

УДК 544.225

<https://doi.org/10.32362/2500-316X-2025-13-4-47-54>

EDN STUTJW



НАУЧНАЯ СТАТЬЯ

Первопринципный расчет электронной структуры монослоя CeI_3

Е.Т. Мирзоева,
А.В. Кудрявцев [®]

МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, 119454 Россия

[®] Автор для переписки, e-mail: kudryavcev_a@mirea.ru

• Поступила: 15.01.2025 • Доработана: 14.02.2025 • Принята к опубликованию: 15.05.2025

Резюме

Цели. Двумерные магнетики, благодаря своим уникальным характеристикам и качественно новым физическим свойствам по сравнению с объемными структурами, обладают значительным потенциалом для применения в спинтронике и магнитных запоминающих устройствах. Теоретические исследования двумерных магнитных структур позволяют сузить область поиска новых соединений и дополнить экспериментальные данные. Целью данной работы является теоретический расчет электронной структуры двумерного магнетика CeI_3 , включающий учет хаббардовского отталкивания на узле, расчет парциальной плотности электронных состояний и расчет распределения спиновых и зарядовых плотностей.

Методы. Расчеты электронной структуры монослоя CeI_3 выполнены с использованием программного пакета VASP в рамках теории функционала плотности, а также в рамках теории функционала плотности с учетом поправки Хаббарда. Для учета поправки Хаббарда использовался метод Дударева.

Результаты. Рассчитаны энергетические плотности электронных состояний и величины запрещенных зон для ферро- и антиферромагнитной конфигураций материала, равные соответственно 1.98 и 2.08 эВ. Для оценки влияния корреляционных эффектов проведен расчет плотностей состояний как с учетом поправки Хаббарда, так и без него. Определено, что в основном магнитном состоянии система проявляет антиферромагнитное упорядочение спиновой подсистемы. Разница полных энергий с ферромагнитной конфигурацией составила 2.8 мэВ на формульную единицу.

Выводы. Учет поправки Хаббарда наглядно продемонстрировал наличие характерной для полупроводниковых материалов запрещенной зоны. Полученные ширины запрещенной зоны для ферромагнитной и антиферромагнитной конфигураций системы относятся к диапазону видимого света, что открывает возможности использования двумерного CeI_3 в качестве люминесцентного материала в устройствах с магнитным управлением излучения. Представленные результаты согласуются с обобщенными результатами экспериментальных исследований соединений на основе церия. Учет корреляционных эффектов и поляризации по спину в представленных расчетах открывает горизонт для дальнейшего изучения магнитных свойств монослоя CeI_3 для технологических применений в области двумерного магнетизма.

Ключевые слова: двумерный магнетизм, теория функционала плотности, поправка Хаббарда, редкоземельные металлы, плотность электронных состояний, люминесценция

Для цитирования: Мирзоева Е.Т., Кудрявцев А.В. Первопринципный расчет электронной структуры моно-слоя CeI₃. *Russian Technological Journal*. 2025;13(4):47–54. <https://doi.org/10.32362/2500-316X-2025-13-4-47-54>, <https://www.elibrary.ru/STUTJW>

Прозрачность финансовой деятельности: Авторы не имеют финансовой заинтересованности в представленных материалах или методах.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

RESEARCH ARTICLE

Ab initio calculations of the electronic structure of CeI₃ monolayer

Elizaveta T. Mirzoeva,
Andrey V. Kudryavtsev @

MIREA – Russian Technological University, Moscow, 119454 Russia
@ Corresponding author, e-mail: kudryavcev_a@mirea.ru

• Submitted: 15.01.2025 • Revised: 14.02.2025 • Accepted: 15.05.2025

Abstract

Objectives. In comparison with three-dimensional structures, two-dimensional (2D) magnetic materials are promising for use in spintronics and magnetic storage devices due to their exceptional characteristics and qualitatively different physical properties. Theoretical studies into 2D magnetic structures pave the way for the development of new compounds based on experimental data. In this work, we carry out a theoretical calculation of the electronic structure of a CeI₃ 2D-magnetic material, taking into account the Hubbard repulsion at the site, the partial density of electronic states (DOS), and the distribution of spin and charge densities.

Methods. Calculations of the electronic structure of the CeI₃ monolayer were performed using density functional theory (DFT) and the Hubbard U scheme in the VASP software environment. The Dudarev method was used to account for the Hubbard correction.

Results. The calculated densities of the electronic states and the bandgap values for the ferro- and antiferromagnetic configurations of the material were found to be 1.98 and 2.08 eV, respectively. To assess the influence of correlation effects, the DOS was calculated both with and without the Hubbard correction. It was determined that the system in the ground magnetic state exhibits an antiferromagnetic ordering of the spin subsystem. The difference in the total energies of the antiferro- and ferromagnetic configurations was 2.8 meV per formula unit.

