

11,13

Новая тригональная (ромбоэдрическая) фаза SiC: *ab initio* расчеты, симметричный анализ и рамановские спектры

© Ю.Э. Китаев¹, С.А. Кукушкин^{2–4,¶}, А.В. Осипов^{2,3}, А.В. Редьков²

¹ Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Россия

² Институт проблем машиноведения РАН,
Санкт-Петербург, Россия

³ Университет ИТМО,
Санкт-Петербург, Россия

⁴ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Россия

¶ E-mail: sergey.a.kukushkin@gmail.com

(Поступила в Редакцию 16 апреля 2018 г.)

Исследована новая тригональная (ромбоэдрическая) фаза SiC, существование которой было ранее теоретически предсказано путем симметричного анализа. Показано, что фаза может образовываться в процессе роста пленок SiC методом замещения атомов на поверхности подложки Si. Проведены *ab initio* расчеты кристаллической структуры новой фазы и ее рамановских спектров методом квантовой химии. Установлено отличие правил отбора раман-активных колебаний для этой ромбоэдрической фазы от правил отбора кубической фазы в системе координат, совмещенной с векторами трансляций ромбоэдрической фазы. Синтезированы серии по времени отжига тонких пленок SiC/Si методом топохимического замещения атомов, и проанализированы их рамановские спектры. В рамановских спектрах образцов на начальном этапе роста пленки SiC обнаружено присутствие спектральной линии (258 cm^{-1}), которая близка к рассчитанной *ab initio* методом линии новой тригональной (ромбоэдрической) фазы, что косвенно подтверждает ее наличие.

С.А. Кукушкин, А.В. Осипов и А.В. Редьков благодарят за финансовую поддержку (Ю.Э. Китаев — за частичную финансовую поддержку) РФФИ (грант № 16-29-03149-офи-м).

DOI: 10.21883/FTT.2018.10.46534.107

1. Введение

В последние годы происходит постепенный переход современной электроники на новые материалы, среди которых выделяются широкозонные полупроводники, такие как нитрид галлия (GaN), нитрид алюминия (AlN), карбид кремния (SiC). Эти материалы обладают уникальными свойствами — высокой теплопроводностью, подвижностью носителей заряда, большим напряжением пробоя и позволяют создавать приборы, значительно превосходящие по своей эффективности кремниевые элементы [1]. В связи с этим продолжают поиски методов формирования качественных кристаллов и тонких пленок подобных материалов. Основной сложностью в настоящее время является отсутствие или дороговизна собственных подложек для роста, в результате чего при формировании тонких пленок образуется большое количество дефектов и дислокаций (плотностью более 10^7 cm^{-2}), которые пагубно сказываются на свойствах получаемых полупроводниковых приборов. Для роста GaN, в основном, используются сапфир, кремний и карбид кремния, причем SiC и Si постепенно вытесняют сапфир, ввиду его недостатков [2]. Перспективной подложкой, на наш взгляд, представляется структура SiC/Si, сформированная методом топохимического замещения атомов [3–5], объединяющая как доступность

и дешевизну кремниевых подложек, так и достоинства карбида кремния, на котором в настоящий момент растут наиболее качественные пленки III-нитридов. Данный метод принципиально отличается от традиционных методов роста SiC, поскольку рост происходит посредством химической реакции поверхности кремния и газа CO, в результате которой часть атомов кремния непосредственно в подложке замещается на углерод, формируя карбид кремния. Подробное описание технологических процессов, в результате которых формируется карбид кремния, а также схема экспериментального реактора представлены в обзорах [3–5]. В них же читатель может найти детальное исследование свойств получаемых образцов на разных этапах обработки и теоретическое обоснование метода. Согласно основным теоретическим положениям метода замещения [5], процесс превращения Si в SiC происходит в несколько стадий. Вначале формируется переходная метастабильная фаза кремния, насыщенного механически и упруго взаимодействующими точечными дефектами „кремниевая вакансия–атом углерода в межузельной позиции“. Ансамбль таких дефектов назван в [3–5] дилатационными диполями. Карбид кремния, образующийся на первой стадии синтеза, сильно растянут, так как кубическая ячейка SiC размером 4.36 \AA образуется из кубической ячейки Si размером 5.43 \AA . Затем происходит усадка и

