

AB INITIO РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОННО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА СВЕРХТОНЫХ НАНОПЛЕНОК МЕТАЛЛИЧЕСКОГО ОЛОВА

© 2017 М. Д. Манякин¹, С. И. Курганский¹, О. И. Дубровский¹, Е. Р. Лихачев²

¹Воронежский государственный университет, Университетская пл., 1, 394018 Воронеж, Россия

²ВУНЦ ВВС «Военно-воздушная академия им. профессора Н. Е. Жуковского и Ю. А. Гагарина»,

ул. Старых Большевиков, 54А, 394064 Воронеж, Россия

e-mail: manyakin@phys.vsu.ru

Поступила в редакцию 15.11.2017

Аннотация. Представлены результаты компьютерного моделирования из первых принципов электронного строения сверхтонких нанопленок металлического олова β -Sn различной толщины. Методом линейаризованных присоединенных плоских волн (ЛППВ) в приближении слоистой сверхрешетки проведены расчеты спектров полной и парциальных плотностей электронных состояний. Методом моделирования суперъячейки с использованием приближения «остовной дырки» рассчитаны спектры ближней тонкой структуры $M_{4,5}$ краев рентгеновского поглощения для поверхностных слоев нанопленок. Предложена модель электронного строения поверхности объемного кристалла олова.

Ключевые слова: металлическое олово, нанопленка, электронная структура, метод ЛППВ, *ab initio* моделирование, XANES.

ВВЕДЕНИЕ

Поскольку современные микро- и нанoeлектроника основаны на использовании планарной технологии, то перед наукой стоит задача систематического изучения особенностей строения и свойств твердотельных нанопленок и поверхностей объемных кристаллов. Важное место среди таких объектов исследования занимают функциональные структуры на основе металлов и их оксидов. В частности, задачей, имеющей большой научный и практический интерес, является изучение электронного строения металлических нанопленок олова, поскольку на их основе возможно создание металл-оксидных наноматериалов с широким потенциалом промышленного применения [1, 2]. До настоящего момента систематических исследований свойств нанопленок олова фактически не проводилось. Опубликованные в научной литературе работы касаются в основном процесса синтеза и изучения пространственной структуры, морфологии поверхности [3, 4] и оптических характеристик [4, 5] тонких пленок олова. Целью данной работы является исследование особенностей электронного строения нанопленок металлического олова и изучение размерного эффекта взаимосвязи между толщиной нанопленки и ее энергетическим спектром.

МЕТОД РАСЧЕТА

Металлическое олово обладает тетрагональной объемно-центрированной кристаллической решеткой и характеризуется пространственной группой симметрии $I4_1/amd$. Используемые в работе кристаллические параметры и координаты неэквивалентных атомных позиций были взяты из [6].

Моделирование пространственной и электронной структуры нанопленок олова проводилось в приближении слоистой сверхрешетки, формализм которого описан в [7]. В рамках такого подхода используются методы расчета электронного строения трехмерных периодических структур, но исследуемая структура представляется в виде системы тонких пленок, называемых слэбами (slab), периодически повторяющихся в направлении, перпендикулярном поверхности, и разделенных вакуумными промежутками. На рис. 1 изображена упрощенная модель двух элементарных ячеек структуры, моделирующей четырехслойную нанопленку.

Каждая из ячеек состоит из одного слэба и двух вакуумных областей, равных по толщине половине от общей протяженности вакуумной области (d_{vac}) вдоль вертикального направления. Общая протяженность вакуумной области (d_{vac}) является важным параметром, влияющим на конечный результат расчета. С одной стороны, она должна быть доста-

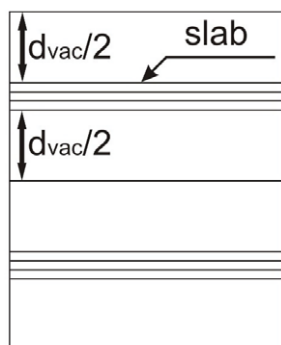


Рис. 1. Модель двух элементарных ячеек нанопленки
 [Fig. 1. The model of two unit cells of a nanofilm]

точно велика, чтобы свести взаимодействие между соседними слэбами к минимуму. С другой же стороны, ее слишком большое значение может весьма существенно увеличить трудоемкость расчетов.

Моделировались нанопленки толщиной от 1 до 10 параметров элементарной ячейки вдоль оси Z (кристаллографическое направление 001), что составляет от ~ 3.1 до 31 \AA . На рис. 2 приведен внешний вид элементарной ячейки нанопленки олова толщиной в 10 элементарных ячеек объемного кристалла. Хорошо различимы три области пространства, составляющие ячейку пленки – слэб, содержащие 20 двойных атомных слоев ($\sim 31 \text{ \AA}$), и две вакуумные области, ограничивающие ячейку сверху и снизу, протяженность каждой из которых равна $d_{vac}/2$. В данной работе толщина вакуумной области d_{vac} равнялась 25 атомным единицам (а. е.) $\sim 13.2 \text{ \AA}$. В направлениях x и y пленка бесконечна и периодична, ее атомная структура определяется транслированием приведенной на рис. 2 элементарной ячейки с помощью векторов двумерной квадратной решетки Бравэ с периодом 5.8192 \AA . Поскольку пленка обладает центром симметрии, то достаточно рассмотреть результаты расчета только для 20 неэквивалентных атомных слоев в направлении от поверхности к объему пленки. Обозначения слоев приведены на рис. 2, причем слой 1 – это поверхностный слой пленки, а слой 20 – ее центральный слой. Аналогичной пространственной структурой, но с меньшим числом атомных слоев, обладают и другие исследованные в работе пленки.