Conclusions. The calculations based on the Hubbard correction clearly demonstrated the presence of a bandgap, which is typical of semiconductor materials. The obtained bandgaps for the ferromagnetic and antiferromagnetic configurations of the system belong to the visible light range, which offers the opportunity of using 2D CeI₃ as a luminescent material in devices with a magnetically controlled emission. To assess the influence of correlation effects, the DOS was calculated both with and without the Hubbard correction. The obtained results agree with those obtained in experimental studies of cerium compounds. The consideration of correlation effects and spin polarization in the presented calculations forms the basis for further research into the magnetic properties of the CeI₃ monolayer for technological applications in the field of 2D magnetism.

Keywords: two-dimensional magnetism, 2D magnetism, density functional theory, DFT, Hubbard correction, rare-earth metals, density of electronic states, luminescence

For citation: Mirzoeva E.T., Kudryavtsev A.V. *Ab initio* calculations of the electronic structure of CeI_3 monolayer. *Russian Technological Journal*. 2025;13(4):47–54. <https://doi.org/10.32362/2500-316X-2025-13-4-47-54>, <https://www.elibrary.ru/STUTJW>

Financial disclosure: The authors have no financial or proprietary interest in any material or method mentioned.

The authors declare no conflicts of interest.

ВВЕДЕНИЕ

Широким классом новых низкоразмерных материалов являются двумерные магнетики. Данные материалы обладают рядом уникальных свойств, перспективных с практической точки зрения. Одно из таких свойств – магнитная анизотропия, которая дает возможность управления свойствами системы путем изменения направления внешнего магнитного поля [1]. Она имеет большое значение для двумерного ферромагнетизма, т.к. позволяет избежать случайного перераспределения спина из-за тепловых флуктуаций. К другим важным свойствам систем на основе двумерных магнетиков относятся эффект магнитной близости [2], формирование скирмионов [3], квантовый аномальный эффект Холла [4] гигантское магнетосопротивление [5] и т.д.

В связи с этим двумерные магнетики являются перспективными материалами для применения в устройствах спинтроники и магнитной памяти [6–8]. Экспериментальные исследования подтверждают наличие дальнего магнитного упорядочения в данных материалах [9, 10], несмотря на то, что теорема Мермина – Вагнера говорит о невозможности магнитного порядка в двумерных системах при температуре выше нулевой [11].

Актуальной задачей является поиск материалов и соединений, обладающих набором практически важных свойств. Несмотря на то, что объемные соединения могут быть хорошо изучены как экспериментально, так и теоретически, их двумерные аналоги могут обладать качественно новыми физическими свойствами, при этом экспериментальное изучение данных свойств может сталкиваться с техническими трудностями. Важной задачей в данном контексте является расчет физических свойств материала на основе его структуры из первых принципов (*ab initio*). Мощным теоретическим инструментом являются расчеты в рамках теории функционала плотности (density functional theory, DFT).

В данной работе проводится первопринципный расчет физических свойств двумерного CeI_3 , обладающего орторомбической симметрией. Помимо таких хорошо изученных двумерных материалов, как диалькогениды переходных металлов [12], ведется поиск новых двумерных соединений, перспективных с точки зрения применения их люминесцентных

свойств. К подобным соединениям относятся и двумерные материалы на основе редкоземельных элементов [13, 14]. При этом переходы $5d-4f$ в атоме Се обладают коротким временем жизни порядка 17 нс, что способствует высокой эффективности люминесценции [15]. Магнитные свойства двумерных магнетиков обусловлены частично заполненными электронными d - и f -оболочками. Таким образом, информация о магнитных свойствах двумерного CeI_3 может открыть путь не только для его потенциального применения в спинтронике, но и для создания оптических устройств с магнитным управлением излучения.

МЕТОДИКА РАСЧЕТА

Расчеты проводились с использованием коммерчески доступного программного обеспечения для первопринципного моделирования *VASP* (Vienna *Ab initio* Simulation Package). *VASP* – широко используемый пакет, позволяющий проводить расчеты на основе теории функционала электронной плотности [16] и предназначенный для вычисления свойств материалов в основном состоянии (полной энергии, зонной структуры, плотности электронных состояний, фононных спектров и т.д.) путем решения уравнений Кона – Шэма.

