


## Физика конденсированного состояния


Научная статья

УДК 538.915

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17401>

### ЭЛЕКТРОННАЯ ЗОННАЯ СТРУКТУРА ГЕКСАГОНАЛЬНЫХ ПОЛИТИПОВ КРЕМНИЯ

**А. А. Чижова** , **А. А. Никольская,**  
**Е. В. Зайцева, А. А. Конаков**

Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского,  
г. Нижний Новгород, Россия  
 [asyna271828@mail.ru](mailto:asyna271828@mail.ru)

**Аннотация.** Работа посвящена расчетам и анализу электронной зонной структуры для гексагональных (2H, 4H, 6H) и ромбоэдрических (9R, 15R, 21R) политипов кремния с использованием метода эмпирического псевдопотенциала (МЭП). Расчетные результаты для структур 3C, 2H и 4H хорошо согласуются с экспериментальными данными. Расчетные данные для структур 6H, 15R и 21R были получены и проанализированы впервые. Зонная структура для политипа 9R, рассчитанная МЭП, почти идентична полученной методом теории функционала плотности. Такой результат указывает на возможность применения МЭП для построения зонных схем различных политипов. Отмечены преимущества МЭП перед другими методами. Исследованы зависимости ширины прямой и непрямоугольной энергетических щелей от степени гексагональности кристаллов. Установлено частичное «выпрямление» зонной структуры при повышении этой степени у объектов.

**Ключевые слова:** кремний, зонная структура, метод псевдопотенциала, политип, гексагональность

**Финансирование.** Исследование выполнялось при финансовой поддержке Российского научного фонда (соглашение № 22-79-00281), а также в рамках госзадания FSWR-2023-0052.


**Для цитирования:** Чижова А. А., Никольская А. А., Зайцева Е. В., Конаков А. А. Электронная зонная структура гексагональных политипов кремния // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2024. Т. 17. № 4. С. 9–19. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17401>


Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17401>

### THE ELECTRONIC BAND STRUCTURE OF HEXAGONAL SILICON POLYTYPES

**A. A. Chizhova** , **A. A. Nikolskaya,**  
**E. V. Zaitseva, A. A. Konakov**

Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod, Nizhny Novgorod, Russia  
 [asyna271828@mail.ru](mailto:asyna271828@mail.ru)

**Abstract.** This work is devoted to calculations and an analysis of the electronic band structure (BS) for hexagonal (2H, 4H, 6H) and rhombohedral (9R, 15R, 21R) silicon polytypes

using the empirical pseudopotential method (EPM). The calculation results for 3C, 2H and 4H have been in good agreement with experimental data. The data for 6H, 15R and 21R were obtained and analyzed for the first time. The BS for the 9R polytype calculated by EPM was almost identical to that obtained by the density functional theory method. This result indicates the possibility of using EPM for constructing BSs of various polytypes. The advantages of EPM over others were noted. The dependences of the widths of the direct and indirect energy gaps on the of crystal hexagonality degree were also studied. A partial “straightening” of the BS was established with increasing this degree of the objects.

**Keywords:** silicon, band structure, pseudopotential method, polytype, hexagonality

**Funding:** The reported study was funded by Russian Science Foundation (Grant No. 22-79-00281), and also within the framework of the state assignment FSWR-2023-0052.

**For citation:** Chizhova A. A., Nikolskaya A. A., Zaitseva E. V., Konakov A. A., The electronic band structure of hexagonal silicon polytypes, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 17 (4) (2024) 9–19. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.17401>

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

## Введение

Различные модификации хорошо известных полупроводников, таких как кремний, привлекают внимание ученых в связи с поисками путей улучшения их излучательных свойств. В настоящее время уже получено большое количество различных политипов полупроводников IV группы [1], в частности ромбоэдрическая фаза кремния 9R [2]. На основании теоретических [3, 4] и экспериментальных [5] данных можно считать, что некоторые модификации способны обеспечивать более эффективное возбуждение люминесценции, по сравнению с алмазоподобной кубической фазой. Есть основания полагать, что в гексагональных политипах полупроводников IV группы происходит эффективное «выпрямление» зонной структуры [6]: ширина запрещенной зоны уменьшается, сокращается разница в энергии между минимумом в зоне проводимости и точкой  $\Gamma$  зоны Бриллюэна, вплоть до того, что полупроводник может стать прямозонным. В частности, германий в структуре лонсдейлита (2H) становится прямозонным материалом [6 – 10].

В данной работе акцент сделан на исследовании электронных свойств кремния, поскольку это основной материал микроэлектроники. Однако его применение в современных оптоэлектронных интегральных схемах затруднено в силу его непрямозонности: алмазоподобный кремний (с кубической структурой 3C) обладает низкой излучательной способностью, в связи с чем можно либо применять известные прямозонные материалы и при этом неизбежно сталкиваться с проблемами совместимости и быстродействия, либо искать способы модификации кремния. На данный момент опубликован ряд работ, в которых изложены методики получения и использования кремния в гексагональных фазах [5, 11 – 18].