Расчеты электронной структуры проводились методом линейаризованных присоединенных плоских волн (ЛППВ) с использованием программного пакета Wien2k [8]. Для вычисления обменно-корреляционной энергии нами было использовано обобщенное градиентное приближение (Generalized Gradient Approximation – GGA) [9]. Этот

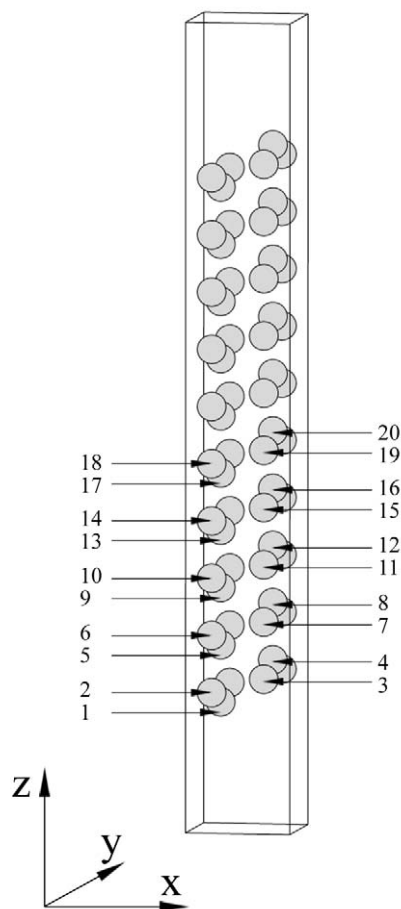


Рис. 2. Элементарная ячейка нанопленки Sn
 [Fig. 2. Unit cell of the Sn nanofilm]

универсальный функционал позволяет проводить надежные расчеты электронной структуры и рентгеноспектральных характеристик металлов. Параметр $r_{mt} \cdot k_{max}$, определяющий число базисных функций, брался равным 6.0, где r_{mt} – радиус muffin сферы (2.5 а. е.), k_{max} – граница обрыва плоских волн.

Одним из экспериментальных методов, позволяющих получать информацию об электронном строении наноструктур, является метод рентгеновской спектроскопии ближней тонкой структуры края поглощения (XANES). Этот метод является достаточно распространенным, благодаря своей исключительной чувствительности к тонким приповерхностным слоям материала и его ближайшему атомному порядку. В свою очередь, для возможности надежной интерпретации экспериментально зарегистрированных спектров активно применяется проведение теоретических расчетов электронной структуры путем компьютерного моделирования. При этом существует возможность расчета непо-

средственно спектров XANES и проведения дальнейшего сравнительного анализа с результатами эксперимента. С этой целью применяется метод моделирования суперъячейки, содержащей 1 атом с остовой дыркой [10, 11], который ранее был многократно апробирован для объемных материалов [12, 13]. Интерес представляет рассмотрение его применимости для вычисления XANES спектров нанопленок и поверхности кристалла. В данной работе рассматриваются практические аспекты применения метода остовой дырки для расчетов XANES спектров нанопленок металлического олова (β -Sn), исследуется трансформация спектра с ростом толщины пленки и анализируется влияние

поверхности на спектр объемного материала. Параметры использованных суперъячеек составляли $2 \times 2 \times z$, где z – толщина (в единицах параметра c тетрагональной решетки олова [6]) соответствующей нанопленки вдоль оси Z . При расчете $M_{4,5}$ спектра поглощения дырка бралась на уровне $3d_{5/2}^*$.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Рассмотрим вначале строение валентной зоны нанопленок олова. Вычисленные спектры полной плотности электронных состояний (ПЭС, density of states – DOS) нанопленок олова приведены на рис. 3 (а). Цифры на рисунке обозначают толщину нанопленки z . Видно, что с ростом толщины плен-