В представленных расчетах обменно-корреляционная энергия электронов аппроксимируется с помощью обобщенного градиентного приближения (GGA – generalized gradient approximation) с использованием функционала типа PBE (Perdew – Burke – Ernzerhof) [17]. Электронно-ионные взаимодействия описываются на основе метода проективно присоединенных волн (project augmented wave, PAW) [18]. Для задания 2D-структуры в рамках трехмерных граничных условий было добавлено псевдовакуумное пространство $25 \text{ \AA}$, чтобы исключить взаимодействие между слоями при трансляции элементарной ячейки. Энергия обрезания базиса плоских волн была установлена равной 320 эВ. Для интегрирования по зоне Бриллюэна использовалась гамма-центрированная сетка k -точек размером $16 \times 16 \times 1$ для релаксации структуры, $20 \times 20 \times 1$ для самосогласованного расчета и $26 \times 26 \times 1$ для расчета плотности электронных состояний. Релаксация кристаллической структуры проводилась до тех пор, пока суммарные силы, действующие на каждый атом, не становились

меньше 0.001 эВ/Å. Релаксация электронных степеней свободы прекращалась, когда разница энергий между двумя итерациями расчета становилась меньше 10^{-6} эВ. Для учета сил Ван-дер-Ваальса использовалась полуклассическая дисперсионная поправка, известная как DFT-D3 с функцией демпфирования Беке – Джонсона [19].

Для редкоземельных металлов необходимо учитывать отталкивание локализованных (сильно коррелированных) электронных оболочек *d* и *f*. С целью повышения точности искомых параметров в расчете учитывалось хаббардовское отталкивание (DFT+U). DFT+U-расчет подразумевает разделение локализованных *d*- и *f*-электронов, для которых учитывается поправка Хаббарда, и делокализованных *s*- и *p*-электронов. Для учета поправки Хаббарда использовался подход Дударева и др. [20]:

$$E_{\text{DFT+U}} = E_{\text{DFT}} + \frac{U - J}{2} \times \sum_{\sigma} \left[\left(\sum_{m_1} n_{m_1, m_2}^{\sigma} \right) - \left(\sum_{m_1, m_2} n_{m_1, m_2}^{\sigma} n_{m_2, m_1}^{\sigma} \right) \right], \quad (1)$$

где m_1, m_2 – магнитные квантовые числа ($m_1, m_2 = -3, -2, \dots, 3$ в случае электронов *f*-оболочек); n_{m_1, m_2}^{σ} – матричный элемент матрицы плотности со спином σ ; U – параметр, характеризующий кулоновское отталкивание на узле, принятый равным 5.1 эВ для Ce-4*f*; J – параметр, характеризующий межузельное отталкивание *d*-и *f*-электронов [21, 22].

Первое слагаемое E_{DFT} отвечает за энергию делокализованных *s*- и *p*-электронов, стандартно рассчитанную на основе теории функционала плотности в обобщенном градиентном приближении. Второе слагаемое отвечает за учет электрон-электронного взаимодействия (поправку Хаббарда) для локализованных *d*- и *f*-электронов.

Визуализация кристаллической структуры, спиновых и зарядовых плотностей в представленной работе выполнена с помощью программного обеспечения VESTA [23]. Для обработки полученных в ходе DFT-расчета данных используется программное обеспечение VASPKIT [24].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

В работе рассчитаны энергетические плотности электронных состояний и значения запрещенных зон для ферромагнитной (ФМ) и антиферромагнитной (АФМ) конфигураций материала и определена конфигурация с минимальной полной энергией. Элементарная ячейка монослоя CeI₃ содержит в себе 2 атома церия и 6 атомов йода. Кристаллическая структура относится к орторомбическому типу

с параметрами решетки 4.32×9.98 Å и псевдовакуумным пространством 25 Å (рис. 1). Желтым цветом отмечены атомы церия, фиолетовым – атомы йода, модельная ячейка обозначена сплошными черными линиями.

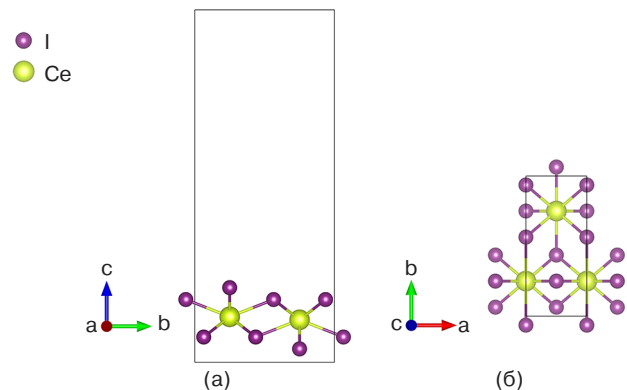


Рис. 1. Монослой CeI₃: (а) вид сбоку, (б) вид сверху

Полученные в рамках теории функционала плотности без учета поправки Хаббарда (DFT-расчет) зависимости парциальных и полной плотностей электронных состояний от энергии для ФМ-конфигурации представлены на рис. 2.

