03,08

# Электронная структура валентной зоны нитрида галлия при адсорбции натрия

© М.Н. Лапушкин[1], А.М. Мизеров[2], С.Н. Тимошнев[2]

[1] Физико-технический институт имени А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Россия
[2] Санкт-Петербургский национальный исследовательский Академический университет имени Ж.И. Алфёрова РАН,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: lapushkin@ms.ioffe.ru

Поступила в Редакцию 20 марта 2025 г.
В окончательной редакции 22 марта 2025 г.
Принята к публикации 24 марта 2025 г.

Проведены исследования электронной структуры границы раздела Na/GaN с помощью метода фотоэлектронной спектроскопии с использованием синхротронного излучения в диапазоне энергий фотонов 75−770 eV. Для определения физических свойств поверхности GaN при адсорбции Na были произведены расчеты плотности состояний с помощью метода функционала плотности. 2D-слой GaN моделировался суперъячейкой GaN(0001) $2 \times 2 \times 2$, содержащей 10 бислоев GaN. Показано, что предпочтительна адсорбция атомов Na в ямочной позиции и над поверхностными атомами N, а энергии адсорбции атомов натрия равны −1.96 и −1.93 eV, соответственно. Установлено, что адсорбция Na приводит к формированию поверхностных состояний, электронная плотность которых локализована вблизи уровня Ферми.

**Ключевые слова:** GaN, натрий, адсорбция, фотоэлектронная спектроскопия, метод функционала плотности.

DOI: 10.61011/FTT.2025.04.60542.53-25

## 1. Введение

Интенсивные исследования нитрида галлия связаны с улучшением качества эпитаксиальных слоев и увеличением доступности подложек. Уникальные физико-химические свойства, такие как широкая и прямая запрещенная зона, высокая подвижность электронов, отличная теплопроводность и высокое напряжение пробоя, делают GaN перспективным кандидатом для различных электронных и оптоэлектронных устройств, в том числе для высокомощных и высокочастотных приложений [1,2]. Также этот полупроводник обладает высокой химической и термической стойкостями, что позволяет электронному оборудованию на его основе работать в экстремальных условиях. Правильная работа устройства зависит от структуры, свойств и качества поверхности. Также ключевую роль играет контакт между металлом и полупроводником, который может проявлять различные электрические свойства.

Электронная структура поверхности GaN широко изучалась во многих аспектах. Исследованиям электронных и фотоэмиссионных свойств поверхности GaN(0001) при адсорбции щелочных металлов уделялось большое внимание [3–6]. Существует большое количество расчетов поверхности GaN и адсорбции различных химических элементов, в том числе и щелочных металлов, ссылки на которые приведены в детальном обзоре [7]. В работах [8–11] показано существование зоны поверхностных состояний на уровне Ферми. Адсорбция атомов натрия при покрытиях менее 1/8 монослоя (ML) на поверхности гексагонального монослоя $g$-GaN была рассчитана в работе [12]. Было показано, что энергия связи ($E_b$) уменьшается с ростом натриевого покрытия, и при покрытии 1/8 ML $E_b$ равна −1.04 eV, и на уровне Ферми расположена зона состояний Na. В работе [13] исследована адсорбция атомов натрия на торцевой поверхности нанонити, состоящей из двух бислоев GaN. Адсорбция атома Na предпочтительна в ямочной позиции в центре нанонити, и энергия связи составляет −1.19 eV. Также наблюдается зона состояний Na на уровне Ферми, которая обусловлена гибридизацией Ga $4p$, N $2p$ и Na $2p$ орбиталей. Расчет, выполненный в работе [14], показал, что адсорбция щелочных металлов, в том числе и Na, на поверхности $g$-GaN приводит к улучшению адсорбционных свойств $g$-GaN, и его можно применять при создании сенсоров простых газов.

В данной работе была поставлена задача впервые исследовать влияние адсорбции атомов Na на валентную зону GaN(0001) с помощью метода фотоэлектронной спектроскопии с использованием синхротронного излучения, а также провести расчет адсорбции атомов Na на поверхность GaN(0001) с помощью метода функционала плотности.

## 2. Экспериментальная установка и получение образцов

Эпитаксиальный рост образцов GaN осуществлялся на промышленной установке Veeco GEN200 с использованием метода молекулярно-пучковой эпитаксии с плазменной активацией азота (МПЭ ПА). В качестве

подложки был использован темплейт GaN/$c$-$Al_2O_3$ (толщина $\sim 2\,\mu$m), выращенный с помощью метода металлоорганического химического осаждения из паровой фазы. Для продолжения роста с помощью метода МПЭ ПА виртуальная подложка была предварительно обезжирена. Непосредственно перед ростом темплейт был нитридизован при температуре подложки $T_S = 870$ K в течение 60 min. Затем была применена отработанная процедура очистки, заключающаяся в особой процедуре Ga-осаждения [15]. Рост проводился при постоянных значениях температуры подложки $T_S = 960$ K и потоков галлия $F_{Ga} \approx 0.25\,\mu$m/h и азота $F_N \approx 0.05\,\mu$m/h. Концентрация носителей была $n \approx 2 \cdot 10^{17}$ sm$^{-3}$ по результатам измерения эффекта Холла при комнатной температуре. Толщина полученных эпитаксиальных слоев GaN составляла $\sim 200$ nm.