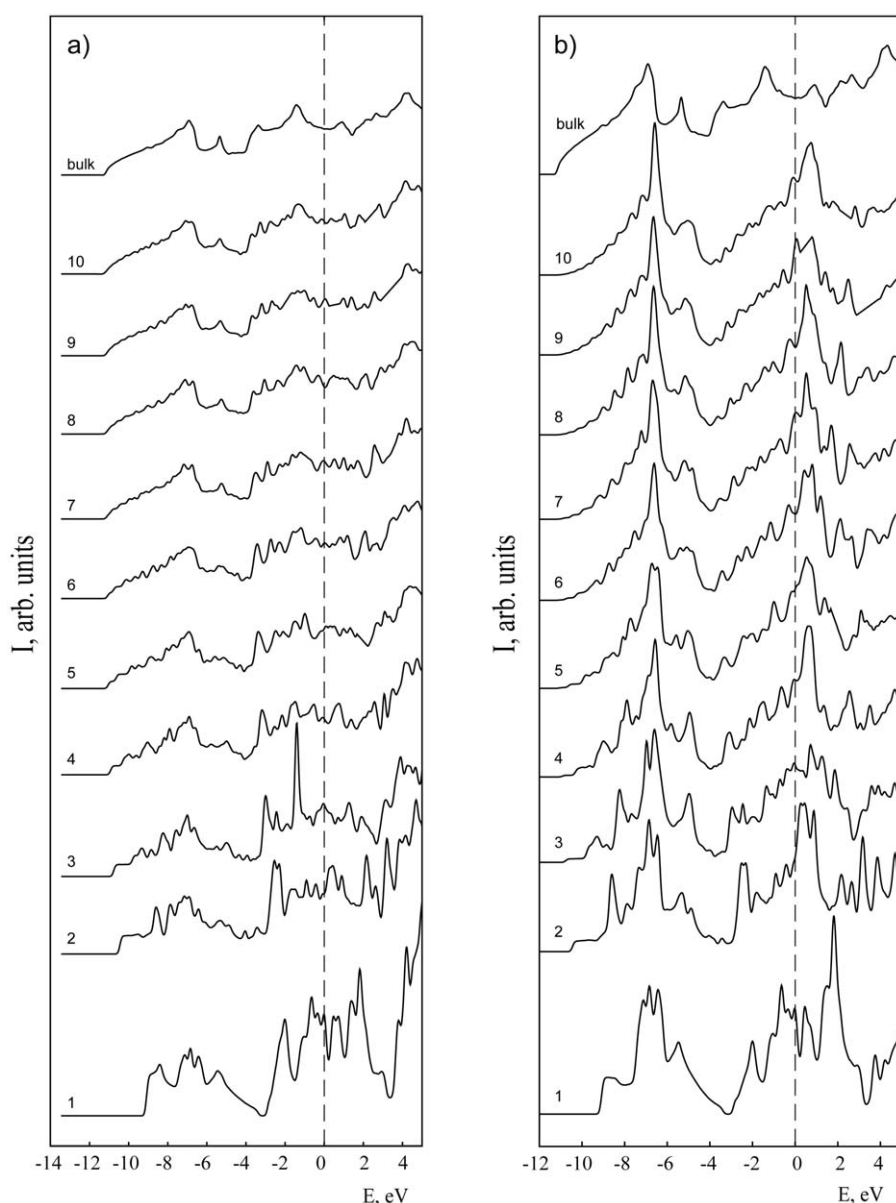


Рис. 3. Спектры полной ПЭС нанопленок олова (а), спектры ПЭС поверхностного слоя нанопленок олова (b)
[Fig. 3. Total DOS spectra of the tin nanofilms (a), and DOS spectra of surface layer of the tin nanofilms (b)]

ки происходит постепенная трансформация электронной структуры. Она выражается в изменении формы спектра полной ПЭС. С ростом толщины пленки спектр ПЭС становится все более близким по форме к спектру объемного кристалла олова, который также приведен на рис. 3 (обозначен «bulk»). Для пленки толщиной в 10 элементарных ячеек полная ПЭС воспроизводит все основные особенности, присущие спектру объемного кристалла. Наиболее яркие отличия от спектра объемного образца проявляет спектр пленки 1, поскольку, по сравнению с объемным образцом число соседних атомов для каждого атома пленки 1 оказывается значительно меньшим. В результате этого форма спектра ПЭС становится более резкой, в нем присутствует большое число локальных энергетических особенностей. Анализ парциальных вкладов состояний различной симметрии в спектр полной ПЭС нанопленки 1 показывает, что дно валентной зоны, как и в объемном образце, образовано *s*-состояниями, а прифермиевская область – *p*-состояниями. Но, в отличие от объемного образца, в нанопленке 1 *s*- и *p*-состояния практически не перекрываются. В результате в валентной зоне образуется узкая щель при энергии –3 эВ, а ширина валентной зоны уменьшается до 9.1 эВ, что меньше значения 11.32 эВ, характерного для объемного кристалла. Явление образования щели, разделяющей валентную зону на несколько частей, ранее уже наблюдалось для нанопленок силицидов хрома [14], где этому эффекту было дано схожее объяснение. Для пленки толщиной в две элементарные ячейки и более толстых пленок образования щели уже не наблюдается.

На рис. 3 (b) также представлены рассчитанные спектры ПЭС для атомов, лежащих на поверхности нанопленок различной толщины. Видно, что для пленок во всем диапазоне рассмотренных толщин, форма спектра поверхностного слоя существенно отличается от формы, характерной для объемного кристалла. При этом, как и в случае полных ПЭС нанопленок, для спектров поверхностных атомов наблюдается плавная сходимость при увеличении толщины пленки. Спектр ПЭС для поверхностного атома в пленке 10 фактически не отличается от спектра для пленки 9. Спектр поверхностного слоя характеризуется присутствием интенсивного главного максимума при –6.6 эВ, локального максимума при –5 эВ и минимума при –4 эВ. Смещение главного максимума спектра ПЭС валентной зоны относительно максимума ПЭС для объемного материала ближе к уровню Ферми и одновре-

менное увеличение его интенсивности обусловлено тем, что электрон в поверхностном слое пленки находится в более мелкой потенциальной яме, чем внутри пленки или в кристалле [15]. Кроме того, в зоне проводимости вблизи уровня Ферми E_F образуется максимум ПЭС, отсутствующий в спектрах объемных слоев. Само же значение ПЭС на уровне Ферми для атома поверхности оказывается заметно большим, чем для атомов в объеме пленки. Эти изменения происходят из-за перестройки в поверхностном слое пленки *p*-состояний атомов олова, доминирующих на уровне Ферми.