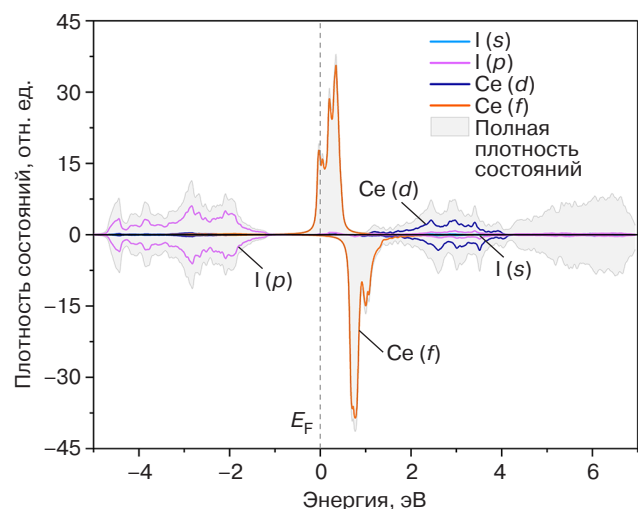


Рис. 2. Плотность электронных состояний монослоя CeI₃ для ФМ-конфигурации (DFT-расчет): заполненная фигура – полная плотность состояний, голубой цвет – вклад *s*-состояний йода, фиолетовый цвет – вклад *p*-состояний йода, синий цвет – вклад *d*-состояний церия, оранжевый цвет – вклад *f*-состояний церия. E_F – энергия Ферми

На представленной зависимости плотности состояний не наблюдается запрещенной зоны энергий, характерной для полупроводников, хотя двумерный CeI₃ предположительно является полупроводниковым материалом. Такое расхождение связано с неправильным учетом корреляционных эффектов для локализованных электронов внешних оболочек церия в рамках стандартной теории функционала плотности.

Для решения этой проблемы были введены поправки Хаббарда в рамках метода Дударева. Данный метод является оптимальным с точки зрения вычислений.

Стоит отметить, что общий вид данных зависимостей по своей структуре аналогичен зависимости плотности электронных состояний для трехмерного кристалла CeI_3 , представленной в работе [25]. В данной работе валентная зона образована p -состояниями йода, зона проводимости образована d -состояниями церия, а $4f$ -состояния церия расположены в области запрещенной зоны энергий. Однако расчеты в упомянутой работе были проведены, как указано выше, для трехмерного материала и без учета корреляционных эффектов, а также без учета поляризации по спину. Это делает невозможным дальнейшее изучение магнитных свойств, в отличие от расчетов, представленных в данной статье.

Зависимости плотностей электронных состояний монослоя CeI_3 , полученные в рамках теории функционала плотности с учетом поправки Хаббарда (DFT+U), представлены на рис. 3. Как и предполагалось, материал является полупроводником с запрещенной зоной, равной ~ 1.9 эВ и находящейся между p -оболочками йода и f -оболочками церия. Полученное значение ширины запрещенной зоны согласуется с обобщенными результатами экспериментальных исследований соединений на основе редкоземельных элементов, в т.ч. на основе церия [26, 27].

Церий – первый элемент, у которого появляются занятые состояния на f -оболочке, что подтверждается наличием соответствующего пика в области валентной зоны, т.е. относящегося к занятым состояниям. Общий вид плотности электронных состояний характерен для ферри- или ферромагнитной структуры с двумя не полностью компенсирующими друг друга спиновыми подсистемами.

Для расчета АФМ-конфигурации была сгенерирована структурная суперячейка размером 2×2 элементарных ячеек, включающая в себя 8 атомов церия и 24 атома йода, а также проведен расчет ФМ-суперячейки для сравнительного анализа и дальнейшего определения типа магнитного упорядочения, соответствующего минимальной полной энергии.

В результате DFT+U расчетов получены плотности электронных состояний (рис. 4), распределения спиновой плотности (рис. 5) для ФМ- и АФМ-конфигураций, а также общий вид распределения зарядовой плотности (рис. 6).