Цель данного расчетного исследования – установить взаимосвязь кристаллической структуры с электронным зонным спектром для нескольких политипов кремния.

Расчеты проводились методом эмпирического псевдопотенциала, который достаточно точно описывает зонные структуры 3C- и 2H-политипов полупроводников IV группы [6] и ряда бинарных соединений [19]. При этом указанный метод впервые был использован для ромбоэдрических политипов.

## Метод эмпирического псевдопотенциала (МЭП)

Суть метода псевдопотенциала состоит в замене истинного потенциала валентных электронов более слабым эффективным потенциалом, называемым псевдопотенциалом [1].

Согласно методу, одноэлектронное уравнение Шрёдингера может быть записано в следующем виде:

$$\left( \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + V_p \right) \varphi_k(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) \varphi_k(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где  $\varphi_k$  – псевдоволновая функция,  $V_p$  – плавноизменяющийся кристаллический псевдопотенциал,  $E_n$  – собственные значения энергии электрона,  $\hat{\mathbf{p}}$  – оператор импульса,  $m_0$  – масса свободного электрона.

В общем случае  $V_p$  представляет собой линейную комбинацию атомных потенциалов  $V_a$ , и его можно выразить как сумму по векторам трансляции  $\mathbf{R}$  и атомных базисных векторов  $\boldsymbol{\tau}_j$  в элементарной ячейке:

$$V_p(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} \sum_{j=1}^N V_a(\mathbf{r} - \mathbf{R} - \boldsymbol{\tau}_j), \quad (2)$$

где  $N$  – количество атомов в элементарной ячейке.

Ввиду периодичности потенциал (2) может быть разложен в ряд Фурье:

$$V_p(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} V_0(\mathbf{G}) \exp(i\mathbf{G}\mathbf{r}), \quad (3)$$

где  $\mathbf{G}$  – векторы обратной решетки,  $V_0$  – коэффициенты Фурье.

Коэффициенты  $V_0$  можно определить как

$$V_0(\mathbf{G}) = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d\mathbf{r} V_p(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{G}\mathbf{r}), \quad (4)$$

где  $\Omega$  – объем элементарной ячейки кристалла.

Сумма по  $j$ -атомам в элементарной ячейке, фигурирующая в выражении (2), учтена в ряду (3) неявным образом.

Традиционно метод эмпирического псевдопотенциала применялся для тетраэдрических полупроводников [20]. В структуре алмаза С или цинковой обманки ZnS, на элементарную ячейку приходится два атома. При выборе начала отсчета между ними, базисные векторы можно записать как

$$\boldsymbol{\tau}_1 = -\boldsymbol{\tau}_2 \equiv \boldsymbol{\tau},$$

где  $\boldsymbol{\tau} = a_n \left\{ \frac{1}{8}, \frac{1}{8}, \frac{1}{8} \right\}$  (в единицах параметра решетки,  $a_c = 5,431 \text{ \AA}$  кубического кристалла).

В получившемся выражении Фурье-коэффициенты (4) можно переписать через симметричный  $V_S(\mathbf{G})$  и антисимметричный  $V_A(\mathbf{G})$  форм-факторы:

$$V_0(\mathbf{G}) = \cos(\mathbf{G}\boldsymbol{\tau}) V_S(\mathbf{G}) + \sin(\mathbf{G}\boldsymbol{\tau}) V_A(\mathbf{G}), \quad (5)$$

где  $\cos(\mathbf{G}\boldsymbol{\tau})$ ,  $\sin(\mathbf{G}\boldsymbol{\tau})$  – симметричный и антисимметричный структурные факторы, соответственно.

Форм-факторы рассматриваются как регулируемые параметры, которые подбираются так, чтобы рассчитанная зонная структура соответствовала доступным экспериментальным данным. Для материалов со структурой алмаза, в элементарной ячейке которых содержатся два одинаковых атома и присутствует центр симметрии,  $V_A(\mathbf{G}) = 0$  и структурный фактор остается единственным:  $\cos(\mathbf{G}\boldsymbol{\tau})$ .

Для описания политипов кремния с гексагональной и ромбоэдрической кристаллической структурой был использован псевдопотенциал следующего вида [6]:

$$V_p(\mathbf{r}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{G}} \sum_{j=1}^N V_f(\mathbf{G}) \exp[i\mathbf{G}(\mathbf{r} - \boldsymbol{\tau}_j)], \quad (6)$$

где форм-факторы псевдопотенциала определяются модельным выражением

$$V_f(\mathbf{G}) = \frac{x_1 \zeta + x_2}{1 + \exp(x_3 \zeta^2 + x_4)}, \quad (7)$$

в котором  $\zeta = \left| \mathbf{G} \cdot \frac{a_i}{2\pi} \right|^2$ , а набор параметров  $x_i$  ( $i = 1 \div 4$ ) подбирается так, чтобы в случае структуры алмаза совпадать с симметричными форм-факторами  $V_S(\mathbf{G})$  для кубического кремния.