Таким образом, с увеличением толщины нанопленки наблюдается сходимость по форме как для спектра полной ПЭС нанопленки, так и для спектра ее поверхностного слоя. Сходимость формы спектра полной ПЭС объясняется тем, что с увеличением толщины нанопленки уменьшается относительный вклад поверхностных слоев в спектр полной ПЭС. Именно поверхностные слои проявляют наибольшие отличия от спектра объемного материала. Напротив, центральные слои пленок характеризуются электронными спектрами близкими по форме к спектру объемного кристалла. Причем, для пленки толщиной в 10 ячеек наблюдается фактическое достижение сходимости. Дальнейшее увеличение толщины нанопленки не приведет к сколь-нибудь значительному изменению в форме рассматриваемых спектров.

Результаты расчета локальных плотностей электронных состояний для всех неэквивалентных атомов нанопленки 10 приведены на рис. 4. Каждый спектр локальной ПЭС подписан числом, соответствующим номеру атомного слоя на рис. 2. Спектр, обозначенный «Total», отражает полную ПЭС всей нанопленки 10. Для сравнения на рис. 4 также приведена полная ПЭС для объемного монокристалла β -Sn (обозначена как «Bulk»). Выше уже отмечалось, что полная ПЭС нанопленки 10 весьма схожа с полной ПЭС объемного образца как по положению основных структурных особенностей на энергетической шкале, так и по их относительной интенсивности. Проведение послойного анализа ПЭС нанопленки позволяет выделить группу атомных слоев, лежащих внутри пленки вблизи ее центра (атомы 17–20 на рис. 2, спектры 17–20 на рис. 4), для которых ПЭС также оказывается весьма близкой к ПЭС объемного монокристалла. Это означает, что электронное строение центральных слоев пленки 10 близко к строению объемного кристалла. Этот факт дает основание считать нанопленку 10 достаточно протяженной и рассматривать резуль-

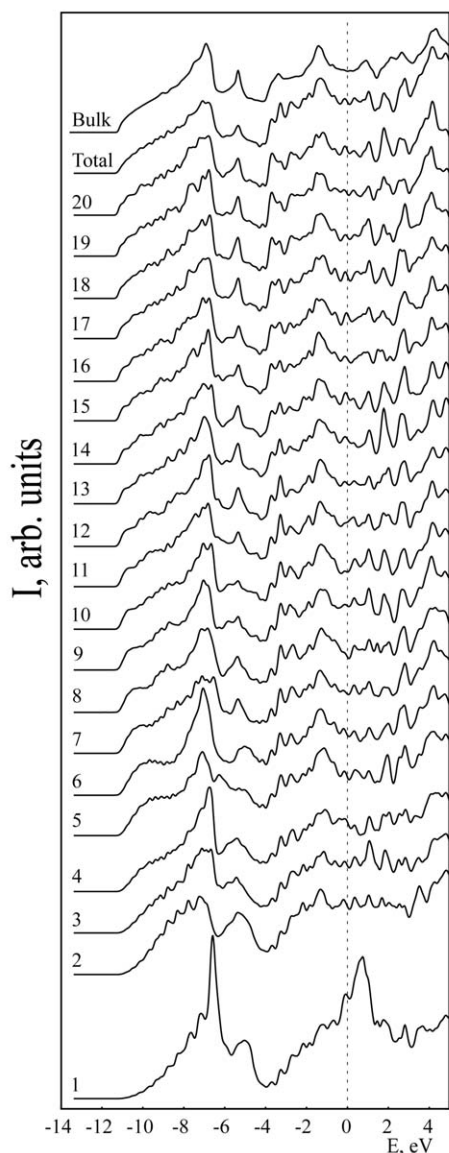


Рис. 4. ПЭС атомных слоев нанопленки Sn 10 в сравнении с полной ПЭС пленки и ПЭС объемного монокристалла

[Fig. 4. DOS spectra of atomic layers of Sn 10 nanofilm compared with the total DOS of the same film and total DOS of the bulk single crystal]

таты расчета ее электронной структуры в качестве модели, описывающей изменение свойств олова при движении от объема монокристалла к его поверхности. Такая модель описывает процесс постепенной трансформации электронной структуры материала при послойном переходе от объемной области кристалла к его поверхности.

По мере движения от объема пленки к ее поверхности спектры ПЭС для соответствующих атомных слоев претерпевают все большие изменения. При этом спектры, соответствующие слоям с 9 по

16, по-прежнему достаточно хорошо воспроизводят основные особенности спектра объемного образца Sn. Существенные отличия наблюдаются только для спектров, соответствующих атомным слоям с 1 по 8. Из этого можно заключить, что влияние, оказываемое поверхностью на слои, лежащие глубже, чем ~ 5 Å, оказывается не слишком значительным.

Теперь перейдем к обсуждению особенностей строения зоны проводимости нанопленок олова. Рассмотрим вначале спектры XANES Sn $M_{4,5}$, рассчитанные в отсутствие остальной дырки, для атомов, расположенных в поверхностном (см. рис. 5a) и в центральном (см. рис. 5b) слое нанопленок. Это позволит определить влияние, оказываемое поверхностью на форму XANES спектра. Видно, что спектры для атомов на поверхности существенно отличаются по форме от спектров для атомов в центральном слое той же нанопленки, что свидетельствует о значительной перестройке электронной структуры поверхностных слоев по сравнению с объемными слоями. При этом для каждой из групп спектров с ростом толщины нанопленки наблюдается плавное изменение формы спектральной кривой, которая постепенно сходится к некоторой предельной форме. Предельная форма XANES $M_{4,5}$ спектра для атома на поверхности нанопленки характеризуется присутствием двух максимумов: узкого интенсивного пика непосредственно у края поглощения и широкого слабоинтенсивного максимума при 5 эВ, что наиболее заметно для спектра нанопленки 10.