отрыв SiC от подложки кремния [3–5]. Согласно [3–5], когерентное сопряжение между решетками Si и SiC в этот момент нарушается и осуществляется только там, где каждая пятая ячейка SiC совпадает с четвертой ячейкой Si. При этом происходит одноосное сжатие слоя SiC вдоль направления [111]. В [3] экспериментально было показано, что момент усадки и отрыв SiC от подложки Si, в зависимости от температуры синтеза, происходит между 1-й–10-й минутами роста SiC. И именно в этот момент времени происходит перестройка всей структуры промежуточного, насыщенного упругими диполями кремния в карбид кремния. На этом этапе возможны различные пути релаксации упругой энергии и, в частности, релаксация упругой энергии может происходить путем формирования нескольких тонких слоев различных политипов SiC [5]. Поскольку карбид кремния SiC обладает большим числом политипных модификаций [5], из которых наиболее распространенными являются кубическая (3C-SiC), гексагональная (4H-SiC, 6H-SiC) и тригональная (ромбоэдрическая) (15R-SiC), и каждый политип характеризуется своим набором свойств (параметры решетки, ширина запрещенной зоны и т.д.), представляется важным детальным анализ возможных путей трансформации кристаллической решетки кремния в решетку SiC различных политипов при замещении атомов кремния углеродом.

Эксперимент показывает, что, как правило, с увеличением длительности синтеза (от 15 min и более) формируются слои карбида кремния преимущественно кубической (3C-SiC) фазы высокого качества [5], пригодные для последующего роста низкодефектных пленок нитрида галлия [2]. Однако в работе [6] в результате симметричного анализа было теоретически предсказано, что перед формированием 3C-SiC одним из промежуточных метастабильных состояний может быть новая, ранее не известная тригональная фаза SiC. В [6] было показано, что эта фаза может быть образована из кубической фазы 3C-SiC со структурой цинковой обманки (пространственная группа $F43m$, № 216) путем смещения атома углерода вдоль пространственной диагонали куба, т.е. вдоль характерного направления [111] ориентации дилатационных диполей на начальных этапах роста SiC [5]. Эта промежуточная фаза (пространственная группа $R3m$, № 160), отличается от хорошо известной ранее фазы 15R-SiC тем, что в ее элементарной ячейке содержится два атома. Отметим, что вследствие отличий в группах симметрии при переходе из одной фазы в другую должны происходить трансформация фононного спектра, проявляющаяся в расщеплении линий кубической фазы $T_2 \rightarrow A_1 + E$, и изменение правил отбора в спектрах рамановского рассеяния и инфракрасного поглощения [6]. Следовательно, обнаружение подобных трансформаций в рамановских спектрах образцов на том или ином этапе формирования пленки SiC могло бы косвенно подтвердить наличие предсказанной из симметричного анализа промежуточной тригональной фазы.

Таким образом, основной целью работы является ответ на вопрос, формируется ли эта промежуточная фаза в процессе образования пленки 3C-SiC/Si или нет. Для ответа на этот вопрос необходимо, во-первых, провести *ab initio* расчеты структуры и рамановских спектров новой предполагаемой тригональной фазы методом квантовой химии, во-вторых, изготовить серию образцов SiC/Si при различных временах синтеза, и в третьих — сопоставить экспериментально полученные рамановские спектры с результатами моделирования с учетом правил отбора для используемой в эксперименте геометрии рассеяния. Эти задачи последовательно решены в следующих разделах работы.