Фотоэмиссионные исследования были проведены на Российско-Германской линии синхротрона BESSY II (Берлин, Германия) с использованием фотоэлектронной спектроскопии (ФЭС). Энергия фотонов была в диапазоне от 75 до 770 eV. Исследования проводились *in situ* в сверхвысоком вакууме $5 \cdot 10^{-10}$ Torr при комнатной температуре. Образцы предварительно отжигались при температуре $\sim 870$ K. Незначительное количество кислорода O 1$s$ и углерода C 1$s$ было зарегистрировано. Атомарно-чистый натрий напылялся пошагово на чистую поверхность образца из стандартного источника. Спектры приведены к энергии относительно уровня Ферми $E_F$. Для всех приведенных фотоэлектронных спектров фон был вычтен по методу Ширли [16].

## 3. Детали расчета

Теоретические расчеты проведены в рамках теории функционала плотности (DFT), реализованного в пакете QUANTUM ESPRESSO [17] с использованием обменно-корреляционного функционала, описанного в аппроксимации локальной плотности (LDA — local density approximation) в форме Perdew-Zinger (PZ) интерполяции [18]. Нитрид галлия (GaN) имеет структуру вюрцита со следующими параметрами решетки: $a = b = 3.219$ Å и $c = 5.240$ Å. В расчетах была использована суперъячейка (0001) $2 \times 2 \times 2$, состоящая из 10 бислоев GaN (см. рис. 1). Один атом Na приходится на 4 поверхностных атома Ga. Связи атомов азота нижнего бислоя GaN были насыщены псевдоатомами водорода. Вакуумный зазор между 2D-слоями был 18 Å, чтобы избежать влияния паразитных электрических полей. Ограничение кинетической энергии и ограничение плотности заряда были выбраны 39 и 350 Ry, соответственно. Релаксации подвергался только верхний бислой GaN. Релаксация параметров суперъячейки осуществлялась до тех пор, пока модули сил не оказывались меньше $10^{-7}$ Ry/Bohr.

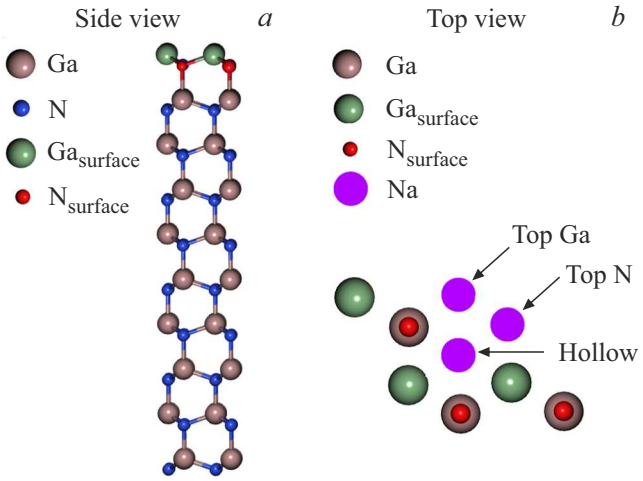


**Рис. 1.** Схема 2D-слоя GaN(0001): $a$ — вид сбоку; $b$ — вид сверху. Места адсорбции атомов Na на 2D-слое GaN. Синий шар — атом N, коричневый шар — атом Ga, зеленый шар — поверхностный атом Ga, красный шар — поверхностный атом N, фиолетовый шар — атом Na.

## 4. Результаты и обсуждение

### 4.1. Электронная структура

Была рассчитана энергия адсорбции ($E_{ads}$) адатомов натрия в трех положениях: сверху над атомом Ga (top Ga), над атомом N (top N) и в ямочной позиции (hollow) (см. рис. 1, $b$) по следующей формуле:

$$E_{ads} = (E_{GaN_Na} - E_{GaN} - E_{Na}), \quad (1)$$

где $E_{GaN}$_Na и $E_{GaN}$ — полные энергии с адсорбированным натрием и без него, $E_{Na}$ — полная энергия атома натрия. Мостиковые позиции между атомами Ga (N) являются неустойчивыми. Наибольшая энергия адсорбции, которая соответствует предпочтительному месту адсорбции Na, получена для ямочной позиции: $E_{ads} = -1.96$ eV, немного меньшая $E_{ads} = -1.93$ eV получена для позиции над атомом N, и еще меньшее значение $E_{ads} = -1.68$ eV получено для позиции над атомом Ga. Отличие от значений $E_{ads}$, полученных в работах [12,13], связано с разными 2D-моделями слоев GaN. Расстояние между атомом Na и плоскостью поверхностных атомов Ga равно 2.38 Å в случае адсорбции в ямочной позиции. Наблюдается незначительная реконструкция поверхности GaN, индуцированная адсорбцией атомов Na за счет взаимодействия валентных электронов адсорбционной системы: поверхностные атомы S бислоя GaN сдвигаются вверх на 0.15 Å относительно S-1 бислоя GaN. При адсорбции атомов натрия над атомом азота расстояние между атомом Na и плоскостью поверхностных атомов Ga равно 2.38 Å. Происходит сдвиг вверх поверхностных атомов S бислоя GaN на 0.14 Å относительно S-1 бислоя GaN.