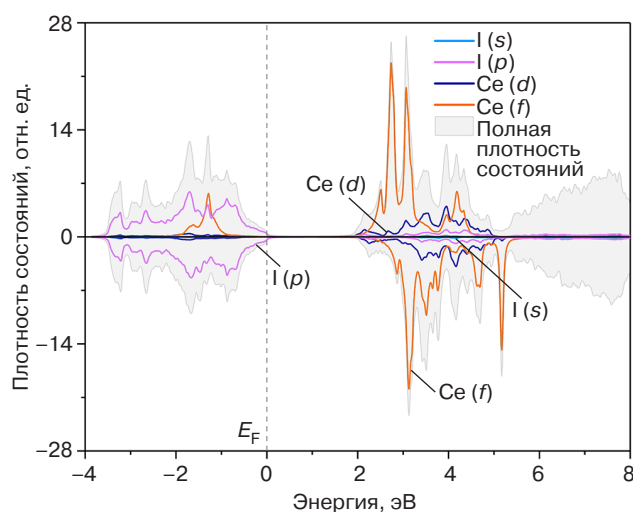


Рис. 3. Плотность электронных состояний монослоя CeI_3 с учетом поправки Хаббарда (DFT+U-расчет): заполненная фигура – полная плотность состояний, голубой цвет – вклад s -состояний йода, фиолетовый цвет – вклад p -состояний йода, синий цвет – вклад d -состояний церия, оранжевый цвет – вклад f -состояний церия

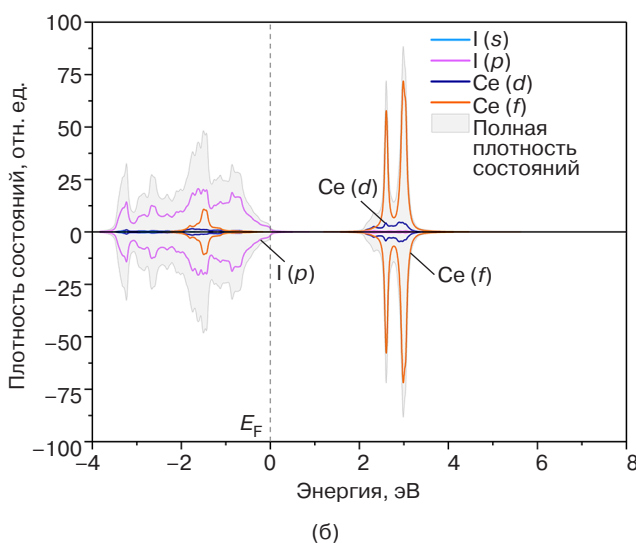
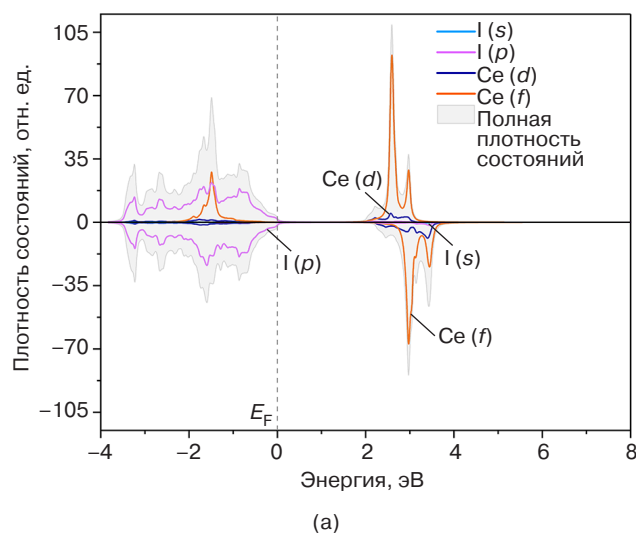


Рис. 4. Плотность электронных состояний монослоя CeI_3 в (а) ФМ- и (б) АФМ-конфигурациях: заполненная фигура – полная плотность состояний, голубой цвет – вклад s -состояний йода, фиолетовый цвет – вклад p -состояний йода, синий цвет – вклад d -состояний церия, оранжевый цвет – вклад f -состояний церия

Как видно из представленных зависимостей плотности электронных состояний, ширина запрещенной зоны энергии для АФМ-конфигурации составляет порядка 2.08 эВ, а для ФМ-конфигурации – 1.98 эВ. Полученные значения ширины запрещенной зоны соответствуют диапазону видимого света.

Для определения основного магнитного состояния необходимо найти разницу между полными энергиями АФМ- и ФМ-конфигураций:

$$\Delta E = E_{\text{АФМ}} - E_{\text{ФМ}} = -2.8 \text{ мэВ.} \quad (2)$$

Отрицательное значение свидетельствует о том, что АФМ-конфигурация является энергетически наиболее выгодной для исследуемой структуры, т.е. обладает меньшей энергией. Различные значения полной энергии связаны с разными вкладами кулоновского отталкивания между параллельными и антипараллельными спинами внешних оболочек системы.