Форма спектра, соответствующего центральному слою нанопленок, показывает большую чувствительность к изменению толщины нанопленки. Однако для нее также наблюдается уверенная сходимость, и спектр центрального слоя нанопленки толщиной в 10 элементарных ячеек оказывается близок к спектру объемного кристалла (рис. 5b). Это свидетельствует о том, что такая нанопленка имеет толщину, достаточную, чтобы электронное строение ее центральных слоев в целом соответствовало электронному строению объемного кристалла. Как и в случае спектров валентной зоны, сходимость спектров зоны проводимости дает возможность трактовать результаты расчета электронной структуры пленки 10 в качестве «модели», описывающей трансформацию электронной структуры олова при движении от объемной области кристалла к его поверхности.

Таким образом, видно, что, как и для спектра валентной зоны, в случае спектров зоны проводимости поверхность сама по себе приводит к существенной перестройке электронной структуры.

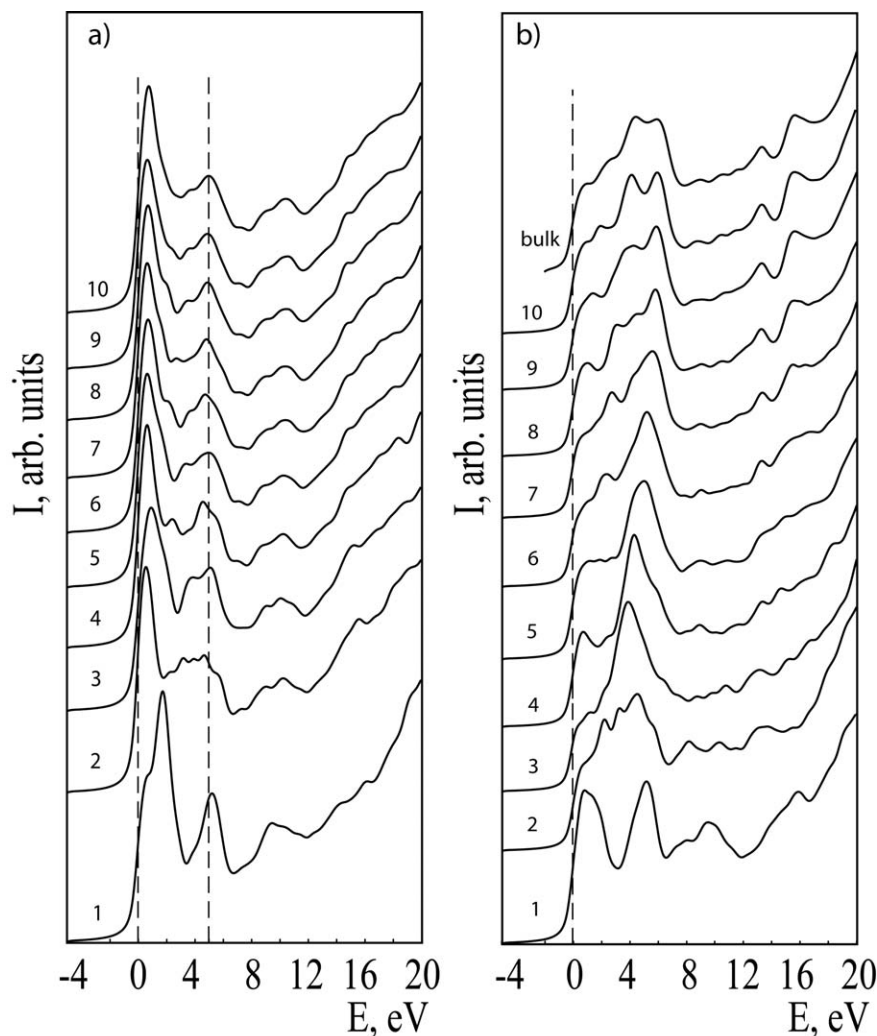


Рис. 5. Спектры XANES Sn $M_{4,5}$ поверхностного (a) и центрального (b) слоя нанопленок металлического олова
 [Fig. 5. Sn $M_{4,5}$ edge XANES spectra of the surface (a) and central (b) layers of the metal tin nanofilms]

В то же время слои, лежащие в центральной части пленки, обладают электронной структурой, сходной с объемным кристаллом.

Теперь рассмотрим влияние, оказываемое на форму спектра учетом остовой дырки. На рис. 6 приведены XANES Sn $M_{4,5}$ спектры, полученные для атомов поверхности нанопленки с учетом остовой дырки. Как и в предыдущих случаях, с ростом толщины нанопленки наблюдается плавная сходимость формы спектральной кривой. При сравнении полученного результата с аналогичными спектрами, рассчитанными без учета остовой дырки, видно, что форма спектра для атома в поверхностном слое нанопленки претерпевает лишь незначительные изменения (рис. 7a). Основные особенности тонкой структуры сохраняют свое положение и относительное соотношение интенсивностей для пленок толщиной в 7 элементарных ячеек и больше.

Напротив, для спектра объемного материала ситуация выглядит принципиально другой. На рис. 7b приведено сравнение спектров, характеризующих объемный кристалл олова, полученных с учетом и без учета остовой дырки. Спектр, вычисленный с учетом остовой дырки, был получен для суперъячейки кристалла размера $3 \times 3 \times 4$ в работе [13]. Учет остовой дырки в процессе расчета приводит к существенной перестройке тонкой структуры спектра. При этом форма спектральной кривой становится близка к экспериментальной.