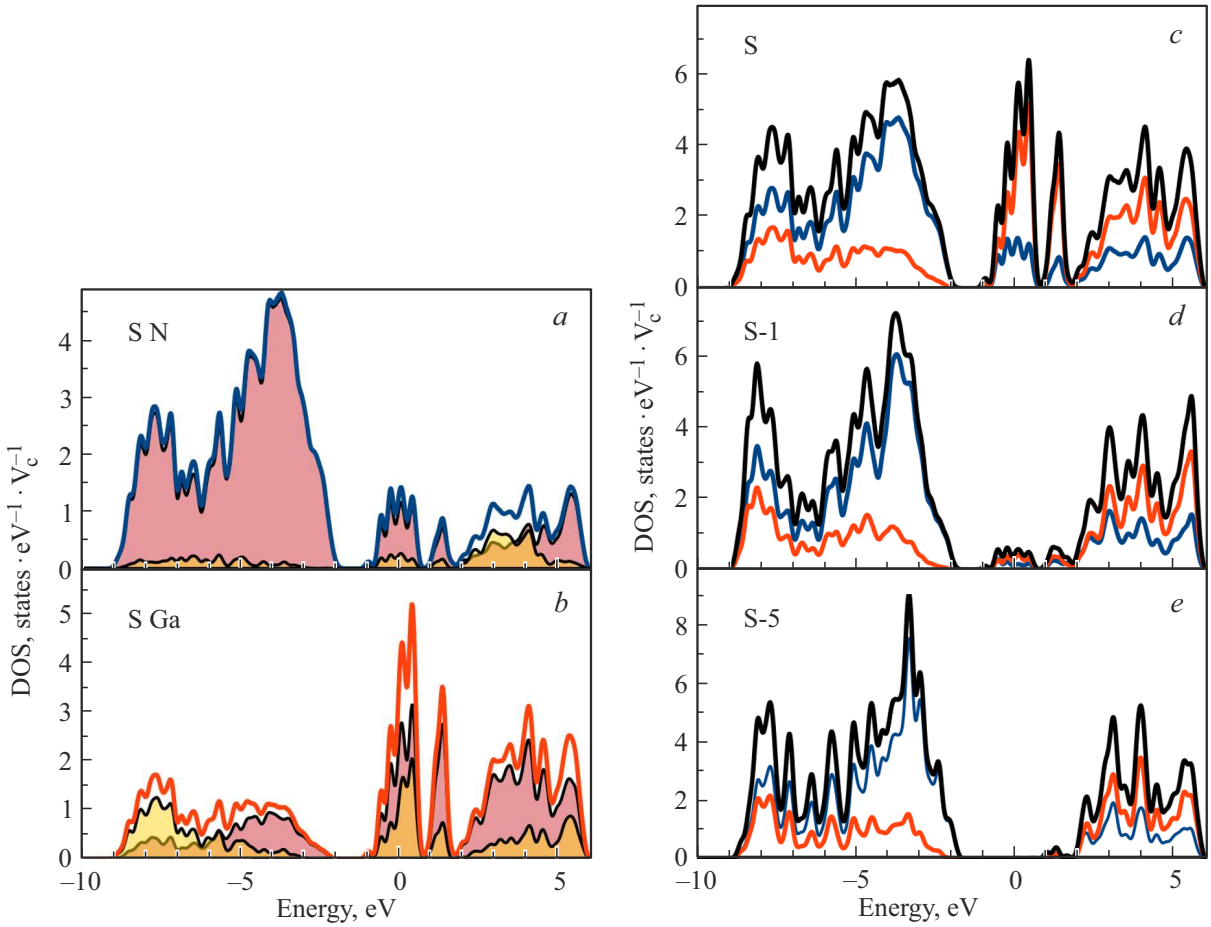


**Рис. 2.** Рассчитанные полная и парциальная плотности состояний 2D-слоя GaN(0001). Парциальные плотности состояний N (*a*) и Ga (*b*) для поверхностного (S) бислоя GaN. Полная и парциальная плотности состояний для S (*c*), S-1 (*d*) и S-5 (*e*) бислоев GaN. $V_c$ — объем элементарной ячейки. Полная плотность состояний – черный цвет, N — синий цвет, N 2*s* — желтый цвет с заливкой, N 2*p* — кирпичный цвет с заливкой, Ga — красный цвет, Ga 4*p* — коричневая заливка и Ga 4*s* — желтая заливка.