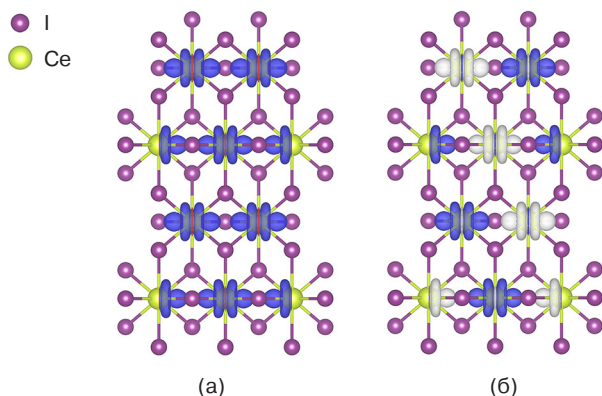


Рис. 5. Распределения спиновых плотностей в суперъячейке CeI₃ для (а) ФМ- и (б) АФМ-конфигураций для изоповерхностей $\pm 0.0009 \text{ е/Å}^3$: синий цвет – спиновая поляризация со спином вверх (spin-up), белый цвет – со спином вниз (spin-down)

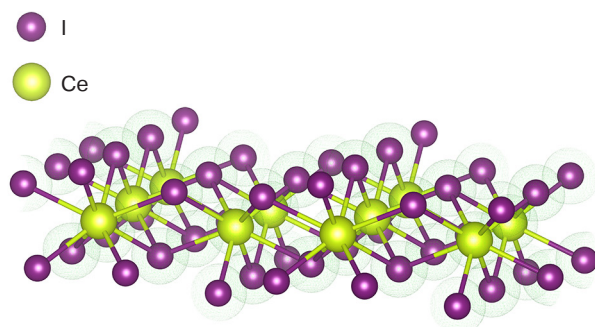


Рис. 6. Распределение зарядовой плотности в суперъячейке CeI₃ для изоповерхности 0.066 е/Å^3 . Изоповерхности обозначены светло-зеленым цветом

Распределение спиновой плотности для обеих конфигураций (рис. 5) имеет вид «гантели», сосредоточенной вокруг имеющего ненулевой магнитный

момент атома церия, в соответствии с предполагаемым видом орбиталей *f*-оболочек. Из распределения зарядовой плотности (рис. 6) видно, что отрицательный заряд сосредоточен вокруг атомов йода, что связано с большей электроотрицательностью атомов галогенов. Такое смещение зарядовой плотности говорит о большом вкладе ковалентности в химические связи металл–галоген. Образование ковалентных связей между парами Ce–I создает возможность суперобменного взаимодействия между соседними атомами Ce.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе работы проведен первопринципный расчет электронной структуры нового двумерного соединения CeI₃ в рамках теории функционала плотности. Расчет плотностей электронных состояний с учетом поправки Хаббарда наглядно продемонстрировал наличие характерной для полупроводниковых материалов запрещенной зоны, равной 1.98 и 2.08 эВ для ФМ- и АФМ-конфигураций материала соответственно. Такие значения энергии относятся к диапазону видимого света, что открывает возможности использования двумерного CeI₃ в качестве люминесцентного материала в устройствах с магнитным управлением излучения. В ходе расчетов установлено, что АФМ-конфигурация обладает меньшей полной энергией, т.е. является основным магнитным состоянием структуры. Разница полных энергий ФМ- и АФМ-конфигураций, равная 2.8 мэВ, связана с различными вкладами кулоновского отталкивания между параллельными и антипараллельными спинами внешних оболочек системы. Наличие ковалентных полярных связей, наглядно продемонстрированное на изображении распределения зарядовой плотности, создает возможность суперобменного взаимодействия между соседними атомами церия. Полученные результаты открывают горизонты для дальнейших исследований и технологических применений монослоя CeI₃ в области двумерного магнетизма.

БЛАГОДАРНОСТИ

Расчеты выполнены с использованием оборудования Центра коллективного пользования вычислительными ресурсами МСЦ Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт».

ACKNOWLEDGMENTS

The calculations were performed using the equipment of the Center for the Collective Use of Computing Resources of the National Research Center “Kurchatov Institute.”

Вклад авторов

Е.Т. Мирзоева – выполнение расчетов, обработка результатов, написание статьи.

А.В. Кудрявцев – выполнение расчетов, обсуждение результатов, написание статьи.

Authors' contributions

E.T. Mirzoeva – performing calculations, processing results, writing the manuscript.