Их значения, определенные в статье [6], приведены в табл. 1 ( $R_y$  – энергия Ридберга).

Таблица 1

**Значения форм-факторов псевдопотенциала для кремния [6]**

Параметр	Единица измерения	Значение параметра
$x_1$	$R_y$	8,2808
$x_2$		-54,1842
$x_3$	–	0,0116
$x_4$		4,7922

Примечание.  $R_y$  – ридберг (внесистемная единица энергии, соответствующая энергии ионизации атома водорода).

В структуре лонсдейлита (полиморфная модификация углерода типа вюрцита) ориентация связей, не параллельных направлению [0001], изменяется на каждом бислое, а периодичность возникает уже после двух бислоев (структура 2Н). В первом случае бислои можно условно назвать кубическими, во втором – гексагональными. В других гексагональных (Н) или ромбоэдрических (R) поли типах вдоль осей симметрии 3-го или 6-го порядков чередуются кубические и гексагональные бислои.

Далее полиморфные модификации будем классифицировать, в частности, степенью гексагональности, т. е. долей гексагональных бислоев в элементарной ячейке кристалла.

Полиморфные модификации были подобраны таким образом, чтобы можно было проследить изменения их зонной структуры в зависимости от степени гексагональности, начиная от кубической структуры 3С (0 %) и заканчивая структурой лонсдейлита 2Н (100 %).

В табл. 2 представлены следующие исходные расчетные параметры: степень гексагональности структуры, параметры элементарной ячейки  $a_0$  и  $c_0$  в гексагональной установке, а также количество плоских волн (является своим для каждого поли типа), использованных при расчете методом псевдопотенциала.

Разное число плоских волн для каждой структуры обусловлено изменением размеров зоны Бриллюэна. Отметим, что все структуры, для которых выполнялся расчет, являются центросимметричными.

Полученные расчетные результаты для 3С- и 2Н- структур сопоставлялись с экспериментальными данными. В частности, полученные значения ширины запрещенной зоны  $E_g$  и величины прямой энергетической щели  $E_d$  (в точке Г зоны Бриллюэна) для 3С-кремния составили 1,106 и 3,475 эВ соответственно, что неплохо согласуется с известными из эксперимента значениями 1,11 эВ [21] и 3,31 эВ [22], полученными при комнатной температуре.

Для фазы кремния 2Н нам не удалось найти литературных источников, содержащих систематически надежные результаты измерения параметров энергетической зонной структуры; вероятно, это связано с их метастабильностью. Однако мы сравнили результаты наших вычислений для 2Н-Si с имеющимися в литературе расчетными данными. В частности, наши расчетные значения  $E_g = 0,812$  эВ и  $E_d = 1,501$  эВ находятся в превосходном согласии с полученными ранее в работе [6] методом эмпирического псевдопотенциала, где  $E_g = 0,795$  эВ и  $E_d = 1,481$  эВ.

С помощью метода эмпирического псевдопотенциала мы построили зонные диаграммы для ряда политипов кремния. Расчеты выполнялись для кристаллических структур тригональной и гексагональной сингоний с осями симметрии 3-го и 6-го порядков соответственно. Такие политипы отличаются от политипа алмаза (кубическая структура) только способом соединения атомарных бислоев вдоль направления высокой симметрии.

В кубическом кремнии химические связи, не параллельные направлению [111], не изменяют своей ориентации, и периодичность вдоль этого направления достигается после трех бислоев (структура 3С).

Таблица 2

**Параметры для расчета электронных зонных структур  
различных поли типов кремния и их значения**

Параметр	Значение параметра для поли типа							
	3C	2H	4H	6H	9R	15R	21R	
Пространственная группа симметрии	<i>Fd-3m</i>	<i>R6<sub>3</sub>/mmc</i>			<i>R-3m</i>			
Степень гексагональности, %	0	100,00	50,00	33,33	66,66	40,00	28,57	
Параметры элементарной ячейки, Å:	$a_0$	5,431	3,836	3,806	3,810	3,819	3,819	3,819
	$c_0$	5,431	6,264	12,508	18,732	28,071	46,784	65,499
Количество плоских волн	259	273	343	525	1191	1327	1275	

На рис. 1 показаны зонные диаграммы, рассчитанные нами для гексагональных фаз кремния 4H и 6H. Зонную структуру 4H-кремния можно сравнить с зонной структурой, рассчитанной в работе [23] методом функционала плотности. Эти диаграммы, рассчитанные разными методами, имеют аналогичное строение: электронная структура 4H также является непрямозонной и минимум зоны проводимости находится возле M-точки. Значения  $E_g$  и  $E_d$ , полученные нами, хорошо согласуются с представленными в статье [23]:  $E_g = 1,24$  эВ и  $E_d = 1,85$  эВ. Различие результатов можно объяснить разницей методов, использованных для расчета, а также небольшим расхождением в исходных значениях параметров элементарной ячейки. Стоит отметить, что в статье [23] значения прямой и непрямой энергетических щелей представлены в сравнении с кубическим поли типом 3C, причем различия в энергиях для данных фаз аналогичны полученным нами.