2. *Ab initio* расчеты структуры тригональной (ромбоэдрической) фазы и частот раман-активных колебаний

Первым этапом было определение структуры тригональной (ромбоэдрической) фазы карбида кремния, существование которой было предположено на основании симметричного анализа в работе [6], и расчет ее рамановских спектров. Для этого было проведено моделирование методами квантовой химии. В качестве исходной системы была выбрана кубическая решетка Si. Каждый второй атом Si, согласно механизму метода замещения атомов [5], заменялся на атом углерода C (что соответствует плотности материала 1.7 g/cm^3), после чего все атомы C сместились в направлении $\langle 111 \rangle$ и искался локальный минимум энергии при сохранении симметрии $R3m$. Все вычисления проводились методом функционала плотности в базисе плоских волн с использованием приближения псевдопотенциалов. Для этого использовался код Quantum Espresso [7]. Обменно-корреляционные эффекты вычислялись в рамках градиентного функционала PBESOL [8]. Для расчетов использовались наиболее точные нормосохраняющие псевдопотенциалы, приводящие к погрешности порядка 0.5 meV/atom . Энергия обрезания плоских волн составляла 30 Ha . В обратном пространстве использовалась сетка по схеме Монхорста–Пака из $5 \times 5 \times 5$ точек, отвечающая расстоянию между точками 0.064 \AA^{-1} . Если сдвинуть атомы C достаточно сильно, примерно на 0.5 \AA по каждой координате, то при определенных условиях появляется новый локальный минимум. Этот минимум в ромбоэдрическом представлении соответствует решетке с симметрией $R3m$, параметром решетки $a = 3.75 \text{ \AA}$ и углом $\alpha = 49^\circ$. В гексагональном представлении параметры этой решетки равны 3.1 и 9.9 \AA . При этом атом Si находится в узле с координатами $(0, 0, 0)$, а атом C — в узле с координатами $(1/3, 1/3, 1/3)$. Данная фаза находится под действием сильного растягивающего напряжения 2.5 GPa в направлении оси z и имеет плотность 2.4 g/cm^3 . Эта плотность является промежуточной

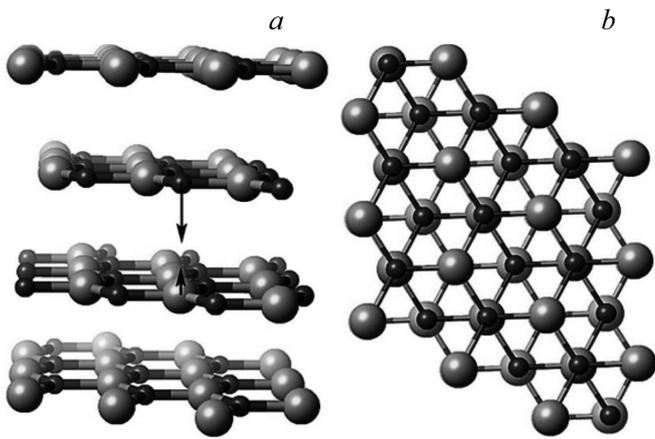


Рис. 1. Промежуточная ромбоэдрическая фаза карбида кремния. Большие светлые шарики соответствуют атомам Si, маленькие темные — атомам C. *a* — ось *z* направлена вверх, *b* — ось *z* направлена вглубь рисунка. Стрелками показаны колебания атомов, соответствующие частоте 266 cm^{-1} .

по отношению к исходной 1.7 g/cm^3 и конечной плотности SiC 3.2 g/cm^3 . Найденная фаза изображена на рис. 1. Длина связи SiC в этой фазе равна 1.8 \AA , а расстояние между слоями равно 3.2 \AA .

Расчет рамановского рассеяния для данной фазы SiC показал, что спектр состоит из двух линий, а именно, более интенсивной линии 266 cm^{-1} и менее интенсивной линии 980 cm^{-1} . Менее интенсивная линия сливается со спектром основной фазы SiC и вряд ли может быть обнаружена экспериментально. Первая линия 266 cm^{-1} расположена отдельно от линий спектра как SiC иных политипов, так и Si, поэтому обнаружить ее значительно легче, вследствие чего именно эта линия была выбрана в качестве маркера искомой тригональной (ромбоэдрической) фазы при дальнейшем анализе рамановских спектров.

