

Оригинальные статьи

Научная статья

УДК 538.915

<https://doi.org/10.17308/kcmf.2023.25/11478>

Электронное строение диоксида германия со структурой рутила по данным *ab initio* компьютерного моделирования

М. Д. Манякин✉, С. И. Курганский

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет»,
Университетская пл., 1, Воронеж 394018, Российская Федерация

Аннотация

Работа посвящена исследованиям электронного строения тетрагональной кристаллической модификации диоксида германия. Электронная структура исследована теоретически в рамках метода линейаризованных присоединенных плоских волн с помощью программного пакета Wien2k.

Вычислены полная и локальные парциальные плотности электронных состояний. Проведено моделирование спектров ближней тонкой структуры края поглощения рентгеновского излучения для различных краев поглощения атомов германия и кислорода. В рамках приближения $Z+1$ рассчитаны Ge K-, Ge L_3 - и O K-края поглощения для тетрагональной модификации GeO_2 . Полученный для Ge K-края поглощения результат показывает высокое согласие с экспериментальными данными.

Результат расчета Ge L_3 -спектра представляется впервые и носит прогностический характер. С целью улучшения согласия с экспериментом результатов расчета K-края поглощения кислорода кроме использования метода $Z+1$ приближения были дополнительно проведены расчеты с использованием метода моделирования остовой дырки, в том числе частичной остовой дырки. Показано, что применение остовой дырки с зарядом 0.7 электрона улучшает согласие результатов расчета с экспериментом.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, диоксид германия, электронная структура, плотность состояний, XANES, остовная дырка, рутил

Источник финансирования: Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского Научного Фонда в рамках научного проекта № 22-72-00145.

Для цитирования: Манякин М. Д., Курганский С. И. Электронное строение диоксида германия со структурой рутила по данным *ab initio* компьютерного моделирования. *Конденсированные среды и межфазные границы*. 2023;25(4): 587–593. <https://doi.org/10.17308/kcmf.2023.25/11478>

For citation: Manyakin M. D., Kurganskii S. I. Electronic structure of germanium dioxide with rutile structure according to *ab initio* computer simulation data. *Condensed Matter and Interphases*. 2023;25(4): 587–593. <https://doi.org/10.17308/kcmf.2023.25/11478>

✉ Манякин Максим Дмитриевич, e-mail: manyakin@phys.vsu.ru

© Манякин М. Д., Курганский С. И., 2023



1. Введение

Диоксид германия – широкозонный полупроводник [1], применяющийся в оптоэлектронике, солнечной энергетике, катализе [2–5]. Диоксид германия при нормальных условиях существует в двух стабильных кристаллических модификациях: гексагональный q -GeO₂ (структура кварца) и тетрагональный r -GeO₂ (структура рутила) [6].

По ряду причин особый интерес представляет изучение электронной структуры тетрагональной фазы диоксида германия. Во-первых, активно проводится синтез и исследования различных наноматериалов на основе соединений GeO_x [3, 4, 7, 8]. Во-вторых, r -GeO₂ является одним из многих оксидных материалов, имеющих пространственную структуру рутила [9]. Имея близкие кристаллические параметры, эти материалы являются подходящими кандидатами для создания новых функциональных материалов в виде различных интерфейсов и гетероструктур на их основе [10]. В обоих рассмотренных случаях знание особенностей электронной структуры r -GeO₂ является необходимым для правильного анализа и интерпретации экспериментально проявляемых свойств подобных материалов.

Одним из методов, активно применяемых для целей экспериментального изучения атомного и электронного строения материалов, является спектроскопия ближней тонкой структуры края поглощения рентгеновского излучения (X-ray absorption near edge structure – XANES) [11]. Спектры XANES отражают информацию о распределении плотности незанятых электронных состояний в зоне проводимости твердых тел, проявляют высокую чувствительность к тонким приповерхностным слоям материала и к ближайшему порядку в расположении атомов изучаемого материала.