Таким образом, для объемных кристаллов возмущение, вносимое остовой дыркой, оказывается существенным и обязательно должно быть учтено при расчете XANES спектров. С другой стороны, для поверхностных слоев нанопленок влияние, оказываемое остовой дыркой, почти не сказывается на форме спектра. Причиной этого, веро-

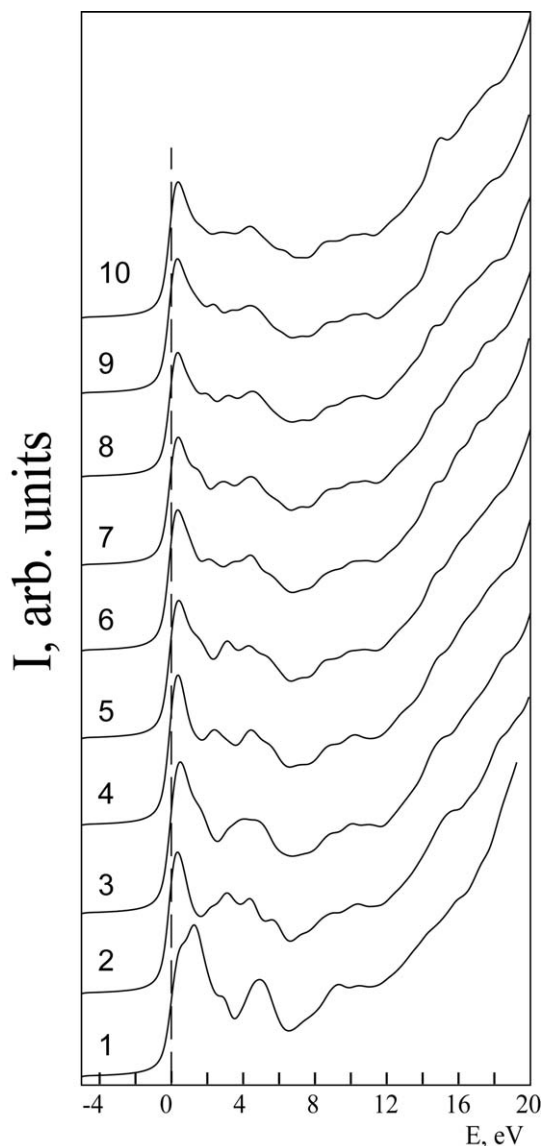


Рис. 6. Спектры XANES Sn $M_{4,5}$ поверхностного слоя нанопленок олова, рассчитанные с учетом остовой дырки. Число на рисунке обозначает толщину нанопленки [Fig. 6. Sn $M_{4,5}$ edge XANES spectra of the surface layer of tin nanofilms, calculated with core hole. The number in the figure indicates the thickness of the nanofilm]

янее всего, оказывается меньшая величина возмущения, вносимого остовой дыркой, по сравнению с возмущением, вносимым поверхностью. Поэтому результаты расчета спектров XANES для поверхностных слоев нанопленок даже без учета остовой дырки могут использоваться для трактовки экспериментальных данных.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе впервые представлены результаты расчета электронно-энергетического строения сверхтонких нанопленок металлического олова. Пока-

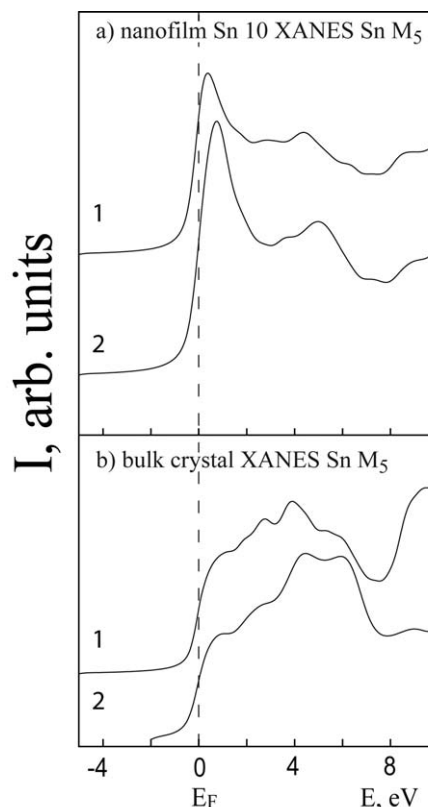


Рис. 7. Влияние остовой дырки на форму XANES спектра для атома в поверхностном слое нанопленки 10 (a) и объемного кристалла (b). Кривая 1 – спектр, вычисленный с учетом остовой дырки, кривая 2 – спектр, вычисленный без учета остовой дырки.

[Fig. 7 The effect of core hole on the shape of the XANES spectrum for the atom of the surface layer of 10 nanofilm (a) and bulk crystal (b). Curve 1 – spectra, calculated with core hole, curve 2 – spectra, calculated without core hole]

зана зависимость между энергетической структурой нанопленок и их толщиной. Предложена модель поверхности объемного кристалла. Показано, что уже на глубине $\sim 5 \text{ \AA}$ от поверхности материала спектры ПЭС соответствующих слоев оказываются близки к ПЭС объемного образца. Результаты работы будут полезны при дальнейшем исследовании электронной структуры реальных образцов поверхности и нанопленок олова экспериментальными методами, в т. ч. методами фотоэлектронной спектроскопии и XANES.