3. Симметричный анализ и определение правил отбора

Для выявления наличия тригональной (ромбоэдрической) фазы в спектрах рамановского рассеяния необходимо исключить вклад обычной кубической фазы 3C-SiC, используя как результаты других работ [9,10] по динамике решетки кубической фазы, так и различия в правилах отбора этих фаз для спектров, полученных в одинаковой геометрии рассеяния. При этом нужно иметь в виду, что в работе [6] правила отбора для рамановских и ИК спектров для кубической и тригональной фаз были получены в стандартной для этих фаз установке. Для тригональной фазы эта установка совпадает с используемой в наших экспериментах. Однако для кубической фазы необходимо получить правила отбора в новой декартовой системе координат (x', y', z') . Для этого следует преобразовать декартову систему координат куби-

ческой фазы $(x, y, z) \rightarrow (x', y', z')$ таким образом, чтобы новая ось z' кубической фазы была параллельна вектору трансляции c_h тригональной фазы (с векторами трансляций a_h, b_h, c_h , заданными в гексагональной установке), ось y' — параллельна вектору b_h , а ось x' — перпендикулярна b_h . Связь векторов трансляции тригональной фазы в гексагональной установке (a_h, b_h, c_h) с исходными векторами трансляции кубической фазы (a_c, b_c, c_c) задается трансформационной матрицей, которая определяется с помощью программы MAXSUB на Кристаллографическом сервере Бильбао [11–13]. Программа MAXSUB для группы $F\bar{4}3m$, № 216 дает четыре возможных матрицы перехода в ее максимальную подгруппу $R3m$, № 160. Скриншот приведен на рис. 2.

Все четыре варианта матриц эквивалентны, поэтому можно выбрать любую из них, например, матрицу № 1. Эта матрица определяет следующие соотношения между векторами трансляции тригональной фазы в гексагональной установке (a_h, b_h, c_h) и исходными векторами трансляции кубической фазы (a_c, b_c, c_c)

$$\begin{aligned} a_h &= -1/2a_c + 1/2b_c, \\ b_h &= -1/2b_c + 1/2c_c, \\ c_h &= a_c + b_c + c_c. \end{aligned} \tag{1}$$

Исходя из векторов (1) можно определить компоненты единичных векторов A_c, B_c, C_c новой декартовой системы координат в старой системе. Вектор C_c , направленный вдоль c_h , будет иметь вид $1/\sqrt{3}i + 1/\sqrt{3}j + 1/\sqrt{3}k$;

Maximal subgroup(s) of type 160 ($R3m$) [hexagonal axes] of index 4 for Space Group 216 ($F\bar{4}3m$)

Click over [WP splitting] to go to the WYCKSPLIT.

Conjugacy class *a*

Subgroup(s)	Transformation Matrix	More...
group No 1	$\begin{pmatrix} -1/2 & 0 & 1 & 0 \\ 1/2 & -1/2 & 1 & 0 \\ 0 & 1/2 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	WP splitting
group No 2	$\begin{pmatrix} 1/2 & 0 & -1 & 0 \\ 1/2 & -1/2 & 1 & 0 \\ 0 & -1/2 & -1 & 0 \end{pmatrix}$	WP splitting
group No 3	$\begin{pmatrix} -1/2 & 0 & 1 & 0 \\ -1/2 & 1/2 & -1 & 0 \\ 0 & -1/2 & -1 & 0 \end{pmatrix}$	WP splitting
group No 4	$\begin{pmatrix} 1/2 & 0 & -1 & 0 \\ -1/2 & 1/2 & -1 & 0 \\ 0 & 1/2 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	WP splitting

Рис. 2. Скриншот программы MAXSUB, показывающий матрицы перехода из кубической группы $F\bar{4}3m$, № 216 в ее максимальную подгруппу $R3m$, № 160.