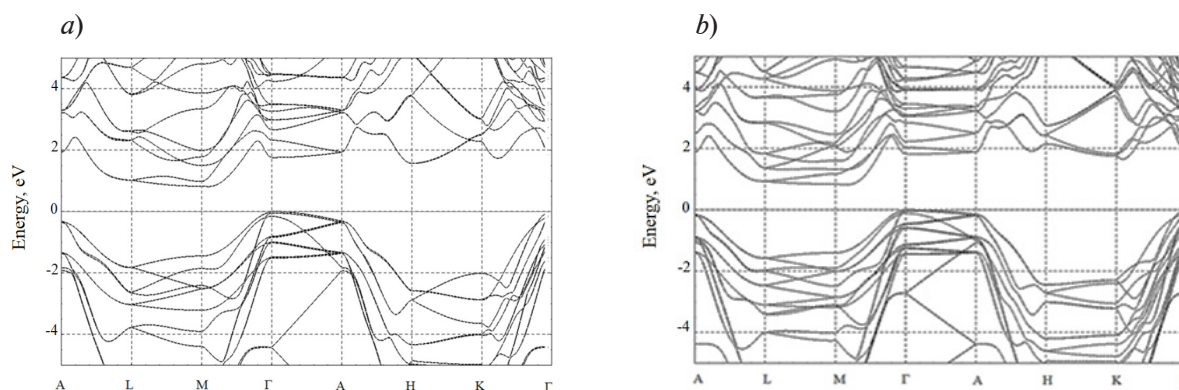


Рис. 1. Зонные структуры 4H-Si (a) и 6H-Si (b), минимумы зон проводимости лежат вблизи точек M.

$$E_g = 0,812 \text{ эВ}, E_d = 1,760 \text{ эВ (a)} \text{ и } E_g = 0,814 \text{ эВ}, E_d = 1,814 \text{ эВ (b)}$$



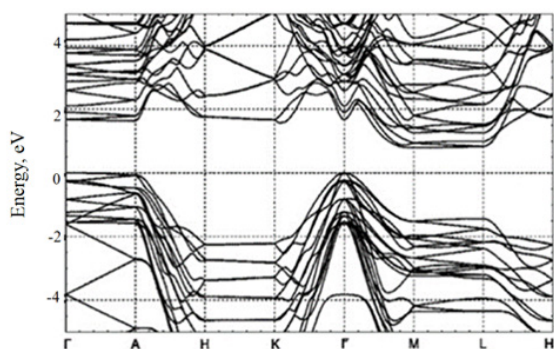


Рис. 2. Зонная структура объемного полита типа 9R-Si, рассчитанная по методу псевдопотенциала; минимум зоны проводимости лежит вблизи точки М.

$$E_g = 0,796 \text{ эВ}, E_d = 1,682 \text{ эВ}$$

На рис. 2 показана зонная диаграмма 9R-Si, рассчитанная нами с помощью метода псевдопотенциала, которую можно сравнить с таковой, полученной расчетным путем по методу теории функционала плотности (ТФП) [24]. Зонные схемы имеют подобное строение.

В табл. 3 представлены результаты расчетов энергии потолка валентной зоны  $E_v$  и дна зоны проводимости  $E_c$  для полита типа 9R-Si с использованием метода эмпирического псевдопотенциала.

Значения ширины запрещенной зоны, полученные расчетом по методу эмпирического псевдопотенциала, обычно оказываются несколько меньше, чем по методам теории функционала

Таблица 3

**Значения краев энергетической зоны в точках высокой симметрии полита типа 9R-Si, рассчитанные методом псевдопотенциала**

Точка высокой симметрии в зоне Бриллюэна	Энергия, эВ	
	$E_v$	$E_c$
Г	0	1,682
А	-0,075	1,644
Н	-2,247	1,762
К	-2,216	1,671
L	-1,435	0,836
М	-1,529	0,796

плотности, в частности, наши результаты для 9R-Si, которые составляют  $E_g = 0,796$  эВ и  $E_d = 1,682$  эВ, оказались меньше, по сравнению с  $E_g = 1,06$  эВ и  $E_d = 1,70$  эВ, рассчитанными из первых принципов. Такая разница может быть связана, во-первых, с тем, что использованный метод псевдопотенциала был параметризован по ширине запрещенной зоны 3C-Si при комнатной температуре, которая несколько ниже, чем при нулевой (1,11 против 1,17 эВ), во-вторых, связан с погрешностью использованного нами алгоритма переноса псевдопотенциалов с кубической фазы на гексагональные. В частности, метод ТФП более строго учитывает перераспределение электронной плотности и взаимодействие в системе валентных электронов, в то время как в МЭП моделируется суммарный псевдопотенциал электронов остова и валентных электронов. Тем не менее, метод псевдопотенциала позволяет получить довольно точную картину зонной структуры за значительно меньшее время и использование вычислительных ресурсов.