Анализ экспериментальных спектров исследуемых образцов обычно проводится путем их сопоставления со спектрами хорошо изученных материалов, рассматриваемых в качестве эталонов. В случае материалов системы Ge – O одним из таких эталонов будет являться r -GeO₂. В литературе присутствует достаточное число работ, содержащих экспериментально полученные XANES спектры фазы r -GeO₂. В публикациях [12–14] приведены K-спектры поглощения германия, в [15, 16] – K-спектры поглощения кислорода. Авторы ряда работ применяют Ge K-спектры в качестве эталонов при анализе пространственной структуры исследуемых ими образцов системы

Ge – O [13, 14, 17]. Однако нам не удалось обнаружить среди литературных источников данных по L₃ краю поглощения германия в r -GeO₂ – ни экспериментальных, ни теоретических.

В качестве эталонных спектров можно использовать не только экспериментально полученные результаты, но и результаты компьютерного моделирования [18]. Хотя электронная структура тетрагонального GeO₂ ранее часто становилась объектом моделирования [5, 16, 19, 20–23], результаты расчетов XANES спектров Ge K, Ge L₃ в этих работах не приведены и, вероятно, к настоящему моменту не публиковались в научной литературе. Был выполнен расчет только лишь K-спектра поглощения кислорода в r -GeO₂ [15]. Авторы получили результат, в целом хорошо согласующийся с экспериментом, но все же имеющий некоторые существенные отличия во взаимном соотношении интенсивностей структурных особенностей спектра.

Таким образом, проведение первопринципного компьютерного моделирования тетрагональной фазы GeO₂ и выполнение расчетов спектров XANES является актуальной научной задачей, решению которой посвящена настоящая статья.

2. Методика расчетов

Тетрагональная фаза диоксида германия имеет пространственную структуру рутила, группа симметрии P4₂/mnm [19]. В качестве параметров элементарной ячейки мы использовали экспериментальные значения из работы [24], аналогично расчетам, выполненным в [5, 23]. Внешний вид элементарной ячейки r -GeO₂ приведен на рис. 1. Параметры кристаллической структуры указаны в табл. 1.

Расчеты электронной структуры проводились с использованием программного пакета

Таблица 1. Кристаллические параметры r -GeO₂

Группа симметрии	P4 ₂ /mnm		
Параметр a, b, Å	4.40656		
Параметр c, Å	2.86186		
Координаты атомов	x/a	y/b	z/c
Ge ₁	0.5	0.5	0.5
Ge ₂	0.0	0.0	0.0
O ₁	0.806	0.806	0.5
O ₂	0.194	0.194	0.5
O ₃	0.694	0.306	0.0
O ₄	0.306	0.694	0.0

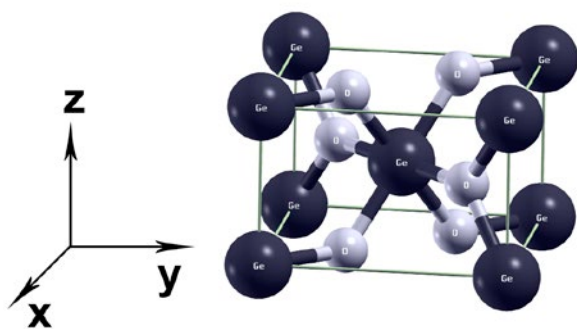


Рис. 1. Элементарная ячейка $r\text{-GeO}_2$. Атом Ge – темный, атом O – светлый

Wien2k [25], в основе которого лежит полнопотенциальный метод линейаризованных присоединенных плоских волн (ЛППВ). В рамках теории функционала плотности для учета обменно-корреляционной энергии использовалось обобщенное градиентное приближение (Generalized Gradient Approximation – GGA). Радиусы muffin-tin сфер атомов были равны 1.85 а.е. для атома Ge и 1.67 а.е. для атома O.