Таблица 1. Правила отбора для рамановских спектров кубической фазы SiC в двух геометриях рассеяния: рассеянии назад и 90°-геометрии

Рассеяние назад		
Геометрия рассеяния	$T_2(\text{LO}+\text{TO})$	$T_2(\text{TO})$
$-X'(Y'Y')X'$	×	—
$-X'(Y'Z')X'$	×	—
$-X'(Z'Z')X'$	×	—
$-Y'(X'X')Y'$	×	×
$-Y'(X'Z')Y'$	×	×
$-Y'(Z'Z')Y'$	×	×
$-Z'(X'X')Z'$	×	—
$-Z'(X'Y')Z'$	×	—
$-Z'(Y'Y')Z'$	×	—
90°-геометрия рассеяния		
Геометрия рассеяния	$T_2(\text{LO}+\text{TO})$	
$X'(Y'Y')Z'$	×	
$X'(Y'Z')Y'$	×	
$X'(Z'Z')Y'$	×	
$Y'(X'X')Z'$	×	
$Y'(X'Y')X'$	×	
$Y'(X'Y')Z'$	×	
$Y'(X'Z')X'$	×	
$Y'(Z'Z')X'$	×	
$Z'(X'X')Y'$	×	
$Z'(X'Y')X'$	×	
$Z'(X'Z')X'$	×	
$Z'(X'Z')Y'$	×	
$Z'(Y'Y')X'$	×	
$Z'(Y'Z')X'$	×	
$Z'(Y'Z')Y'$	×	

вектор \mathbf{B}_c , направленный вдоль \mathbf{b}_h , будет равен $-1/\sqrt{2}\mathbf{j} + 1/\sqrt{2}\mathbf{k}$, а вектор \mathbf{A}_c , перпендикулярный векторам \mathbf{B}_c и \mathbf{C}_c , $\mathbf{A}_c = [\mathbf{B}_c \times \mathbf{C}_c]$, будет определяться выражением $-\sqrt{2/3}\mathbf{i} + 1/2(\sqrt{2/3}\mathbf{j} + \sqrt{2/3}\mathbf{k})$. Эти векторы определяют ориентацию осей новой декартовой системы координат. Они являются входными данными в программе POLARIZATION SELECTION RULES на сайте Кристаллографического сервера Бильбао, позволяющей получить правила отбора для рамановского рассеяния в новой системе координат [11–13].

В результате для кубической фазы в новой системе координат (x', y', z') получаем правила отбора, представленные в табл. 1. Как было показано в работе [4], колебательное представление в центре зоны Бриллюэна в кубической фазе определяется выражением

$$\Gamma = 2\Gamma_4 = 2T_2, \quad (2)$$

где $\Gamma_{ac} = \Gamma_4 = T_2$, $\Gamma_{opt} = \Gamma_4 = T_2$. Поэтому в табл. 1 представлены правила отбора только для оптической моды T_2 .

Из табл. 1 видно, что в геометрии рассеяния назад $-z'(x'x')z'$, $-z'(x'y')z'$, $-z'(y'y')z'$ в рамановских