На рис. 2 представлены результаты расчета электронной плотности релаксированной чистой поверхности GaN(0001) для поверхностного S (рис. 2, *a*–*c*), второго S-1 (рис. 2, *d*) и шестого S-5 бислоев от поверхности GaN (рис. 3, *e*). Валентная зона S-5 бислоя GaN соответствует валентной зоне кристалла GaN. Ширина запрещенной зоны $\sim 2.3$ eV. Валентная зона сформирована с преобладающим вкладом состояний N 2*p* и состояний Ga 4*s* и Ga 4*p* с двумя максимумами при энергии $-3.4$ eV и $-8.0$ eV. На рис. 2, *a* и 2, *b* представлены парциальные плотности локальных состояний поверхностных атомов азота и галлия, соответственно. На металлизацию поверхности указывает наличие узкого пика на уровне Ферми ($E_F$) зоны поверхностных состояний, которая сформирована в основном состояниями Ga 4*p*. Также на $E_F$ имеется пик состояний N 2*p*, что отражает тот факт, что в бислое GaN атомы азота расположены ниже атомов Ga на 0.75 Å, и имеется псевдощель шириной 0.62 eV. Плотность поверхностных электронных состояний резко убывает с удалением от поверхности, так для S-1 бислоя она меньше почти в 10 раз, чем для поверхностного S бислоя. Электронная структура S-5 бислоя соответствует электронной структуре кристалла GaN (рис. 2, *e*). Похожие изменения плотности электронных состояний для слоев по мере удаления от поверхности показаны, например в работе [19]. Результаты расчета чистой поверхности хорошо совпадают с теоретическими расчетами [7,12,13,20] и экспериментальными данными [7].

Результаты расчета электронной плотности после адсорбции натрия на поверхности GaN(0001) в ямочной позиции и над поверхностным атомом азота представлены на рис. 3 и на рис. 4, соответственно. Адсорбция атомов Na на GaN в различных адсорбционных местах не оказывает влияния на валентную зону в глубине слоя GaN (рис. 3, *f* и 4, *f*).

На рис. 3, *a* и 4, *a* представлена зона поверхностных состояний натрия, которая образуется после адсорбции на GaN. Зона занятых состояний расположена ниже $E_F$ и она состоит из двух пиков с энергией связи $-0.78$ и $-0.26$ eV при адсорбции натрия в ямочной позиции и с энергией связи $-0.72$ и $-0.23$ eV при адсорбции натрия