Важно отметить, что зонные диаграммы для некоторых политипов с гексагональной (6H-Si) и ромбоэдрической (15R-Si, 21R-Si) решетками (см. рис. 1, b и 3, соответственно) были рассчитаны впервые.

Если объединить данные, представленные на рис. 1 – 3, то можно построить график зависимости ширины запрещенной зоны энергий для кристаллов гексагональных политипов кремния от степени гексагональности кристалла, которая простирается от кубической 3C-фазы, обладающей нулевой «долей», до фазы лонсдейлита 2H со 100%-ой «долей»

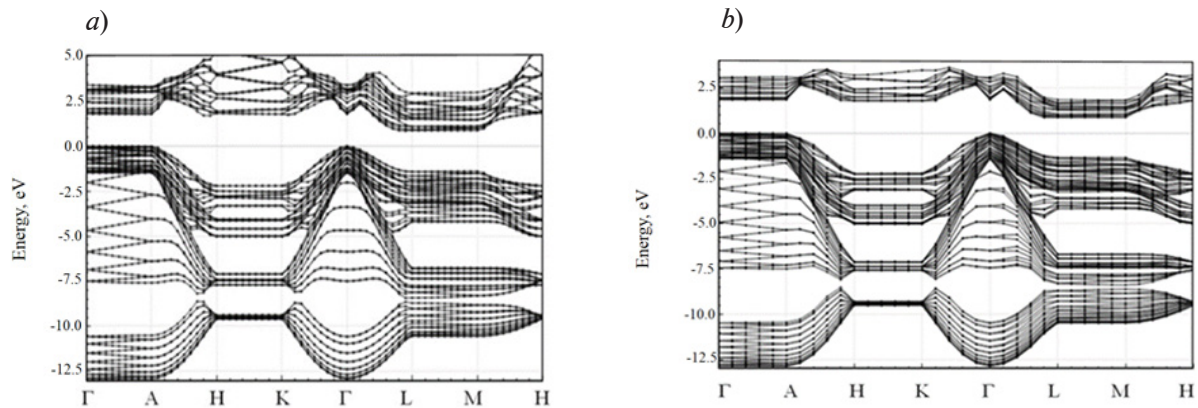


Рис. 3. Зонные структуры 15R-Si (a) и 21R-Si (b), минимумы зон проводимости лежат вблизи точек M.  
 $E_g = 0,839$  эВ,  $E_d = 1,770$  эВ (a) и  $E_g = 0,880$  эВ,  $E_d = 1,850$  эВ (b)

гексагональности (рис. 4). Видно, что повышение степени гексагональности элементарной ячейки приводит к уменьшению разницы между прямой и непрямой энергетическими щелями.

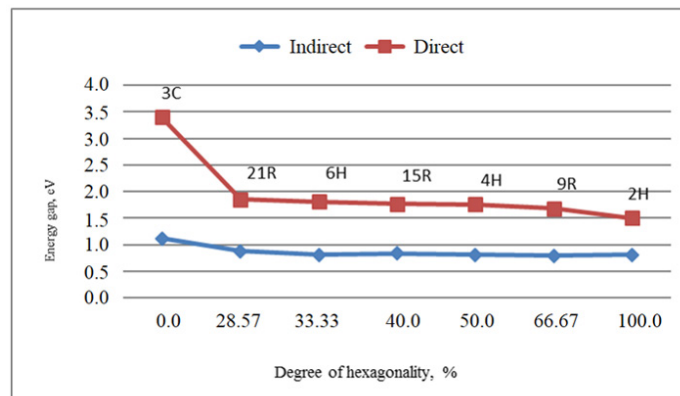


Рис. 4. Графики зависимости ширины запрещенной зоны и прямой энергетической щели в различных поли типах кремния от степени их гексагональности (рассчитаны методом эмпирического псевдопотенциала)

### Заключение

В работе проведен расчет зонной структуры для различных поли типов кремния с использованием метода эмпирического псевдопотенциала, который, как показывает опыт, проще в реализации и занимает существенно меньше машинного времени, чем, например, аналогичный расчет по методу теории функционала плотности. Для поли типов 2H, 4H, 3C и 9R результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными и подобными расчетами, выполненными в работах [6, 23, 24].

Выполненные расчеты для структур 4H, 6H, 9R, 15R и 21R позволили сделать несколько выводов.