спектрах кубической фазы 3C-SiC должна наблюдаться только одна линия $T_2(\text{LO} + \text{TO})$, частота которой лежит в диапазоне между частотами $T_2(\text{LO})$ и $T_2(\text{TO})$ фононов $972\text{--}793\text{ cm}^{-1}$. При переходе в тригональную (ромбоэдрическую) фазу эта линия расщепляется $T_2 \rightarrow A + E$ и величина этого расщепления пропорциональна величине смещения атома углерода из его равновесной позиции в кубической фазе. Поскольку для каждого из колебаний A и E , в свою очередь, имеется LO–TO расщепление, „ромбоэдрическое“ расщепление следует измерять отдельно для LO и TO компонент, т.е. $A(\text{LO}) - E(\text{LO})$ и $A(\text{TO}) - E(\text{TO})$. Однако в нашей геометрии, как следует из правил отбора для ромбоэдрической фазы [6], в геометриях рассеяния $-z'(x'x')z'$, $-z'(y'y')z'$ должны наблюдаться две линии $A_1(\text{LO})$ и $E(\text{TO})$, а в геометрии $-z'(x'y')z'$ одна $E(\text{TO})$, а указанных пар $A(\text{LO}) - E(\text{LO})$ и $A(\text{TO}) - E(\text{TO})$ не наблюдается. Для их наблюдения необходимо провести измерения в других геометриях рассеяния. Следует также отметить, что такое же расщепление происходит и в случае одноосного сжатия кубической фазы вдоль направления [111] [14,15], симметрия которой также понижается до ромбоэдрической. Величина этого расщепления при напряжении 1 GPa не превышает 0.5% (5 cm^{-1}).

4. Эксперимент и анализ рамановских спектров

В эксперименте в качестве подложек для роста образцов SiC/Si использовались пластины кремния Si(111) *r*-типа проводимости диаметром 40 mm. Перед процессом роста образцы были подвергнуты очистке методом, описанным в работе [16], и покрыты слоем водорода для предотвращения образования оксида кремния на поверхности. Затем были синтезированы две серии образцов SiC на Si методом замещения атомов [3,4]. Слои синтезировались в специальном реакторе [3] в атмосфере смеси газов CO и силана (SiH_4). Условия синтеза у всех образцов двух серий были одинаковы, за исключением времени синтеза. Так, в одной серии образцы выращивались в течение 5 min, а образцы второй серии были синтезированы в течение 20 min. Условия роста представлены в табл. 2. Следует отметить, что одной из особенностей роста пленок SiC на Si методом замещения является своеобразное поведение толщины слоя SiC в зависимости от времени роста. В начале синтеза толщина пленки растет, а затем немного уменьшается и в дальнейшем практически не меняется во времени [3,5]. Такая закономерность изменения толщины связана с тем, что на первых этапах процесса кремний насыщается упругими диполями и немного „распухает“. Затем, происходит уплотнение и усадка SiC. В течение времени в интервале 1–20 min, как можно видеть из графиков работы [3], толщина слоя остается практически неизменной. Именно поэтому мы выбрали для роста слоев SiC времена синтеза из данного интервала.

Таблица 2. Условия роста образцов SiC/Si

Параметры	Значения
Тип кремния	<i>p</i> -тип
Ориентация ростовой поверхности Si	(111)
Температура роста, °C	1270
Время роста образцов первого типа, min	5
Время роста образцов второго типа, min	20
Общее давление газовой смеси, Torr	2
Поток газовой смеси, ml/min	120
Доля силана (SiH ₄) в газовой смеси, %	25

После процесса роста образцы исследовались методами эллипсометрии на установке J.A. Woollam M2000-RCE в диапазоне 1.5–6 eV и рамановской спектроскопии на конфокальном рамановском микроскопе Witec Alpha 300R для изучения рамановских спектров. Согласно данным эллипсометрии, толщина пленки SiC на поверхности кремния составила порядка 85–95 nm. На рис. 3 и 4 представлены типичные рамановские спектры этих двух серий образцов.