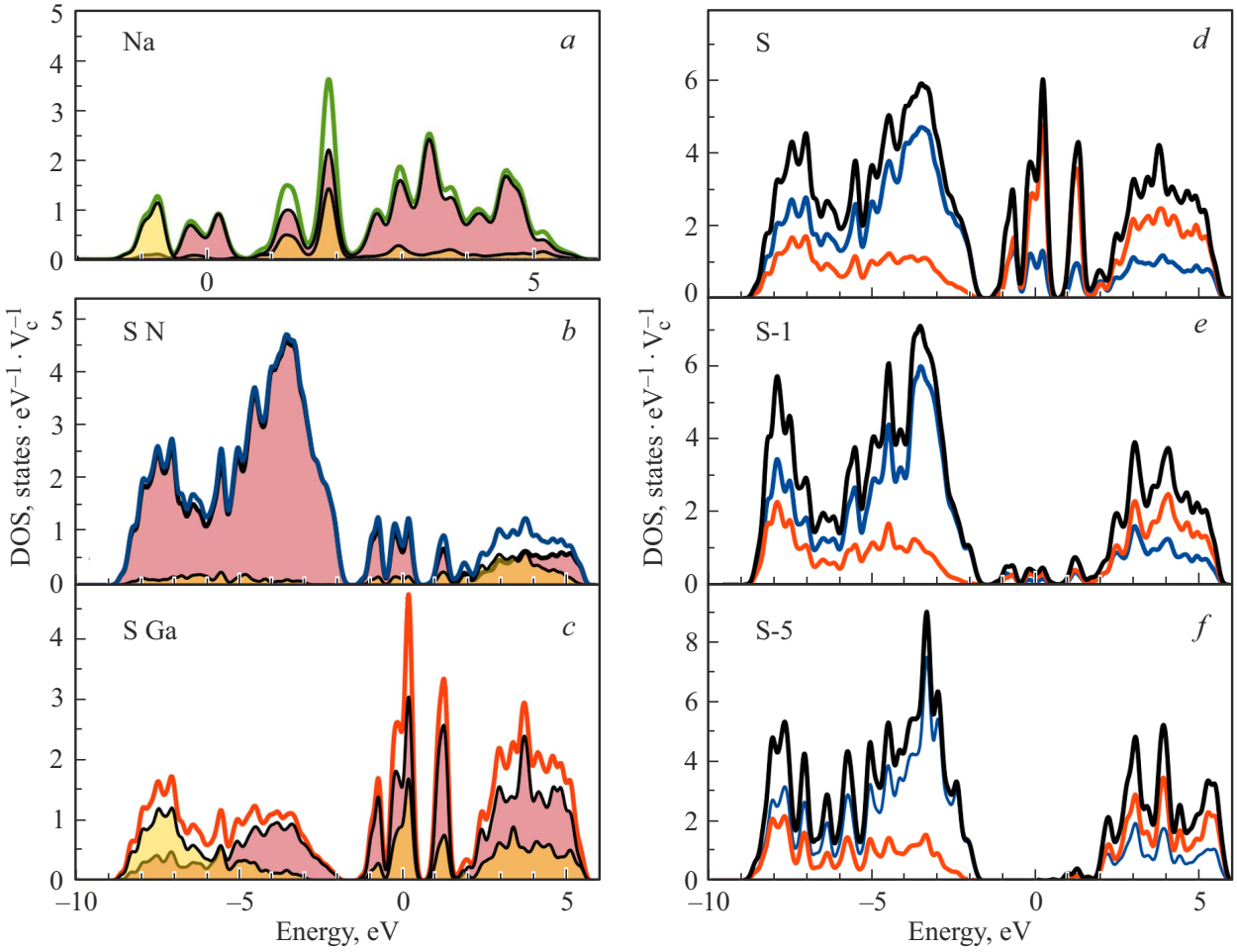


**Рис. 3.** Рассчитанные полная и парциальная плотности состояний 2D-слоя GaN(0001) в случае адсорбции Na в ямочной позиции. Полная и парциальная плотности состояний Na (*a*): полная плотность состояний — зеленый цвет, Na 3*s* — желтая заливка, Na 3*p*— коричневая заливка. Парциальные плотности состояний N (*b*) и Ga (*c*) для поверхностного S бислоя GaN. Полная и парциальная плотности состояний для S (*d*), S-1 (*e*) и S-5 (*f*) бислоев GaN. $V_c$ — объем элементарной ячейки. Полная плотность состояний — черный цвет, N — синий цвет, N 2*s* — желтый цвет с заливкой, N 2*p* — кирпичный цвет с заливкой, Ga — красный цвет, Ga 4*p* — коричневая заливка и Ga 4*s* — желтая заливка.

над атомом азота. Такое незначительное расхождение связано с тем, что зона занятых поверхностных состояний сформирована из Na 3*s* состояний. Зона незанятых состояний образована Na 3*s* и Na 3*p* состояниями.

Валентная зона GaN в поверхностном слое после адсорбции натрия изменяется (рис. 3, *b*–*d* и 4, *b*–*d*). Так уменьшается псевдощель со значения 0.62 до 0.12 eV в случае адсорбции Na в ямочной позиции и 0.14 eV в случае адсорбции над атомом азота. Зона поверхностных состояний GaN вблизи уровня Ферми видоизменяется с широкого пика на три хорошо разделенных пика с максимумами −0.81, 0.08 и 1.25 eV в случае адсорбции Na в ямочной позиции и −0.76, 0.09 и 1.19 eV в случае адсорбции Na над атомом азота. Пик с энергией −0.81 (−0.76) eV сформирован в основном Ga 4*p* и N 2*p* электронами, вклад s-электронов заметно меньше. Пик с энергией 0.08 (0.09) eV сформирован в основном Ga 4*p*, Ga 4*s* и N 2*p* электронами. Ga 4*p* и N 2*p* состояния вносят основной вклад в пик с энергией 1.25 (1.19) eV. Все изменения электронной структуры зоны поверхностных состояний GaN связаны с взаимодействием валентных электронов поверхностного бислоя GaN с валентными электронами адсорбированных атомов Na, что совпадает с экспериментальными данными. Плотность поверхностных электронных состояний резко убывает с удалением от поверхности, так для S-1 бислоя (рис. 3, *e* и 4, *e*) она меньше почти в 10 раз, чем для поверхностного S бислоя.

## 5. Исследования ФЭС

На рис. 5 представлены спектры фотоэмиссии в области валентной зоны для образца GaN и для границы раздела Na/GaN при покрытии Na 0.05 и 0.10 ML при различных энергиях возбуждения. Спектр фотоэмиссии имеет ширину ∼ 10 eV. Пики при энергиях связи −5.2

