особливих діркових станів з фононами, для даного низьковимірного InSe має місце аномальне зростання в нетрадиційних температурно-залежних оптичних збудженнях в середній спектральній області. Можна припустити, що аналогічний ефект в оптичній електропровідності буде очікуватись і в кристалі In_4Se_3 , в якому нами одержано вищий параметр електрон-фононної взаємодії у порівнянні з об'ємним $\beta\text{-InSe}$.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

- [1] Rhyee J.-S. Peierls distortion as a route to high thermoelectric performance in $\text{In}_4\text{Se}_{3-2d}$ / J.-S. Rhyee, E. Cho, S.I. Kim, E. Lee, Y.S. Kwon, J.H. Shim, G. Kotliar // Nature.— 2009.— V.459.— P. 965–968.
- [2] Lim Y.S. Condensation state and its effects on thermoelectric properties in In_4Se_3 / Y.S. Lim, M. Jeong, W.-S. Seo, J.-H. Lee, C.H. Park, M. Sznajder, L.Yu. Kharkhalis, D.M. Bercha, J. Jang // J.Phys.D.: Appl.Phys.— 2013.— V.46.— P.275304–275308.
- [3] Jeong M. Condensation-related thermoelectric properties and formation of coherent nano-inclusions in Te-substituted In_4Se_3 / M. Jeong, Y.S. Lim, W.-S. Seo, J.-H. Lee, Ch.-H. Park, M. Sznajder, L.Yu. Kharkhalis, D.M. Bercha, J. Yang // Journ. of Materials Chemistry A.— 2013.— V.1.— P.15342–15347.
- [4] Bercha D.M. Band Structure and Condensation States in In_4Se_3 Crystals / D.M. Bercha, L.Yu. Kharkhalis, A.I. Bercha, M. Sznajder // Phys. Stat. Sol (b).— 1997.— V.203.— P.427–440.
- [5] Sznajder M. Parameters of a unique condensation state in the structure of the In_4Se_3 crystal / M. Sznajder, Y. Lim, K. Glukhov, L. Kharkhalis, D. Bercha // Acta Physica Polonica A.— 2012.— V.122, № 6.— P.1115–1117.
- [6] Lugovskoi A.V. Strong electron-phonon coupling and its influence on the transport and optical properties of hole-doped single-layer InSe / A.V. Lugovskoi, M.I. Katsnelson, A.N. Rudenko // Physical Review Letters.— 2019.— V.123.— P.176401–176407.

- [7] Hamer M.J. Indirect to Direct Gap Crossover in Two-Dimensional InSe Revealed by Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy / M.J. Hamer, J. Zultak, A.V. Tyurnina, V. Zolyomi // ACS Nano.— 2019.— V.13.— P.2136–2142.
- [8] Sznajder M. Similarities of the band structure of In₄Se₃ and InSe under pressure and peculiarities of the creation of the band gap / M. Sznajder, K. Rushchanskii, L. Kharkhalis, D.M. Bercha // Phys. Stat. Sol. (b).— 2006.— V.243, No.3.— P.592–609.
- [9] Glukhov K.E. Elementary energy bands concept, band structure and peculiarities of bonding in β -InSe crystal / K.E. Glukhov, N.K. Tovstyuk // Phys.Stat.Sol. (b).— 2010.— V.247, No.2.— P.318–324.
- [10] Bercha D. Structure similarity and lattice dynamics of InSe and In₄Se₃ crystals / D. Bercha, K. Rushchanskii, and L. Kharkhalis // Condensed Matter Physics.— 2000.— V.3.— No.4.— P.749—757.
- [11] Gonze X. First-principles computation of material properties: the ABINIT software project / X. Gonze, J. Beuken, R. Caracas, F. Detraux, M. Fuchs, G. Rignanese, L. Sindic, G. Verstraete, G. Zerah, F. Jollet, M. Torrent, A. Roy, M. Mikami, P. Ghosez, J.-Y. Raty, and D. Allan// Comput. Mater. Sci.— 2002.— V.25.— P.478.
- [12] Payne M. Iterative minimization techniques for *ab initio* total-energy calculations: molecular dynamics and conjugate gradients / M. Payne, M. Teter, D. Allan, T. Arias and J. Joannopoulos // Rev. Mod. Phys.— 1992.— V.64.— P.1045–1097.
- [13] Hohenberg P. Inhomogeneous Electron Gas / P. Hohenberg, W. Kohn // Phys. Rev.— 1964.— V.136, № 3.— P.B864–B871.
- [14] Baroni S. Green's-function approach to linear response in solids / S. Baroni, P. Giannozzi, and A. Testa // Phys. Rev. Lett.— 1987.— V.59.— P.2662—2665.
- [15] Gonze X. First-principles responses of solids to atomic displacements and homogeneous electric fields: Implementation of a conjugate-gradient algorithm / X. Gonze // Phys. Rev. B.— 1997.— V.55.— P.10337–10354.
- [16] Dacorogna M.M. Self-Consistent Calculation of the q Dependence of the Electron-Phonon Coupling in Aluminum /M.M. Dacorogna, M.L. Cohen, and P.K. Lam, Phys. Rev. Lett.— 1985.— V.55.— P.837–840.
- [17] Lam P.K. Self-consistent calculation of electron-phonon couplings / P.K. Lam, M.M. Dacorogna, and M.L. Cohen// Phys. Rev. B.— 1986.— V.34.— P.5065–5069.
- [18] Savrasov S. Electron-phonon interactions and related physical properties of metals from linear-response theory / S. Savrasov and D. Savrasov // Phys. Rev. B.— 1996.— V.54.— P.16487–16501.