Из спектра, приведенного на рис. 3, хорошо видно, что во всех образцах, время синтеза которых составляло 5 min, помимо линий 3C-SiC, присутствует линия 258 cm^{-1} , которая близка к теоретически рассчитанной нами линии 266 cm^{-1} и, по нашему мнению (в пределах погрешности ростового эксперимента), относится к новой промежуточной ромбоэдрической фазе SiC. В рамановских спектрах образцов, синтезированных в течение 20 min (рис. 4), подобная линия отсутствует, а их рамановский спектр полностью соответствует рамановскому спектру кубического политипа 3C-SiC. Наличие линии 258 cm^{-1} в образцах с малыми временами отжига косвенно подтверждает предположение,

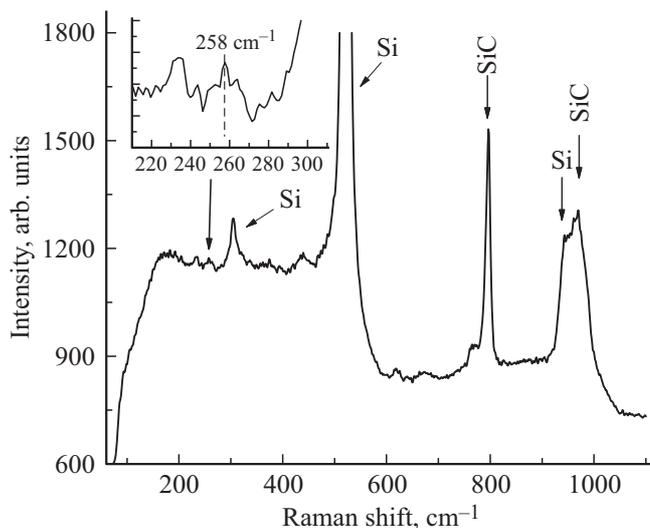


Рис. 3. Рамановский спектр SiC, выращенного методом химического замещения атомов на подложках Si. Время синтеза слоев SiC 5 min.

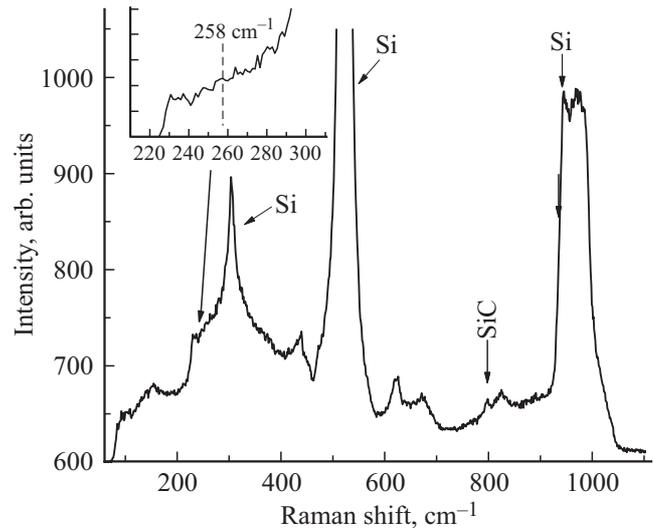


Рис. 4. Рамановский спектр SiC, выращенного методом химического замещения атомов на подложках Si. Время синтеза слоев SiC 20 min.

сделанное в работе [6], а именно то, что пленка 3C-SiC может формироваться из кремния через промежуточную тригональную (ромбоэдрическую) фазу SiC, параметры которой рассчитаны нами методом квантовой химии в разделе 2.

5. Заключение

В настоящей работе исследована промежуточная фаза нового тригонального (ромбоэдрического) карбида кремния, предсказанная ранее с помощью симметричного анализа. Фаза может проявляться в процессе формирования пленки SiC/Si методом замещения атомов. С помощью *ab initio* расчетов методом функционала плотности в базе плоских волн показана возможность ее существования и рассчитаны параметры кристаллической решетки этой фазы, которые соответствуют локальному минимуму полной энергии кристалла. Этот минимум в ромбоэдрическом представлении соответствует решетке с симметрией $R\bar{3}m$, параметром решетки $a = 3.75\text{ \AA}$ и углом $\alpha = 49^\circ$. В гексагональном представлении параметры решетки равны 3.1 \AA и 9.9 \AA . При этом атом Si находится в узле с координатами (0, 0, 0), а атом C — в узле с координатами (1/3, 1/3, 1/3). Расчетная плотность фазы равна 2.4 g/cm^3 , что меньше конечной плотности 3C-SiC 3.2 g/cm^3 . Вычислены характерные частоты линий рамановского спектра новой фазы: 266 cm^{-1} и 980 cm^{-1} . Проведена серия ростовых экспериментов SiC/Si методом замещения атомов при различных временах отжига (5 и 20 min) и проведено сравнение экспериментальных рамановских спектров с данными, полученными численно. Для этого были определены правила отбора для рамановских спектров кубической фазы SiC в системе координат, совмещенной