Во-первых, все рассмотренные фазы кремния являются непрямозонными.

Во-вторых, повышение степени гексагональности элементарной ячейки приводит к уменьшению ширины запрещенной зоны (непрямой).

В-третьих, разница между прямой и непрямой энергетическими щелями оказывается меньше в случае большей степени гексагональности материала. Другими словами, увеличение степени гексагональности приводит к «выпрямлению» зонной структуры материала, что, однако, не позволяет полностью решить проблему непрямозонности кремниевой электронной структуры.

Для возможного решения данной проблемы следует рассмотреть твердый раствор германий-кремний, так как для германия наблюдается полное выпрямление зонной структуры уже для поли типа 9R [24].

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Wen B., Zhao J., Bucknum M. J., Yao P., Li T. First-principles studies of diamond polytypes // *Diamond and Related Materials*. 2008. Vol. 17. No. 3. Pp. 356–364.
2. Королев Д. С., Никольская А. А., Кривулин Н. О., Белов А. И., Михайлов А. Н., Павлов Д. А., Тетельбаум Д. И., Соболев Н. А., Kumar M. Формирование гексагональной фазы кремния 9R при ионной имплантации // *Письма в Журнал технической физики*. 2017. Т. 43. № 16. С. 87–92.
3. Rödl C., Sander T., Bechstedt F., Vidal J., Olsson P., Laribi S., Guillemoles J.-F. Wurtzite silicon as a potential absorber in photovoltaics: Tailoring the optical absorption by applying strain // *Physical Review B*. 2015. Vol. 92. No. 4. P. 045207.
4. Raffy C., Furthmüller J., Bechstedt J. Properties of hexagonal polytypes of group-IV elements from first-principles calculations // *Physical Review B*. 2002. Vol. 66. No. 7. P. 075201.
5. Bandet J., Despax B., Caumont M. Vibrational and electronic properties of stabilized wurtzite-like silicon // *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2002. Vol. 35. No. 3. Pp. 234–239.
6. De A., Pryor C. E. Electronic structure and optical properties of Si, Ge and diamond in the lonsdaleite phase // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2014. Vol. 26. No. 4. P. 045801.
7. Chen P.-S., Fan S.-T., Lan H.-S., Liu C. W. Band calculation of lonsdaleite Ge // *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2017. Vol. 50. No. 1. P. 015107.
8. Rödl C., Furthmüller J., Suckert J.R., Armuzza V., Bechstedt F., Botti S. Accurate electronic and optical properties of hexagonal germanium for optoelectronic applications // *Physical Review Materials*. 2019. Vol. 3. No. 3. P. 034602.
9. Suckert J. R., Rödl C., Furthmüller J., Bechstedt F., Botti S. Efficient strain-induced light emission in lonsdaleite germanium // *Physical Review Materials*. 2021. Vol. 5. No. 2. P. 024602.
10. Fadaly E. M. T., Dijkstra A., Suckert J. R., et al. Direct-bandgap emission from hexagonal Ge and SiGe alloys // *Nature*. 2020. Vol. 580. No. 7802. Pp. 205–209.
11. Zhang Y., Iqbal Z., Vijayalakshmi S., Grebel H. Stable hexagonal-wurtzite silicon phase by laser ablation // *Applied Physics Letters*. 1999. Vol. 75. No. 18. Pp. 2758–2760.
12. Nikolskaya A. A., Korolev D. S., Mikhaylov A. N., Belov A. I., Konakov A. A., Chigirinsky Yu. I., Sushkov A. A., Pavlov D. A., Tetelbaum D. I. Mechanism of formation of light-emitting silicon hexagonal phase 9R-Si // *Journal of Physics: Conference Series*. 2019. Vol. 1410. 20 December. P. 012037.
13. Scalise E., Sarikov A., Barbisan L., Marzegalli A., Migas D. B., Montalenti F., Miglio L. Thermodynamic driving force in the formation of hexagonal-diamond Si and Ge nanowires // *Applied Surface Science*. 2021. Vol. 545. 15 April. P. 148948.
14. Gordeeva T., Kulnitskiy B., Popov M., Ovsyannikov D., Blank V. High-pressure Si phases and the mutual orientation of their structures. HRTEM Studies // *Physics of Solid State*. 2021. Vol. 63. No. 6. Pp. 844–849.
15. Fan L., Yang D., Li D. A review on metastable silicon allotropes // *Materials*. 2021. Vol. 14. No. 14. P. 3964.
16. Кульницкий Б. А., Гордеева Т. А., Овсянников Д. А., Попов М. Ю., Бланк В. Д. Фазовые превращения элементов IV группы: углерод, кремний, германий при воздействии циклических напряжений до 6 ГПа // *Известия высших учебных заведений. Химия и химическая технология*. 2020. Т. 63. № 12. С. 10–15.
17. Lee Y., Woo Y., Lee D.-K., Kim I. Fabrication of quasi-hexagonal Si nanostructures and its application for flexible crystalline ultrathin Si solar cells // *Solar Energy*. 2020. Vol. 208. 15 September. Pp. 957–965.
18. Shin S., Kim K. H., Lee G. S., Lee J. H., Ahn H. S., Cha H. Y. Electrical properties of 2H-Si microwire grown by mixed-source hydride vapor phase epitaxy // *Results in Physics*. 2022. Vol. 40. September. P. 105857.
19. De A., Pryor C. E. Predicted band structures of III–V semiconductors in the wurtzite phase // *Physical Review B*. 2012. Vol. 81. No. 15. P. 155210.