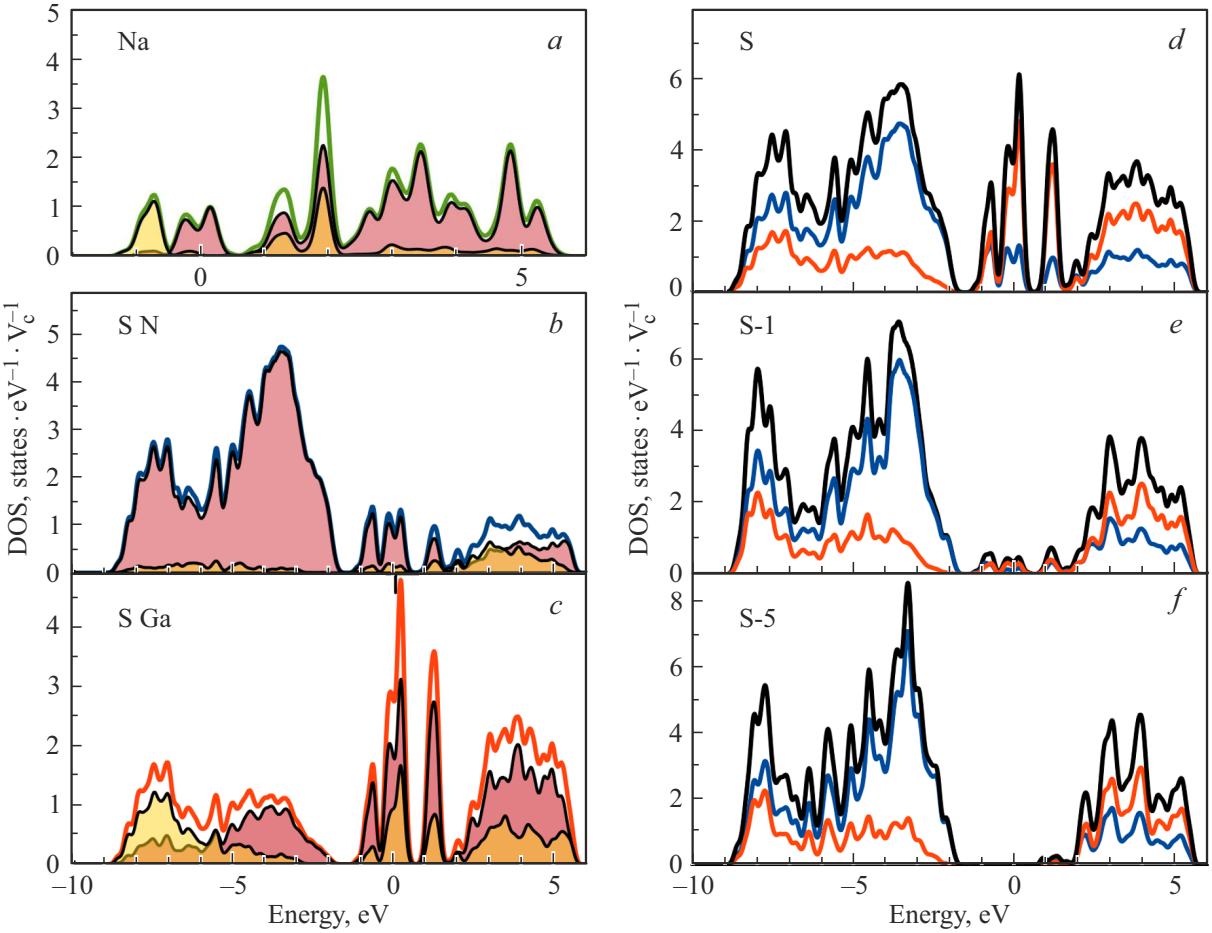


**Рис. 4.** Рассчитанные полная и парциальная плотности состояний 2D-слоя GaN(0001) в случае адсорбции Na на поверхностном атоме N. Полная и парциальная плотности состояний Na (*a*): полная плотность состояний — зеленый цвет, Na 3*s* — желтая заливка, Na 3*p* — коричневая заливка. Парциальные плотности состояний N (*b*) и Ga (*c*) для поверхностного S бислоя GaN. Полная и парциальная плотности состояний для S (*d*), S-1 (*e*) и S-5 (*f*) бислоев GaN. $V_c$ — объем элементарной ячейки. Полная плотность состояний — черный цвет, N — синий цвет, N 2*s* — желтый цвет с заливкой, N 2*p* — кирпичный цвет с заливкой, Ga — красный цвет, Ga 4*p* — коричневая заливка и Ga 4*s* — желтая заливка.

и −9.7 eV связаны с гибридизованными состояниями Ga 4*p* — N 2*p* и Ga 4*s* — N 2*p*. При энергии возбуждения 150 eV наблюдается увеличение интенсивности пиков при энергиях связи −5.2 и −9.7 eV, что объясняется возрастанием глубины зондирования образца с увеличением энергии возбуждения. Глубина выхода фотоэлектронов ($\lambda$), рассчитанная с помощью уравнения Танумы, Пауэлла и Пенна (TTP-2M), составляет 5.38 Å для электронов с кинетической энергией $E_{\text{kin}} = 100$ eV, и $\lambda = 5.95$ Å для электронов с $E_{\text{kin}} = 150$ eV [21]. Следует подчеркнуть, что для GaN величина $\lambda$, рассчитанная с помощью уравнения TTP-2M, на 30% больше определенной из экспериментальных данных [22]. Отметим, что расстояние между бислоями GaN равно 2.62 Å. Мы предполагаем, что происходит увеличение фотоэмиссии за счет еще одного слоя атомов галлия в глубине образца GaN. Также определено положение края валентной зоны на поверхности $E_{\text{VBM}}$ относительно уровня Ферми ($\sim 3.0$ eV). Образец GaN имеет *n*-тип проводимости, поэтому уровень Ферми располагается вблизи зоны проводимости в объеме. Таким образом, на поверхности образца происходит изгиб зон вверх, что согласуется с результатами [6,23]. При адсорбции Na на поверхность GaN интенсивность пиков гибридизованных состояний в области валентной зоны уменьшается. Для энергии возбуждения 150 eV при покрытии Na 0.05 ML интенсивность спектра фотоэмиссии уменьшается на 3%, при увеличении покрытия Na до 0.10 ML интенсивность уменьшается на 13%. Для энергии возбуждения 100 eV изменения более значительны из-за уменьшения глубины выхода фотоэлектронов, уменьшение интенсивности фотоэмиссионного спектра составляет 5 и 26% при покрытии Na 0.05 и 0.10 ML, соответственно.