Моделирование спектров XANES проводилось с помощью метода остовой дырки и метода Z+1 приближения. Формализм этих методов несколько различен и заключается в следующем. В основе обоих подходов лежит идея, что при моделировании электронно-энергетического строения зоны проводимости в целях сопоставления с экспериментальными спектрами XANES необходимо проводить зонный расчет для возбужденного состояния [26, 27]. Экспериментально зона проводимости исследуется методом XANES, при этом пучок высокоэнергетических рентгеновских фотонов облучает образец, остовные электроны которого поглощают энергию и переходят в зону проводимости. Это приводит к необходимости расчета зонной структуры материала именно в такой электронной конфигурации – с положительным зарядом $+1e$ на атомном остове и отрицательным зарядом $-1e$ в зоне проводимости. Для этого в методе остовой дырки [26–28] у заранее выбранного атома A, спектр которого нужно рассчитать, удаляется один остовный электрон, который добавляется в зону проводимости для сохранения электронейтральности. Остовная дырка моделируется на том же энергетическом уровне, на котором возникает электронная вакансия при проведении эксперимента. В методе Z+1 приближения [28] атом A заменяется атомом следу-

ющего за ним химического элемента с зарядовым числом Z+1. Отметим, что в обоих методах атом A находится в суперъячейке, объем которой в несколько раз больше объема элементарной ячейки. Все остальные атомы в суперъячейке находятся в основном энергетическом состоянии. При этом объем суперъячейки должен быть достаточно большим, чтобы исключить взаимодействие соседних атомов, имеющих остовные дырки или зарядовое число Z+1 [26, 27]. В настоящей работе использовались суперъячейки с параметрами $2 \times 2 \times 3$, аналогично расчетам, выполненным в [15, 29]. При таких параметрах форма суперъячейки оказывается близкой к кубической, а минимальное расстояние между двумя возбужденными атомами оказывается равным $\sim 8.585 \text{ \AA}$. При расчетах спектров германия методом Z+1 приближения один из атомов германия в суперъячейке заменялся атомом мышьяка. Аналогично при расчетах спектра кислорода один из атомов кислорода был заменен атомом фтора. Таким способом были теоретически рассчитаны спектры поглощения Ge K, Ge L_3 , O K.

3. Результаты и обсуждение

3.1. Плотности электронных состояний $r\text{-GeO}_2$

Рассчитанные в работе спектры полной $N(E)$ и парциальных $n(E)$ плотностей электронных состояний (ПЭС) $r\text{-GeO}_2$ в основном состоянии приведены на рис. 2. За начало отсчета шкалы энергий принят потолок валентной зоны. Ширина валентной зоны оказалась равной 10.4 эВ. Кривая полной ПЭС валентной полосы имеет трехпиковую структуру, характерную и для других оксидов 14 группы периодической таблицы, обладающих пространственной структурой рутила [29, 30]. Интенсивность пиков ПЭС возрастает от дна валентной полосы к ее потолку. В пик при энергии -9.65 эВ вносят соизмеримый вклад 4s-состояния германия и 2p-состояния кислорода. Максимум в средней части валентной зоны при энергии -5.4 эВ образован, главным образом, 2p-состояниями кислорода с небольшой примесью 4p-состояний германия. Наиболее интенсивный пик, расположенный на расстоянии -1.2 эВ от вершины валентной зоны, почти полностью происходит от 2p-состояний атомов кислорода. Доминирование занятых электронных состояний кислорода в валентной зоне можно связать с большей электроотрицательностью атомов кислорода по сравнению с атомами германия.

Ниже валентной области лежат две узкие группы субвалентных состояний: Ge 3d в энер-