20. **Cohen M. L., Bergstresser T. K.** Band structures and pseudopotential form factors for fourteen semiconductors of the diamond and zinc-blende structures // *Physical Review*. 1966. Vol. 141. No. 2. Pp. 789–796.
21. **Welber B., Kim C. K., Cardona M., Rodriguez S.** Dependence of the indirect energy gap of silicon on hydrostatic pressure // *Solid State Communications*. 1975. Vol. 17. No. 8. Pp. 1021–1024.
22. **Jellison G. E., Modine F. A.** Optical functions of silicon between 1.7 and 4.7 eV at elevated temperatures // *Physical Review B*. 1983. Vol. 27. No. 12. P. 7466.
23. **Zhang X., Kioupakis E.** Electronic, direct optical, and phonon-assisted optical properties of 4H Si from first principles // *AIP Advances*. 2024. Vol. 14. No. 3. P. 035149.
24. **Nikolskaya A. A., Korolev D. S., Mikhaylov A. N., et al.** Light-emitting 9R-Si phase formed by Kr<sup>+</sup> ion implantation into SiO<sub>2</sub>/Si substrate // *Applied Physics Letters*. 2018. Vol. 113. No. 18. P. 182103.

## REFERENCES

1. **Wen B., Zhao J., Bucknum M. J., et al.**, First-principles studies of diamond polytypes, *Diam. Relat. Mater.* 17 (3) (2008) 356–364.
2. **Korolev D. S., Nikolskaya A. A., Krivulin N. O., et al.**, Formation of hexagonal 9R silicon polytype by ion implantation, *Techn. Phys. Lett.* 43 (8) (2017) 767–769.
3. **Rödl C., Sander T., Bechstedt F., et al.**, Wurtzite silicon as a potential absorber in photovoltaics: Tailoring the optical absorption by applying strain, *Phys. Rev. B*. 92 (4) (2015) 045207.
4. **Raffy C., Furthmüller J., Bechstedt J.**, Properties of hexagonal polytypes of group-IV elements from first-principles calculations, *Phys. Rev. B*. 66 (7) (2002) 075201.
5. **Bandet J., Despax B., Caumont M.**, Vibrational and electronic properties of stabilized wurtzite-like silicon, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 35 (3) (2002) 234–239.
6. **De A., Pryor C. E.**, Electronic structure and optical properties of Si, Ge and diamond in the lonsdaleite phase, *J. Phys. Cond. Matt.* 26 (4) (2014) 045801.
7. **Chen P.-S., Fan S.-T., Lan H.-S., Liu C. W.**, Band calculation of lonsdaleite Ge, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 50 (1) (2017) 015107.
8. **Rödl C., Furthmüller J., Suckert J.R., et al.**, Accurate electronic and optical properties of hexagonal germanium for optoelectronic applications, *Phys. Rev. Mater.* 3 (3) (2019) 034602.
9. **Suckert J. R., Rödl C., Furthmüller J., et al.**, Efficient strain-induced light emission in lonsdaleite germanium, *Phys. Rev. Mater.* 5 (2) (2021) 024602.
10. **Fadaly E. M. T., Dijkstra A., Suckert J. R., et al.**, Direct-bandgap emission from hexagonal Ge and SiGe alloys, *Nature*. 580 (7802) (2020) 205–209.
11. **Zhang Y., Iqbal Z., Vijayalakshmi S., Grebel H.**, Stable hexagonal-wurtzite silicon phase by laser ablation, *Appl. Phys. Lett.* 75 (18) (1999) 2758–2760.
12. **Nikolskaya A. A., Korolev D. S., Mikhaylov A. N., et al.**, Mechanism of formation of light-emitting silicon hexagonal phase 9R-Si, *J. Phys. Conf. Ser.* 1410 (20 Dec) (2019) 012037.
13. **Scalise E., Sarikov A., Barbisan L., et al.**, Thermodynamic driving force in the formation of hexagonal-diamond Si and Ge nanowires, *Appl. Surf. Sci.* 545 (15 April) (2021) 148948.
14. **Gordeeva T., Kulnitskiy B., Popov M., et al.**, High-pressure Si phases and the mutual orientation of their structures. HRTEM studies, *Phys. Solid State*. 63 (6) (2021) 844–849.
15. **Fan L., Yang D., Li D.**, A review on metastable silicon allotropes, *Materials*. 14 (14) (2021) 3964.
16. **Kulnitskiy B. A., Gordeeva T. A., Ovsyannikov D. A., et al.**, Phase transformations of group IV elements: carbon, silicon, germanium after treatment under cyclic stresses up to 6 GPa, *Chem. Chem. Tech.* 63 (12) (2020) 10–15 (in Russian).
17. **Lee Y., Woo Y., Lee D.-K., Kim I.**, Fabrication of quasi-hexagonal Si nanostructures and its application for flexible crystalline ultrathin Si solar cells, *Sol. Energy*. 208 (15 Sept) (2020) 957–965.
18. **Shin S., Kim K. H., Lee G. S., et al.**, Electrical properties of 2H-Si microwire grown by mixed-source hydride vapor phase epitaxy, *Res. Phys.* 40 (Sept) (2022) 105857.
19. **De A., Pryor C. E.**, Predicted band structures of III–V semiconductors in the wurtzite phase, *Phys. Rev. B*. 81 (15) (2012) 155210.
20. **Cohen M. L., Bergstresser T. K.**, Band structures and pseudopotential form factors for fourteen semiconductors of the diamond and zinc-blende structures, *Phys. Rev.* 141 (2) (1966) 789–796.