A.V. Kudryavtsev – performing calculations, discussing the results, writing the manuscript.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ / REFERENCES

1. Tan H., Shan G., Zhang J. Prediction of novel two-dimensional room-temperature ferromagnetic rare-earth material – GdB_2N_2 with large perpendicular magnetic anisotropy. *Mater. Today Phys.* 2022;24:100700. <https://doi.org/10.1016/j.mtphys.2022.100700>
2. Vobornik I., Manju U., Fujii J., Borgatti F., Torelli P., Krizmancic D., Hor Y.S., Cava R.J., Panaccione G. Magnetic proximity effect as a pathway to spintronic applications of topological insulators. *Nano Lett.* 2011;11(10):4079–4082. <https://doi.org/10.1021/nl201275q>
3. Heinze S., Von Bergmann K., Menzel M., et al. Spontaneous atomic-scale magnetic skyrmion lattice in two dimensions. *Nature Phys.* 2011;7(9):713–718. <https://doi.org/10.1038/nphys2045>
4. Zhang J., Zhao B., Yao Y., Yang Z. Robust quantum anomalous Hall effect in graphene-based van der Waals heterostructures. *Phys. Rev. B.* 2015;92(16):165418. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.92.165418>
5. Song T., Cai X., Tu M.W.Y., Zhang X., Huang B., Wilson N.P., Seyler K.L., Zhu L., Taniguchi T., Watanabe K., McGuire M.A., Cobden D.H., Xiao D., Yao W., Xu X. Giant tunneling magnetoresistance in spin-filter van der Waals heterostructures. *Science.* 2018;360(6394):1214–1218. <https://doi.org/10.1126/science.aar4851>
6. Wang Z., Sapkota D., Taniguchi T., Watanabe K., Mandrus D., Morpurgo A.F. Tunneling spin valves based on $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2/\text{hBN}/\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$ van der Waals heterostructures. *Nano Lett.* 2018;18(7):4303–4308. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.8b01278>
7. Ashton M., Gluhovic D., Sinnott S.B., Guo J., Stewart D.A., Hennig R.G. Two-dimensional intrinsic half metals with large spin gaps. *Nano Lett.* 2017;17(9):5251–5257. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.7b01367>
8. Johansen Ø., Risinggård V., Sudbø A., Linder J., Brataas A. Current control of magnetism in two-dimensional Fe_3GeTe_2 . *Phys. Rev. Lett.* 2019;122(21):217203. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.122.217203>
9. Jiang X., Liu Q., Xing J., Liu N., Guo Y., Liu Z., Zhao J. Recent progress on 2D magnets: Fundamental mechanism, structural design and modification. *Appl. Phys. Rev.* 2021;8(3):031305. <https://doi.org/10.1063/5.0039979>
10. Tian S., Zhang J.-F., Li C., Ying T., Li S., Zhang X., Liu K., Lei H. Ferromagnetic van der Waals crystal VI_3 . *Am. Chem. Soc.* 2019;141(13):5326–5333. <https://doi.org/10.1021/jacs.8b13584>
11. Mermin N.D., Wagner H. Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models. *Phys. Rev. Lett.* 1966;17(22):1133–1136. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.17.1133>
12. Пименов Н.Ю., Лавров С.Д., Кудрявцев А.В., Авдизиян А.Ю. Моделирование зонной структуры двумерных твердых растворов $\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{S}_2\text{ySe}_{2(1-y)}$. *Russian Technological Journal.* 2022;10(3):56–63. <https://doi.org/10.32362/2500-316X-2022-10-3-56-63>
[Pimenov N.Yu., Lavrov S.D., Kudryavtsev A.V., Avdizhiyan A.Yu. Modeling of two-dimensional $\text{MoxW}_{1-x}\text{S}_{2y}\text{Se}_{2(1-y)}$ alloy band structure. *Russian Technological Journal.* 2022;10(3):56–63. <https://doi.org/10.32362/2500-316X-2022-10-3-56-63>]
13. Guo Q., Wang L., Yang L., et al. Spectra stable deep-blue light-emitting diodes based on cryolite-like cerium(III) halides with nanosecond d-f emission. *Sci. Adv.* 2022;8(50):eabq2148. <https://doi.org/10.1126/sciadv.abq2148>
14. Wang C., Liu X., She C., Li Y. Luminescence of CeI_3 in organic solvents and its application in water detection. *Polyhedron.* 2021;196:115013. <https://doi.org/10.1016/j.poly.2020.115013>
15. Xie W., Hu F., Gong S., Peng L. Study the optical properties of Cs_3CeI_6 : First-principles calculations. *AIP Advances.* 2024;14:015062. <https://doi.org/10.1063/5.0187100>
16. Kresse G., Furthmüller J. Efficiency of *ab initio* total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set. *Phys. Rev. B.* 1996;54(16):11169–11186. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.11169>
17. Constantin L.A., Perdew J.P., Pitarke J.M. Exchange–correlation hole of a generalized gradient approximation for solids and surfaces. *Phys. Rev. B.* 2009;79(7):075126. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.075126>
18. Kresse G., Joubert D. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method, *Phys. Rev. B.* 1999;59(3):1758–1775. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.59.1758>
19. Grimme S., Ehrlich S., Goerigk L. Effect of the damping function in dispersion corrected density functional theory. *J. Comput. Chem.* 2011;32(7):1456–1465. <https://doi.org/10.1002/jcc.21759>
20. Dudarev S.L., Botton G.A., Savrasov S.Y., Humphreys C.J., Sutton A.P. Electron-energy-loss spectra and the structural stability of nickel oxide: An LSDA+U study. *Phys. Rev. B.* 1998;57(3):1505–1509. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.57.1505>
21. Sheng K., Chen Q., Yuan H., Wang Z. Monolayer CeI_2 : An intrinsic room-temperature ferrovalley semiconductor. *Phys. Rev. B.* 2022;105(7):075304. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.105.075304>