Отличие вида фотоэмиссионного спектра в области между максимумом валентной зоны и уровнем Ферми от расчетного может быть связано с тем, что экспериментально исследуется, по-видимому, неидеальная поверхность GaN, и на поверхности имеются адсорбционные

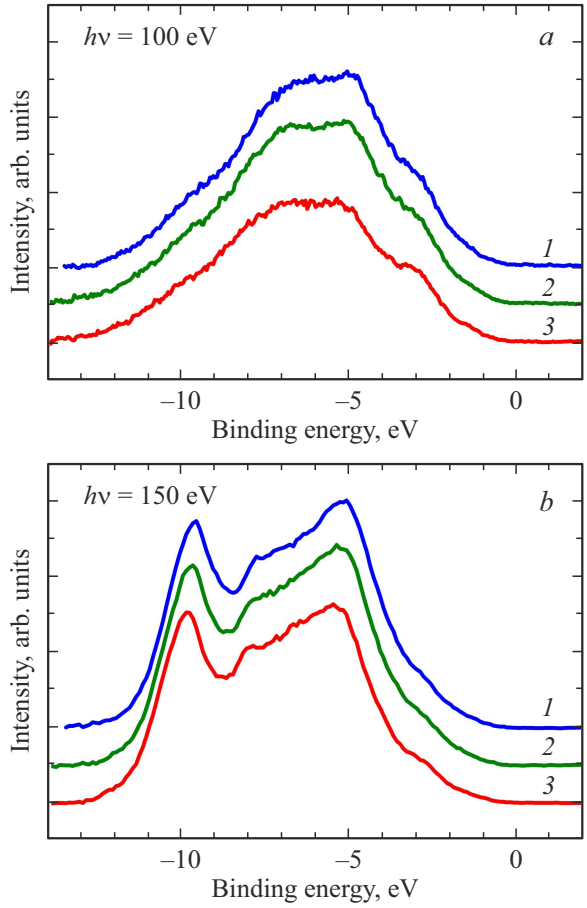


**Рис. 5.** Фотоэмиссионные спектры в области валентной зоны для чистой поверхности GaN (*1*) и для границы раздела Na/GaN при покрытии Na 0.05 ML (*2*) и 0.10 ML (*3*) при энергиях возбуждения 100 eV (*a*) и 150 eV (*b*).

места, связанные с дефектами на поверхности, которые могут приводить к более широкой зоне поверхностных состояний.

## 6. Заключение

Эпитаксиальные слои GaN были выращены методом молекулярно-пучковой эпитаксии с плазменной активацией азота на темплейте GaN/c-$Al_2O_3$. Впервые проведены исследования электронной структуры поверхности GaN и границы раздела Na/GaN с помощью метода фотоэлектронной спектроскопии с использованием синхротронного излучения. Для чистого образца GaN наблюдается изгиб зон вверх на поверхности. На основе теоретических расчетов в рамках теории функционала плотности мы изучили структуру и электрические свойства поверхности GaN, адсорбированного Na и бислоя GaN. Установлено, что при адсорбции Na на поверхность GaN ямочная позиция и позиция над атомом N являются наиболее стабильными с энергиями адсорбции атомов натрия $E_{ads}$ равными $-1.96$ и $-1.93$ eV, соответственно. Результаты расчета показали, что при адсорбции натрия формируется зона поверхностных состояний натрия, а также происходит модификация зоны поверхностных состояний GaN около уровня Ферми из широкой зоны в зону с тремя пиками, что связано с взаимодействием валентных электронов поверхностного бислоя GaN с валентными электронами адсорбированных атомов Na.

### Благодарности

Авторы благодарят Российско-Германскую лабораторию BESSY II и Helmholtz-Zentrum Berlin за возможность использования синхротронного излучения.

### Финансирование работы

Эксперименты по эпитаксиальному росту проводились в Алферовском университете при поддержке гранта № FSRM-2023-0006 Министерства науки и высшего образования Российской Федерации. Расчеты были выполнены в рамках госзадания ФТИ им. А.Ф. Иоффе FFUG-2024-0030.

### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## Список литературы

[1] M. Haziq, S. Falina, A. Abd Manaf, H. Kawarada, M. Syamsul. Micromachines **13**, *12*, 2133 (2022). DOI: 10.3390/mi13122133

[2] C.-C. Lin, Y.-R. Wu, H.-C. Kuo, M.S. Wong, S.P. DenBaars, S. Nakamura, A. Pandey, Z. Mi, P. Tian, K. Ohkawa, D. Iida, T. Wang, Y. Cai, J. Bai, Z. Yang, Y. Qian, S.-T. Wu, J. Han, C. Chen, Z. Liu, B.-R. Hyun, J.-H. Kim, B. Jang, H.-D. Kim, H.-J. Lee, Y.-T. Liu, Y.-H. Lai, Y.-L. Li, W. Meng, H. Shen, B. Liu, X. Wang, K.-l. Liang, C.-J. Luo, Y.-H. Fang. J. Phys. Photonics **5**, *4*, 042502 (2023). DOI: 10.1088/2515-7647/acf972

[3] G.V. Benemanskaya, S.A. Kukushkin, P.A. Dementev, M.N. Lapushkin, S.N. Timoshnev, D.V. Smirnov. Solid State Commun. **271**, 6 (2018). DOI: 10.1016/j.ssc.2017.12.004