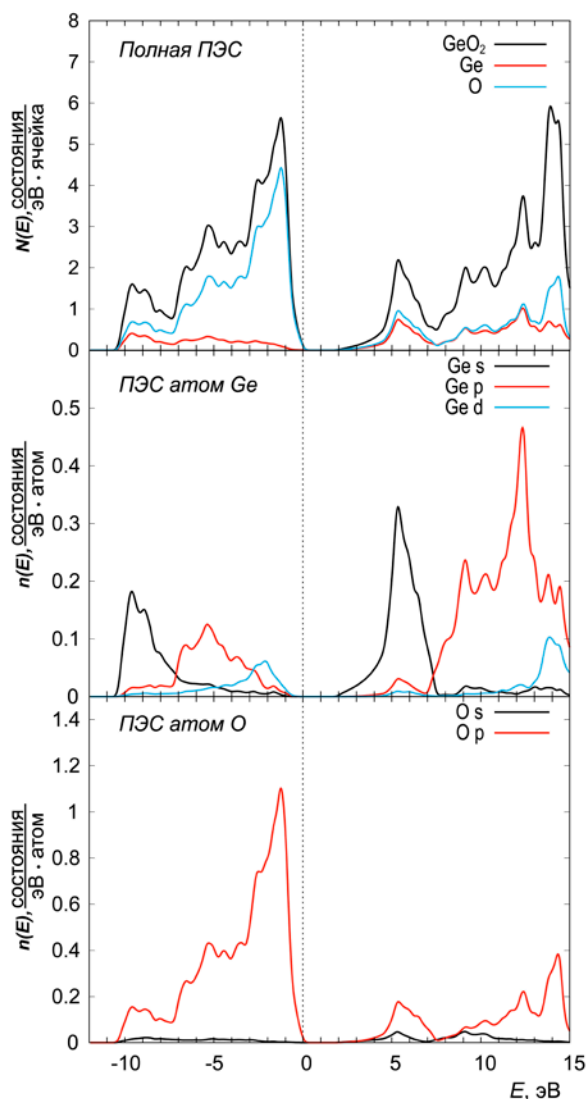


Рис. 2. Полная $N(E)$ и парциальные $n(E)$ плотности электронных состояний $r\text{-GeO}_2$

гетическом диапазоне от -24.8 до -23.8 эВ и O $2s$ в энергетическом диапазоне от -21.3 до -16.7 эВ (не приведены на рисунке). Валентная зона отделена от зоны проводимости запрещенной зоной, шириной 1.996 эВ, что меньше экспериментального значения 4.680 эВ [1] по причине использования в расчете функционала GGA, имеющего тенденцию к систематической недооценке ширины запрещенной зоны в полупроводниках и диэлектриках [31]. Анализируя зону проводимости, можно видеть, что вклад состояний германия и кислорода оказывается практически одинаковым в широком энергетическом диапазоне, вплоть до 15 эВ.

Анализируя в целом полученные нами результаты расчетов ПЭС $r\text{-GeO}_2$ отметим их хоро-

шее согласие с результатами вычислений, представленными в работах [5, 16, 20–22].

3.2. Спектры XANES $r\text{-GeO}_2$

На рис. 3 приведен XANES спектр Ge К-края, рассчитанный в приближении Z+1. Спектр Ge К отражает плотность незанятых Ge p -состояний в зоне проводимости. Модельный спектр приведен в сравнении с экспериментальным спектром из работы [14]. Спектры сопоставлены в единой энергетической шкале по положению основного максимума при $E \sim 11110$ эВ. Видно, что по своей форме и положению основных энергетических особенностей, включая несколько малоинтенсивных пиков в диапазоне до 50 эВ от края поглощения, расчетный спектр очень хорошо согласуется с экспериментальным. Такое хорошее согласие свидетельствует о достоверности результатов расчета и надежности метода Z+1, что позволяет применить его для моделирования других краев поглощения в $r\text{-GeO}_2$.

На рис. 4 приведены результаты расчета XANES спектра Ge L_3 -края, также полученного в приближении Z+1. Спектр Ge L_3 отражает плотность незанятых Ge s - и d -состояний в зоне проводимости. Нам не удалось обнаружить в научной литературе данных по экспериментальным измерениям Ge L_3 -края поглощения в $r\text{-GeO}_2$. По этой причине мы проводим сравнение рассчитанного нами спектра с теоретическим и экспериментальными спектрами Sn L_3 в рутилоподобном SnO_2 из работы [32]. Спектры совмещены по положению максимума при ~ 11 эВ в энергетической шкале, соответствующей модельному спектру Ge L_3 . Видно, что по своей форме и положению основных структурных особенностей спектр германия оказывается весьма схож со спектром олова. Ключевым отличием является одиночный главный максимум в спектре германия, в