Стаття надійшла до редакції 25.11.2019

К.Е. Глухов, Л.Ю. Хархалис, Т.Я. Бабука, Н.В. Лях

Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, ул. Волошина, 54, Україна,
e-mail: lkharkhalis@gmail.com

Ab initio исследования электрон-фононного взаимодействия в халькогенидах индия

Впервые проведено первопринципные исследования электрон-фононного взаимодействия в слоистых кристаллах β -InSe и In_4Se_3 . Получены константы электрон-фононного взаимодействия, спектральные функции Элиашберга и уширение фононных ветвей. Рассчитанные величины изотропных параметров электрон-фононной связи демонстрируют количественное увеличение взаимодействия электронной и фононной подсистем при переходе от β -InSe до In_4Se_3 , что согласуется с возрастанием среднего перекрытия атомных функций. Установлено, что основной вклад в данные характеристики вносят высокочастотные оптические моды, ответственные за колебания в перпендикулярном к плоскости слоев направлении.

Ключевые слова: селениды индия, электрон-фононное взаимодействие, первопринципные расчеты, спектральная функция Элиашберга.

К.Е. Glukhov, L. Yu. Kharkhalis, T. Ya. Babuka, M. V. Liakh

Uzhhorod National University, 88000, Uzhhorod, Voshyna Str., 54, Ukraine,
e-mail: lkharkhalis@gmail.com

Ab initio investigations of the electron-phonon interaction in the indium selenides

Purpose. Nowadays, the indium selenides have attracted increasing attention since they are potential candidates for the applications of their physical properties in many devices. In particular, in the In_4Se_3 semiconductor, it was revealed a high thermoelectric figure of merit that opens its perspective for thermoelectrics. In the single layer of InSe, the unusual transport phenomena and optical properties have been observed. For both crystals, these anomalies are connected with the strong electron-phonon coupling owing to the peculiar character of electron states and their interaction with phonons. Therefore, for the bulk In_4Se_3 and β -InSe crystals, it is of interest to study the electron-phonon coupling which can play an important role in the physical properties of considered materials. The main aim of our paper is to carry out the investigation of the evolution of the electron-phonon interaction at the transition from the β -InSe crystal to the In_4Se_3 .

Methods. The program packet ABINIT with the application of the updated methodology of the density functional perturbation theory (DFPT).

Results. In our work, we calculated the phonon spectra, density of phonon states, the Eliashberg spectral function $2F(\omega)$, and electron-phonon coupling strength. The phonon linewidths $\Gamma_{\text{el-ph}}$ for phonon wavevectors along high symmetry directions in the Brillouin zone are obtained too.

Conclusion. According to our estimations, the parameters of electron-phonon interaction for In_4Se_3 are higher than for β -InSe that indicates an increase in energy exchange between vibrational and electronic states. This fact is connected with the stronger interaction between the corrugated layers and more complicated chemical bonding topology in In_4Se_3 in comparison with the β -InSe layered crystal. The main contribution in these characteristics is due to the high-frequency optical vibrations which are responsible for the oscillations in the perpendicular direction to the planes of the layers.

Keywords: indium selenides, electron-phonon interaction, first principles calculations, Eliashberg spectral function.