Расчеты были проведены на вычислительных мощностях Центра Обработки Данных (ЦОД) ВГУ. Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 16-32-00860 мол_a, при финансовой поддержке РФФИ и правительства Воронежской области в рамках научного проекта № 16-42-360612 p_a.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Рябцев С. В., Чувенкова О. А., Канныкин С. В., Попов А. Е., Рябцева Н. С., Воищев С. С., Турищев С. Ю., Домашевская Э. П. // *ФТП*, 2016, т. 50, № 2, с. 180–184.
2. Batzill M., Diebold U. // *Progress in Surface Science*, 2005, vol. 79, № 2–4, pp. 47–154.
3. Hishita S., Stryhal Z., Sakaguchi I., Ohashi N., Saito N., Haneda H. // *Thin Solid Films*, 2004, vol. 464–465, pp. 146–149.
4. Borra V., Georgiev D. G, 2016, vol. 616, pp. 311–315.
5. Takeuchi K., Adachi S. // *Journal of Applied Physics*, 2009, vol. 105, № 7, p. 073520. DOI: 10.1063/1.3106528
6. Кристаллографическая и кристаллохимическая База данных для минералов и их структурных аналогов. Институт экспериментальной минералогии. РАН. Режим доступа: <http://database.iem.ac.ru/mincryst/>
7. Бекенев В. Л., Зубкова С. М. // *ФТП*, 2017, т. 51, № 1, с. 26–35.
8. Schwarz K., Blaha P. // *Computational Materials Science*, 2003, vol. 28, № 2, pp. 259–273.
9. Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M. // *Physical Review Letters*, 1996, vol. 77, № 18, p. 3865–3868.
10. Hebert C., Luitz J., Schattschneider P. // *Micron*, 2003, vol. 34, № 3–5, pp. 219–225.
11. Курганский С. И., Манякин М. Д., Дубровский О. И., Чувенкова О. А., Турищев С. Ю., Домашевская Э. П. // *ФТП*, 2014, т. 56, № 9, с. 1690–1695.
12. Manyakin M. D., Kurganskii S. I., Dubrovskii O. I., Chuvankova O. A., Domashevskaya E. P., Ryabtsev S. V., Ovsyannikov R., Turishchev S. Yu. // *Computational Materials Science*, 2016, vol. 121, pp. 119–123.
13. Манякин М. Д., Курганский С. И., Дубровский О. И., Чувенкова О. А., Лихачев Е. Р., Коюда Д. А., Домашевская Э. П., Овсянников Р., Турищев С. Ю. // *Конденсированные среды и межфазные границы*, 2016, т. 18, № 3, с. 356–366.
14. Переславцева Н. С., Уткин Д. М., Курганский С. И. // *Вестник ВГУ. Серия: Физика. Математика*, 2010, № 1, с. 45–50.
15. Kurganskii S. I., Pereslavitseva N. S. // *Physica Status Solidi (b)*, 2000, vol. 218, № 2, p. 431–439.

AB INITIO CALCULATION OF ELECTRONIC ENERGY SPECTRUM OF METALLIC TIN ULTRATHIN NANOFILMS

© 2017 M. D. Manyakin¹, S. I. Kurganskii¹, O. I. Dubrovskii¹, E. R. Likhachev²

¹Voronezh State University, Universitetskaya sq., 1, 394018 Voronezh, Russia

²Military Educational and Scientific Center of the Air Force «N. E. Zhukovsky and Y.A. Gagarin Air Force Academy»,
54A Staryh Bol'shevikov str., 394064 Voronezh, Russia
e-mail: manyakin@phys.vsu.ru

Received 15.11.2017

Abstract. The results of *ab initio* computer modeling of the electronic structure of metallic tin (β -Sn) ultrathin nanofilms of various thickness are presented. The spectra of total and local partial densities of electronic states have been calculated using the linearized augmented plane wave (LAPW) method in the approximation of layered superlattice. The $M_{4,5}$ X-ray absorption near-edge fine structure spectra for the surface layers of nanofilms have been calculated by simulating the supercell, using the “core-hole” approximation. Convergence to the some ultimate form with an increase of the nanofilm thickness is obtained for all types of spectra. It is shown, that the nanofilm of 10 unit cell thickness is sufficient extended, and its results of band structure calculation can be regarded as a model, describing modification of features of tin under moving from the bulk of single crystal towards its surface. It has been shown that quite at the distance $\sim 5 \text{ \AA}$ from surface of material the DOS spectra of the appropriate layers appear to be close to the DOS of bulk specimen. The spectrum of total density of states of atom on the nanofilm surface is characterized by the presence of the high sharp maximum at -7 eV . XANES $M_{4,5}$ spectrum also demonstrates an appearance of the sharp maximum near the Fermi level. Effect of the “core-hole” approximation on the result of calculation of XANES spectrum of the surface atom of nanofilm has been studied. Unlike the bulk sample, accounting for core hole in case of a nanofilm changes the form of a spectral curve only slightly. The reason for this is, most likely, the smaller value of the perturbation introduced by the core hole, in comparison with the perturbation introduced by the surface of the nanofilm.

Keywords: metallic tin, nanofilm, electronic structure, LAPW method, ab initio calculations, XANES.

ACKNOWLEDGEMENTS

Calculations were carried out at the computing facilities of the Data Processing Center (DPC) of VSU.

This work was financially supported by the RFBR grant within the framework of the scientific project No. 16-32-00860 mol_a, and the Voronezh Region government in the framework of the scientific project No. 16-42-360612 p_a.