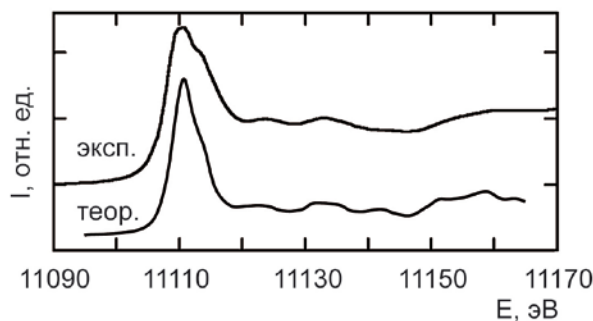


Рис. 3. Рассчитанный спектр (теор.) Ge К-края поглощения в сравнении с экспериментальным спектром (эксп.) из работы [14]

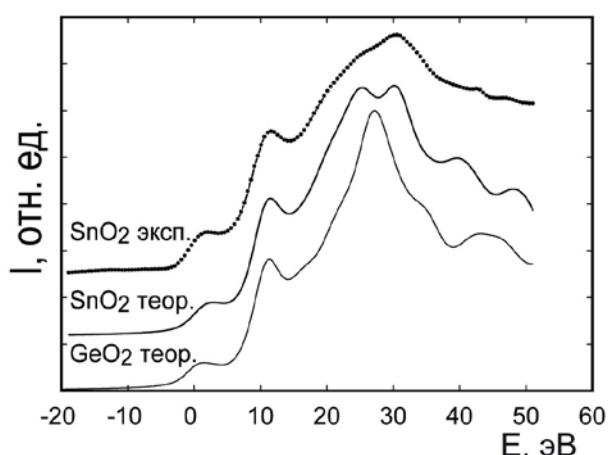


Рис. 4. Рассчитанный спектр (GeO_2 теор.) Ge L_3 в сравнении с рассчитанным (SnO_2 теор.) и экспериментальным (SnO_2 эксп.) спектрами Sn L_3 в SnO_2 [32]

то время как для олова соответствующий максимум раздвоен. Это различие связано с разницей в энергетическом распределении $\text{Ge } 4d$ и $\text{Sn } 5d$ состояний, образующих рассматриваемые спектры. Полученный для Ge L_3 -края результат носит прогнозный характер и может использоваться при анализе экспериментально исследуемых образцов системы $\text{Ge} - \text{O}$.

Наконец, нами были выполнены расчеты O K -края поглощения. На рис. 5 показано сравнение рассчитанных нами спектров с экспериментальным и модельным спектрами из работы [15]. Рассчитанные нами спектры были сопоставлены с экспериментом по положению на энергетической шкале главного максимума при энергии 535 эВ. Видно в целом хорошее согласие между результатом нашего расчета, выполненного в приближении $Z+1$, и экспериментом [15]. Однако аналогично результату теоретического расчета [15] в полученном нами спектре наблюдается перераспределение интенсивности особенностей тонкой структуры спектра в области энергий 540–545 эВ по сравнению с экспериментальной интенсивностью. В работе [15] этот результат объяснялся слишком сильным притягивающим потенциалом остовой дырки. По этой причине мы выполнили также расчеты XANES O K спектра по методу остовой дырки, в том числе с дробной частью остовой дырки. Подобный подход применялся при расчете XANES спектров в работе [28] и позволил улучшить согласие расчетных и экспериментальных результатов. На рис. 5 приведены спектры, рассчитанные для целой остовой дырки и остовных дырок с зарядом $0.8e$ и $0.7e$ – обозначены 1.0 ch, 0.8 ch и 0.7 ch соответственно. Видно, что результат полученный