21. Welber B., Kim C. K., Cardona M., Rodriguez S., Dependence of the indirect energy gap of silicon on hydrostatic pressure, *Solid State Commun.* 17 (8) (1975) 1021–1024.
22. Jellison G. E., Modine F. A., Optical functions of silicon between 1.7 and 4.7 eV at elevated temperatures, *Phys. Rev. B.* 27 (12) (1983) 7466.
23. Zhang X., Kioupakis E., Electronic, direct optical, and phonon-assisted optical properties of 4H Si from first principles, *AIP Advances.* 14 (3) (2024) 035149.
24. Nikolskaya A. A., Korolev D. S., Mikhaylov A. N., et al., Light-emitting 9R-Si phase formed by Kr<sup>+</sup> ion implantation into SiO<sub>2</sub>/Si substrate, *Appl. Phys. Lett.* 113 (18) (2018) 182103.

#### СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

**ЧИЖОВА Анастасия Андреевна** – младший научный сотрудник кафедры теоретической физики Нижегородского государственного университета имени Н. И. Лобачевского, г. Нижний Новгород, Россия.

603950, Россия, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23  
asyna271828@mail.ru  
ORCID: 0009-0000-1236-0319

**НИКОЛЬСКАЯ Алена Андреевна** – кандидат физико-математических наук, младший научный сотрудник кафедры теоретической физики Нижегородского государственного университета имени Н. И. Лобачевского, г. Нижний Новгород, Россия.

603950, Россия, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23  
alena.nikolskaya.1994@mail.ru  
ORCID: 0000-0001-6059-6684

**ЗАЙЦЕВА Екатерина Владимировна** – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры квантовых и нейроморфных технологий Нижегородского государственного университета имени Н. И. Лобачевского, г. Нижний Новгород, Россия.

603950, Россия, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23  
evzaitseva@mail.ru  
ORCID: 0009-0009-4269-4585

**КОНАКОВ Антон Алексеевич** – кандидат физико-математических наук, заведующий кафедрой квантовых и нейроморфных технологий Нижегородского государственного университета имени Н. И. Лобачевского, г. Нижний Новгород, Россия.

603950, Россия, г. Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23  
konakov\_anton@mail.ru  
ORCID: 0000-0001-8850-2651

#### THE AUTHORS

**CHIZHOVA Anastasia A.**

*Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod*  
23 Gagarin Ave., Nizhny Novgorod, 603950, Russia  
asyna271828@mail.ru  
ORCID: 0009-0000-1236-0319

**NIKOLSKAYA Alena A.**

*Lobachevsky State University of Nizhny Novgorod*  
23 Gagarin Ave., Nizhny Novgorod, 603950, Russia  
alena.nikolskaya.1994@mail.ru  
ORCID: 0000-0001-6059-6684

**ZAITSEVA Ekaterina V.**

*Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod*  
23 Gagarin Ave., Nizhny Novgorod, 603950, Russia  
evzaitseva@mail.ru  
ORCID: 0009-0009-4269-4585

**KONAKOV Anton A.**

*Lobachevsky State University of Nizhni Novgorod*  
23 Gagarin Ave., Nizhny Novgorod, 603950, Russia  
konakov\_anton@mail.ru  
ORCID: 0000-0001-8850-2651

*Статья поступила в редакцию 23.05.2024. Одобрена после рецензирования 04.07.2024.  
Принята 04.07.2024.  
Received 23.05.2024. Approved after reviewing 04.07.2024. Accepted 04.07.2024.*