22. Larson P., Lambrecht W.R.L., Chantis A., van Schilfgaarde M. Electronic structure of rare-earth nitrides using the LSDA+*U* approach: Importance of allowing 4*f* orbitals to break the cubic crystal symmetry. *Phys. Rev. B*. 2007;75(4):045114. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.75.045114>
23. Momma K., Izumi F. *VESTA*: a three-dimensional visualization system for electronic and structural analysis. *J. Appl. Cryst.* 2008;41:653–658. <https://doi.org/10.1107/S0021889808012016>
24. Wang V., Xu N., Liu J., Tang G., Geng W. VASPKIT: A user-friendly interface facilitating high-throughput computing and analysis using VASP code. *Comput. Phys. Commun.* 2021;267:108033. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2021.108033>
25. Chornodolsky Ya.M., Karnaushenko V.O., Vistovsky V.V., Syrotyuk S.V., Gektin A.V., Voloshinovskii A.S. Energy band structure peculiarities and luminescent parameters of CeX_3 ($X = \text{Cl, Br, I}$) crystals. *J. Lumin.* 2021;237:118147. <https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2021.118147>
26. Birowosuto M.D., Dorenbo P. Novel γ - and X-ray scintillator research: on the emission wavelength, light yield and time response of Ce^{3+} doped halide scintillators. *Phys. Status Solidi A-Appl. Mater. Sci.* 2009;206(1):9–20. <https://doi.org/10.1002/pssa.200723669>
27. Dorenbo P. Lanthanide 4*f*-electron binding energies and the nephelauxetic effect in wide band gap compounds. *J. Lumin.* 2013;136:122–129. <https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2012.11.030>

Об авторах

Мирзоева Елизавета Теофиловна, магистрант, Институт перспективных технологий и промышленного программирования, ФГБОУ ВО «МИРЭА – Российский технологический университет» (119454, Россия, Москва, пр-т Вернадского, д. 78). E-mail: mirzoeva.elizaveta@gmail.ru. <https://orcid.org/0009-0003-4874-7015>

Кудрявцев Андрей Владимирович, к.ф.-м.н., доцент, научный сотрудник, кафедра нанoeлектроники, Институт перспективных технологий и промышленного программирования, ФГБОУ ВО «МИРЭА – Российский технологический университет» (119454, Россия, Москва, пр-т Вернадского, д. 78). E-mail: kudryavcev_a@mirea.ru. Scopus Author ID 55219889700, ResearcherID O-1457-2016, <https://orcid.org/0000-0002-2126-7404>

About the Authors

Elizaveta T. Mirzoeva, Master Student, Institute for Advanced Technologies and Industrial Programming, MIREA – Russian Technological University (78, Vernadskogo pr., Moscow, 119454 Russia). E-mail: mirzoeva.elizaveta@gmail.ru. <https://orcid.org/0009-0003-4874-7015>

Andrey V. Kudryavtsev, Cand. Sci. (Phys.-Math.), Associate Professor, Researcher, Department of Nanoelectronics, Institute for Advanced Technologies and Industrial Programming, MIREA – Russian Technological University (78, Vernadskogo pr., Moscow, 119454 Russia). E-mail: kudryavcev_a@mirea.ru. Scopus Author ID 55219889700, ResearcherID O-1457-2016, <https://orcid.org/0000-0002-2126-7404>