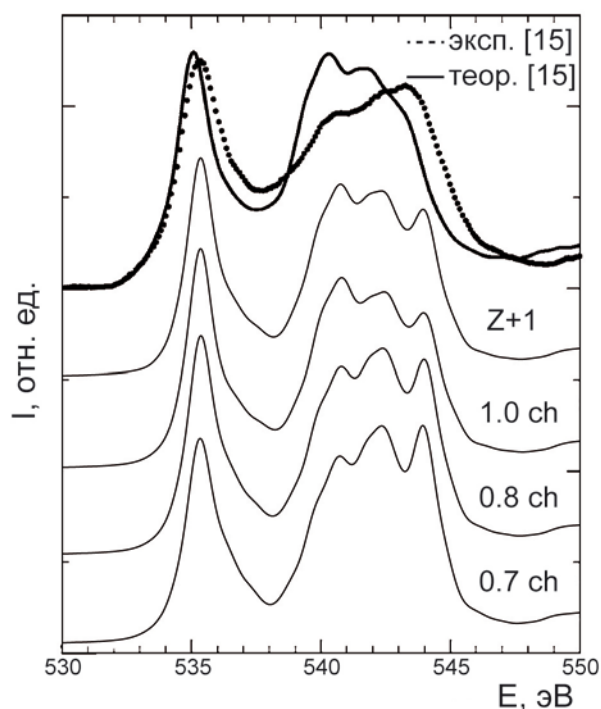


Рис. 5. Спектры XANES O K -края поглощения, рассчитанные различными методами в сравнении с результатами из работы [15]

для целой остовой дырки практически не отличается от результата расчета с использованием $Z+1$ приближения. Уменьшение величины заряда остовой дырки приводит к изменениям в соотношении интенсивности структурных особенностей рассчитанного спектра поглощения в области энергий 540–545 эВ. Теоретический спектр, полученный при использовании остовой дырки с зарядом $0.7e$, показывает лучшее согласие с экспериментом.

4. Выводы

Методом линеаризованных присоединенных плоских волн исследована электронная структура тетрагональной кристаллической модификации диоксида германия.

Впервые представлены результаты расчетов XANES спектров Ge K -, Ge L_3 -края поглощения, выполненные с применением метода $Z+1$ приближения.

Впервые представлены результаты расчетов XANES спектра O K -края поглощения с использованием дробной части остовой дырки. Показано, что модельный спектр, полученный при использовании остовой дырки с зарядом $0.7e$, показывает лучшее согласие с экспериментом.

Полученные результаты могут быть использованы при анализе экспериментально исследу-

емых образцов системы Ge – O.

Заявленный вклад авторов

Все авторы сделали эквивалентный вклад в подготовку публикации.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет известных финансовых конфликтов интересов или личных отношений, которые могли бы повлиять на работу, представленную в этой статье.