REFERENCES

1. Ryabtsev S. V., Chuvenkova O. A., Kannykin S. V., Popov A. E., Ryabtseva N. S., Voishev S. S., Turishchev S. Yu., Domashevskaya E. P. *Semiconductors*, 2016, vol. 50, no. 2, pp. 180–184. DOI: 10.1134/S1063782616020214
2. Batzill M., Diebold. U. *Progress in Surface Science*, 2005, vol. 79, no. 2–4, pp. 47–154. DOI: 10.1016/j.progsurf.2005.09.002
3. Hishita S., Stryhal Z., Sakaguchi I., Ohashi N., Saito N., Haneda H. *Thin Solid Films*, 2004, vol. 464–465, pp. 146–149. DOI: 10.1016/j.tsf.2004.06.072
4. Borra V., Georgiev D. G., Grice C. R. *Thin Solid Films*, 2016, vol. 616, pp. 311–315. DOI: 10.1016/j.tsf.2016.08.042
5. Takeuchi K., Adachi S. *Journal of Applied Physics*, 2009, vol. 105, no. 7, p. 073520. DOI: 10.1063/1.3106528
6. *Crystallographic and Crystallochemical Database for Minerals and their Structural Analogues*. Institute of Experimental Mineralogy. Russian Academy of Sciences. Available at: <http://database.iem.ac.ru/mincryst/>
7. Bekenev V. L., Zubkova S. M. *Semiconductors*, 2017, vol. 51, no. 1, pp. 23–33. DOI: 10.1134/S106378261701002X
8. Schwarz K., Blaha P. *Computational Materials Science*, 2003, vol. 28, no. 2, pp. 259–273. DOI: 10.1016/S0927-0256(03)00112-5
9. Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M. *Physical Review Letters*, 1996, vol. 77, no. 18, pp. 3865–3868. DOI: 10.1103/PhysRevLett.77.3865
10. Hebert C., Luitz J., Schattschneider P. *Micron*, 2003, vol. 34, no. 3–5, pp. 219–225. DOI: 10.1016/S0968-4328(03)00030-1
11. Kurganskii S. I., Manyakin M. D., Dubrovskii O. I., Chuvenkova O. A., Turishchev S. Yu., Domashevskaya E. P. *Physics of the Solid State*, 2014, vol. 56, no. 9, pp. 1748–1753. DOI: 10.1134/S1063783414090170
12. Manyakin M. D., Kurganskii S. I., Dubrovskii O. I., Chuvenkova O. A., Domashevskaya E. P., Ryabtsev S. V., Ovsyannikov R., Turishchev S. Yu. *Computational Materials Science*, 2016, vol. 121, p. 119–123. DOI: 10.1016/j.commatsci.2016.04.034
13. Manyakin M. D., Kurganskii S. I., Dubrovskii O. I., Chuvenkova O. A., Likhachev E. R., Koyuda D. A., Domashevskaya E. P., Ovsyannikov R., Turishchev S. Yu. *Condensed Matter and Interphases*, 2016, vol. 18, no. 3, pp. 356–366. Available at: http://www.kcmf.vsu.ru/resources/t_18_3_2016_006.pdf (in Russian)
14. Pereslavl'tseva N. S., Utkin D. M., Kurganskii S. I. *Proceedings of Voronezh State University. Series: Physics. Mathematics*, 2010, no. 1, pp. 45–50. Available at: <http://www.vestnik.vsu.ru/pdf/physmath/2010/01/2010-01-06.pdf> (in Russian)
15. Kurganskii S. I., Pereslavl'tseva N. S. *Physica Status Solidi (b)*, 2000, vol. 218, no. 2, pp. 431–439. DOI: 10.1002/1521-3951(200004)218:2<431::AID-PSSB431>3.0.CO;2-5

Манякин Максим Дмитриевич – ведущий инженер, кафедра физики твердого тела и наноструктур, Воронежский государственный университет; тел.: +7(473) 2208363, e-mail: manyakin@phys.vsu.ru

Курганский Сергей Иванович – д. ф.-м. н., профессор, кафедра физики твердого тела и наноструктур, Воронежский государственный университет; тел.: +7(473) 2208363, e-mail: kurganskii@phys.vsu.ru

Дубровский Олег Игоревич – к. ф.-м. н., доцент, кафедра физики твердого тела и наноструктур, Воронежский государственный университет; тел.: +7(473) 2208363, e-mail: dubrovskiy@phys.vsu.ru

Лихачев Евгений Робертович – к. ф.-м. н., доцент, кафедра физики и химии, Военный учебно-научный центр Военно-воздушных сил «Военно-воздушная академия имени профессора Н. Е. Жуковского и Ю. А. Гагарина»; e-mail: lih73@mail.ru

Manyakin Maxim D. – Leading Engineer, Solid State Physic and Nanostructures Department, Voronezh State University; ph.: +7(473)2208363, e-mail: manyakin@phys.vsu.ru

Kurganskii Sergey I. – Dr. Sci. (Phys.-Math.), Professor, Solid State Physic and Nanostructures Department, Voronezh State University; ph.: +7(473) 2208363, e-mail: kurganskii@phys.vsu.ru

Dubrovskii Oleg I. – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Assistant Professor, Solid State Physic and Nanostructures Department, Voronezh State University; ph.: +7(473)2208363, e-mail: dubrovskiy@phys.vsu.ru

Likhachev Eugeny R. – Cand. Sci. (Phys.-Math.), Assistant Professor, Physics and Chemistry Department, Military Educational and Scientific Center of the Air Force «N. E. Zhukovsky and Y. A. Gagarin Air Force Academy»; e-mail: lih73@mail.ru