REFERENCES

- [1] Rhyee, J.-S., Cho, E., Kim, S.I., Lee, E., Kwon, Y.S., Shim, J.H., Kotliar, G. (2009), "Peierls distortion as a route to high thermoelectric performance in $\text{In}_4\text{Se}_{3-2d}$ ", *Nature*, Vol.459, pp. 965–968.
- [2] Lim, Y.S., Jeong, M., Seo, W.-S., Lee, J.-H., Park, C.H., Sznajder, M., Kharkhalis, L.Yu., Bercha, D.M., Jang, J. (2013), "Condensation state and its effects on thermoelectric properties in In_4Se_3 ", *J.Phys.D.: Appl.Phys.*, V.46, pp. 275304–275308.
- [3] Jeong, M., Lim, Y.S., Seo, W.-S., Lee, J.-H., Park, Ch.-H., Sznajder, M., Kharkhalis, L.Yu., Bercha, D.M., Yang, J. (2013), "Condensation-related thermoelectric properties and formation of coherent nanoinclusions in Te-substituted In_4Se_3 ", *Journ. of Materials Chemistry A.*, V.1., pp. 15342–15347.
- [4] Bercha, D.M., Kharkhalis, L.Yu., Bercha, A.I., Sznajder, M. (1997), "Band Structure and Condensation States in In_4Se_3 Crystals", *Phys. Stat. Sol (b)*. V. 203. pp.427–440.
- [5] Sznajder, M., Lim, Y., Glukhov, K., Kharkhalis, L., Bercha, D. (2012), "Parameters of a unique condensation state in the structure of the In_4Se_3 crystal", *Acta Physica Polonica A.*, V.122, No 6. pp. 1115–1117.
- [6] Lugovskoi, A.V., Katsnelson, M.I., Rudenko, A.N. (2019), "Strong electron-phonon coupling and its influence on the transport and optical properties of hole-doped single-layer InSe", *Physical Review Letters*, V. 123, pp. 176401–176407.
- [7] Hamer, M.J., Zultak, J., Tyurnina, A.V., Zolyomi, V. (2019), "Indirect to Direct Gap Crossover in Two-Dimensional InSe Revealed by Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy", *ACS Nano.*, V. 13, pp. 2136–2142.
- [8] Sznajder, M., Rushchanskii, K., Kharkhalis, L., Bercha, D.M. (2006), "Similarities of the band structure of In_4Se_3 and InSe under pressure and peculiarities of the creation of the band gap", *Phys. Stat. Sol. (b)*. V. 243, No.3. pp. 592–609.
- [9] Glukhov, K.E., Tovstyuk, N.K. (2010), "Elementary energy bands concept, band structure and peculiarities of bonding in β -InSe crystal", *Phys.Stat.Sol. (b)*., V. 247, No.2, pp. 318–324.
- [10] Bercha, D., Rushchanskii, K., Kharkhalis, L. (2000), "Structure similarity and lattice dynamics of InSe and In_4Se_3 crystals", *Condensed Matter Physics*, V.3, No.4, pp. 749–757.
- [11] Gonze, X., Beuken, J., Caracas, R., Detraux, F., Fuchs, M., Rignanese, G., Sindic, L., Verstraete, G., Zerah, G., Jollet, F., Torent, M., Roy, A., Mikami, M., Ghosez, P., Raty, J.-Y., Allan, D. (2002), "First-principles computation of material properties: the ABINIT software project", *Comput. Mater. Sci.*, V. 25, pp. 478.
- [12] Payne, M., Teter, M., Allan, D., Arias, T., Joannopoulos, J. (1992), "Iterative minimization techniques for *ab initio* total-energy calculations: molecular dynamics and conjugate gradients", *Rev. Mod. Phys.*, V. 64. pp. 1045–1097.
- [13] Hohenberg, P., Kohn, W. (1964), "Inhomogeneous Electron Gas", *Phys. Rev.*, V.136, No 3, pp. B864–B871.
- [14] Baroni, S., Giannozzi, P., Testa, A. (1987), "Green's-function approach to linear response in solids", *Phys. Rev. Lett.*, V. 59, pp. 2662–2665.

- [15] Gonze, X. (1997), "First-principles responses of solids to atomic displacements and homogeneous electric fields: Implementation of a conjugate-gradient algorithm", *Phys. Rev. B.*, V. 55, pp. 10337–10354.
- [16] Dacorogna, M.M., Cohen, M.L., Lam, P.K. (1985), "Self-Consistent Calculation of the q Dependence of the Electron-Phonon Coupling in Aluminum", *Phys. Rev. Lett.*, V. 55, pp. 837–840.
- [17] Lam, P.K., Dacorogna, M.M., Cohen, M.L. (1986), "Self-consistent calculation of electron-phonon couplings", *Phys. Rev. B.*, V. 34. pp. 5065–5069.
- [18] Savrasov, S., Savrasov, D. (1996), "Electron-phonon interactions and related physical properties of metals from linear-response theory", *Phys. Rev. B.*, V. 54, pp. 16487–16501.

©Ужгородський національний університет