Список литературы

1. Stapelbroek M., Evans B. D. Exciton structure in the u.v.-absorption edge of tetragonal GeO₂. *Solid State Communications*. 1978;25: 959–962. [https://doi.org/10.1016/0038-1098\(78\)90311-3](https://doi.org/10.1016/0038-1098(78)90311-3)
2. Никишина Е. Е., Лебедева Е. Н., Пилецкий А. В., Дробот Д. В. Гидроксид и оксид германия (IV): метод синтеза и физико-химические свойства. *Тонкие химические технологии*. 2015;10(5): 19–26. Режим доступа: https://www.finechem-mirea.ru/jour/article/view/254?locale=ru_RU
3. Peng M., Li Y., Gao J., Zhang D., Jiang Z., Sun X. Electronic structure and photoluminescence origin of single-crystalline germanium oxide nanowires with green light emission. *The Journal of Physical Chemistry C*. 2011;115: 11420–11426. <https://doi.org/10.1021/jp201884y>
4. Armelao L., Heigl F., Kim P.-S. G., Rosenberg R. A., Regier T. Z., Sham T.-K. Visible emission from GeO₂ nanowires: site-specific insights via X-ray excited optical luminescence. *The Journal of Physical Chemistry C*. 2012;116(26): 14163–14169. <https://doi.org/10.1021/jp3040743>
5. Samanta A., Jain M., Singh A. K. Ultra-sensitive pressure dependence of bandgap of rutile-GeO₂ revealed by many body perturbation theory. *The Journal of Chemical Physics*. 2015;143: 064703. <https://doi.org/10.1063/1.4928526>
6. Dinsdale A. T., Akhmetova A., Khvan A. V., Arisotova N. A critical assessment of thermodynamic and phase diagram data for the Ge-O system. *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*. 2015;36: 254–261. <https://doi.org/10.1007/s11669-015-0379-1>
7. Torrey J. D., Vasko S. E., Kapetanovic A., Rolandi M. Scanning probe direct-write of germanium nanostructures. *Advanced Materials*. 2010;22: 4639–4642. <https://doi.org/10.1002/adma.201001987>
8. Wysokowski M., Motylenko M., Beyer J., ... Ehrlich H. Extreme biomimetic approach for developing novel chitin-GeO₂ nanocomposites with photoluminescent properties. *Nano Research*. 2015;8: 2288–2301. <https://doi.org/10.1007/s12274-015-0739-5>
9. Baur W. H. The rutile type and its derivatives. *Crystallography Reviews*. 2007;13(1): 65–113. <http://dx.doi.org/10.1080/08893110701433435>
10. Lim H. Y., Park S. O., Kim S. H., Jung G. Y., Kwak S. K. First-principles design of rutile oxide heterostructures for oxygen evolution reactions. *Frontiers in Energy Research*. 2021;9: 606313. <https://doi.org/10.3389/fenrg.2021.606313>
11. Stohr J. *NEXAFS spectroscopy*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg; 1992. 404 p. <https://doi.org/10.1007/978-3-662-02853-7>
12. Okuno M., Yin C. D., Morikawa H., Marumo F., Oyanagi H. A high resolution exafs and near edge study of GeO₂ glass. *Journal of Non-Crystalline Solids*. 1986;87: 312–320. [https://doi.org/10.1016/S0022-3093\(86\)80005-9](https://doi.org/10.1016/S0022-3093(86)80005-9)
13. Itie J. P., Polian A., Calas G., Petiau J., Fontaine A., Tolentino H. Pressure-induced coordination changes in crystalline and vitreous GeO₂. *Physical Review Letters*. 1989;63: 398–401. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.63.398>
14. Majerus O., Cormier L., Itié J.-P., Galois L., Neuville D. R., Calas G. Pressure-induced Ge coordination change and polyamorphism in SiO₂-GeO₂ glasses. *Journal of Non-Crystalline Solids*. 2004;345-346: 34–38. <https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2004.07.039>
15. Cabaret D., Mauri F., Henderson G. S. Oxygen K-edge XANES of germanates investigated using first-principles calculations. *Physical Review B*. 2007;75: 184205. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.75.184205>
16. Wang H. M., Henderson G. S. Investigation of coordination number in silicate and germanate glasses using O K-edge X-ray absorption spectroscopy. *Chemical Geology*. 2004;213: 17–30. <https://doi.org/10.1016/j.chemgeo.2004.08.029>
17. Ohtaka O., Yoshiasa A., Fukui H., ... Nishihata Y. Structural changes of quartz-type crystalline and vitreous GeO₂ under pressure. *Journal of Synchrotron Radiation*. 2001;8: 791–793. <https://doi.org/10.1107/S0909049500018306>
18. Manyakin M. D., Kurganskii S. I., Dubrovskii O. I., ... Turishchev S. Yu. Electronic and atomic structure studies of tin oxide layers using X-ray absorption near edge structure spectroscopy data modeling. *Materials Science in Semiconductor Processing*. 2019;99: 28–33. <https://doi.org/10.1016/j.mssp.2019.04.006>
19. Svane A., Antoncik E. Electronic structure of rutile SnO₂, GeO₂ and TeO₂. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. 1987;48(2): 171–180. [https://doi.org/10.1016/0022-3697\(87\)90081-3](https://doi.org/10.1016/0022-3697(87)90081-3)
20. Christie D. M., Chelikowsky J. R. Electronic and structural properties of germania polymorphs. *Physical Review B*. 2000;62: 14703. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.62.14703>

21. Liu Q.-J., Liu Z.-T., Feng L.-P., Tian H. First-principles study of structural, elastic, electronic and optical properties of rutile GeO_2 and α -quartz GeO_2 . *Solid State Sciences*. 2010;12(10): 1748–1755. <https://doi.org/10.1016/j.solidstatesciences.2010.07.025>