[4] Г.В. Бенеманская, М.Н. Лапушкин, Д.Е. Марченко, С.Н. Тимошнев. Письма в ЖТФ, **44**, *6*, 50 (2018). DOI: 10.21883/PJTF.2018.06.45767.16885 [G.V. Benemanskaya, M.N. Lapushkin, D.E. Marchenko, S.N. Timoshnev, Tech. Phys. Lett. **44**, *3*, 247 (2018). DOI: 10.1134/S106378501803015X]

[5] S. Timoshnev, G. Benemanskaya, G. Iluridze, T. Minashvili. Surf. Interface Anal. **52**, *10*, 620 (2020). DOI: 10.1002/sia.6801

[6] С.Н. Тимошнев, Г.В. Бенеманская, А.М. Мизеров, М.С. Соболев, Я.Б. Эннс. ФТП **56**, *10*, 961 (2022). DOI: 10.21883/FTP.2022.10.53956.9904 [S.N. Timoshnev, G.V. Benemanskaya, A.M. Mizerov, M.S. Sobolev, Y.B. Enns. Semiconductors, **57**, *11*, 508 (2023). DOI: 10.1134/S106378262308016X]

[7] V.M. Bermudez. Surf. Sci. Rep. **72**, *4*, 147 (2017). DOI: 10.1016/j.surfrep.2017.05.001.

[8] T.K. Zywietz, J. Neugebauer, M. Scheffler. Appl. Phys. Lett. **74**, *12*, 1695 (1999). DOI: 10.1063/1.123658
[9] M. Himmerlich, L. Lymperakis, R. Gutt, P. Lorenz, J. Neugebauer, S. Krischok. Phys. Rev. B **88**, *12*, 125304 (2013). DOI: 10.1103/PhysRevB.88.125304
[10] P. Kempisty, P. Strąk, S. Krukowski. Surf. Sci. **605**, *7–8*, 695 (2011). DOI: 10.1016/j.susc.2011.01.005
[11] L. Liu, J. Tian, F. Lu. J. Energy Res. **45**, 9340 (2021). DOI: 10.1002/er.6464
[12] K.H. Yeoh, T.L. Yoon, T.L. Lim, Rusi, D.S. Ong. Superlattices Microstruct. **130**, *428* (2019). DOI: 10.1016/j.spmi.2019.05.011
[13] Z. Cui, E. Li, X. Ke, T. Zhao, Y. Yang, Y. Ding, T. Liu, Y. Qu, S. Xu. Appl. Surf. Sci. **423**, 829 (2017). DOI: 10.1016/j.apsusc.2017.06.233
[14] Y. Zheng, E. Li, C. Liu, K. Bai, Z. Cui, D. Ma. J. Phys. Chem. Solids **152** 109857 (2021). DOI: 10.1016/j.jpcs.2020.109857
[15] P.V. Seredin, D.L. Goloshchapov, D.E. Kostomakha, Y.A. Peshkov, N.S. Buylov, S.A. Ivkov, A.M. Mizerov, S.N. Timoshnev, M.S. Sobolev, E.V. Ubyivovk, V.I. Zemlyakov. Opt. Mater. **152**, 115471 (2024). DOI: 10.1016/j.optmat.2024.115471
[16] D.A. Shirley. Phys. Rev. B **5**, 12, 4709 (1972). DOI: 10.1103/PhysRevB.5.4709
[17] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, G.L. Chiarotti, M. Cococcioni, I. Dabo, A.D. Corso, S. de Gironcoli, S. Fabris, G. Fratesi, R. Gebauer, U. Gerstmann, C. Gougoussis, A. Kokalj, M. Lazzeri, L. Martin-Samos, N. Marzari, F. Mauri, R. Mazzarello, S. Paolini, A. Pasquarello, L. Paulatto, C. Sbraccia, S. Scandolo, G. Sclauzero, A.P. Seitsonen, A. Smogunov, P. Umari, R.M. Wentzcovitch. J. Phys.: Condens. Matter **21**, *39*, 395502 (2009). DOI: 10.1088/0953-8984/21/39/395502
[18] J.P. Perdew, A. Zunger. Phys. Rev. B **23**, *10*, 5048 (1981). DOI: 10.1103/PhysRevB.23.5048.
[19] L. Liu, F. Lu, J. Tian. Appl. Phys. A **125**, 840 (2019). DOI: 10.1007/s00339-019-3142-3
[20] F. Lu, L. Liu, S. Xia, Y. Diao, S. Feng. Superlattices Microstruct. **118**, 160 (2018). DOI: 10.1016/j.spmi.2018.04.021
[21] H. Shinotsuka, S. Tanuma, C.J. Powell, D.R. Penn. Surf. Interface Anal. **51**, *4*, 427 (2019). DOI: 10.1002/sia.6598
[22] M. Krawczyk, L. Zommer, A. Jablonski, I. Grzegory, M. Bockowski. Surf. Sci. **566-568**, Part 2, 1234 (2004). DOI: 10.1016/j.susc.2004.06.098
[23] L.L. Lev, I.O. Maiboroda, E.S. Grichuk, N.K. Chumakov, N.B.M. Schröter, M.-A. Husanu, T. Schmitt, G. Aeppli, M.L. Zanaveskin, V.G. Valeyev, V.N. Strocov. Phys. Rev. Research **4**, *1*, 013183 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevResearch.4.013183

*Редактор А.Н. Смирнов*