22. Sevik C., Bulutay C. Theoretical study of the insulating oxides and nitrides: SiO_2 , GeO_2 , Al_2O_3 , Si_3N_4 , and Ge_3N_4 . *Journal of Materials Science*. 2007;42: 6555–6565. <https://doi.org/10.1007/s10853-007-1526-9>

23. Mengle K. A., Chae S., Kioupakis E. Quasiparticle band structure and optical properties of rutile GeO_2 , an ultra-wide-band-gap semiconductor. *Journal of Applied Physics*. 2019;126: 085703. <https://doi.org/10.1063/1.5111318>

24. Bolzan A. A., Fong C., Kennedy B. J., Howard C. J. Structural studies of rutile-type metal Ddioxides. *Acta Crystallographica Section B Structural Science*. 1997;B53: 373–380. <https://doi.org/10.1107/S0108768197001468>

25. Blaha P., Schwarz K., Tran F., Laskowski R., Madsen G. K. H., Marks L. D. WIEN2k: An APW+lo program for calculating the properties of solids. *The Journal of Chemical Physics*. 2020;152: 074101. <https://doi.org/10.1063/1.5143061>

26. Hebert C., Luitz J., Schattschneider P. Improvement of energy loss near edge structure calculation using Wien2k. *Micron*. 2003;34: 219–225. [https://doi.org/10.1016/S0968-4328\(03\)00030-1](https://doi.org/10.1016/S0968-4328(03)00030-1)

27. Duscher G., Buczkoa R., Pennycook S. J., Pantelides S. T. Core-hole effects on energy-loss near-edge structure. *Ultramicroscopy*. 2001;86: 355–362. [https://doi.org/10.1016/S0304-3991\(00\)00126-1](https://doi.org/10.1016/S0304-3991(00)00126-1)

28. Luitz J., Maier M., Hebert C., Schattschneider P., Blaha P., Schwarz K., Jouffrey B. Partial core hole screening in the Cu L_3 edge. *The European Physical Journal B*. 2001;21: 363–367. <https://doi.org/10.1007/s100510170179>

29. Курганский С. И., Манякин М. Д., Дубровский О. И., Чувенкова О. А., Турищев С. Ю., Домашевская Э. П. Теоретическое и экспериментальное исследование электронной структуры диоксида олова. *Физика твердого тела*. 2014;56(9): 1690–1695.

Режим доступа: <https://journals.ioffe.ru/articles/40730>

30. Scanlon D. O., Kehoe A. B., Watson G. W., ... Walsh A. Nature of the band gap and origin of the conductivity of PbO_2 revealed by theory and experiment. *Physical Review Letters*. 2011;107: 246402. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.107.246402>

31. Koller D., Tran F., Blaha P. Merits and limits of the modified Becke–Johnson exchange potential. *Physical Review B*. 2011;83: 195134. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.83.195134>

32. Манякин М. Д., Курганский С. И., Дубровский О. И., Чувенкова О. А., Домашевская Э. П., Турищев С. Ю. Ab initio моделирование и синхротронные рентгеноспектральные исследования оксидов олова вблизи Sn L_3 -краев поглощения. *Физика твердого тела*. 2016;58(12): 2294–2298. <https://doi.org/10.21883/ftt.2016.12.43845.235>

Информация об авторах

Манякин Максим Дмитриевич, к. ф.-м. н., н. с. в области физики совместной научно-образовательной лаборатории «Атомное и электронное строение функциональных материалов» Воронежского государственного университета и Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», Воронежский государственный университет (Воронеж, Российская Федерация).

<https://orcid.org/0000-0003-2260-6233>
manyakin@phys.vsu.ru

Курганский Сергей Иванович, д. ф.-м. н., профессор кафедры физики твердого тела и наноструктур, Воронежский государственный университет (Воронеж, Российская Федерация).

<https://orcid.org/0000-0002-4202-0953>
kurganskii@phys.vsu.ru

Поступила в редакцию 22.02.2023; одобрена после рецензирования 06.03.2023; принята к публикации 17.04.2023; опубликована онлайн 25.12.2023.