со стандартной установкой осей ромбоэдрической фазы, что позволило выделить возможные линии кубической фазы из суммарного спектра в геометрии рассеяния назад $-z'(x'x', x'y', y'y')z'$, где ось z' направлена вдоль оси [111], и установить наличие линий ромбоэдрической фазы. В образцах с малым временем отжига (5 min) в рамановских спектрах наблюдается характерная линия (258 cm^{-1}), которая близка к полученному путем *ab initio* расчетам значению для новой тригональной фазы, тогда как в образцах с большим временем отжига наблюдаются только линии, характерные для 3C-SiC. Полученные результаты косвенно подтверждают наличие промежуточной тригональной фазы в процессе превращения кремния в пленку 3C-SiC методом замещения атомов на определенном временном этапе ее роста.

Список литературы

- [1] S. Strite, H. Morko. *J. Vac. Sci. Technol. B* **10**, 1237 (1992).
- [2] S.A. Kukushkin, A.V. Osipov, V.N. Bessolov, B.K. Medvedev, V.K. Nevolin, K.A. Tcarik. *Rev. Adv. Mater. Sci.* **17**, 1 (2008).
- [3] С.А. Кукушкин, А.В. Осипов, Н.Ф. Феоктистов. *ФТТ* **56**, 1457 (2014).
- [4] S.A. Kukushkin, A.V. Osipov. *J. Appl. Phys.* **113**, 024909 (2013).
- [5] S.A. Kukushkin, A.V. Osipov. *J. Phys. D* **47**, 313001 (2014).
- [6] Ю.Э. Китаев, С.А. Кукушкин, А.В. Осипов. *ФТТ* **59**, 30 (2017).
- [7] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, G.L. Chiarotti, M. Cococcioni, I. Dabo, A. Dal 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. Sciauzero, A.P. Seitsonen, A. Smogunov, P. Umari, R.M. Wentzcovitch. *J. Phys.: Condtns. Matter.* **21**, 395502 (2009).
- [8] J.P. Perdew, G.I. Ruzsinszky, G.I. Csonka, O.A. Vydrov, G.E. Scuseria, L.A. Constantin, X. Zhou, K. Burke. *Phys. Rev. Lett.* **100**, 136406 (2008).
- [9] J.F. Vetelino, S.S. Mitra. *Phys. Rev.* **178**, 1349 (1969).
- [10] D.W. Feldman, J.H. Parker Jr., W.J. Choyke, L. Patrick. *Phys. Rev.* **173**, 787 (1968).
- [11] M.I. Aroyo, J.M. Perez-Mato, C. Capillas, E. Kroumova, S. Ivantchev, G. Madariaga, A. Kirov, H. Wondratschek. *Z. Krist.* **221**, 15 (2006).
- [12] M.I. Aroyo, A. Kirov, C. Capillas, J.M. Perez-Mato, H. Wondratschek. *Acta Crystallogr. A* **62**, 115 (2006).
- [13] M.I. Aroyo, J.M. Perez-Mato, D. Orobengoa, E. Tasci, G. de la Flor, A. Kirov. *Bulg. Chem. Commun.* **43**, 183 (2011).
- [14] J. Estel, J. Kalus, L. Pintschovius. *Phys. Status Solidi A* **126**, 121 (1984).
- [15] F. Cerdeira, C.J. Buchenauer, F.H. Pollak, M. Cardona. *Phys. Rev. B* **5**, 580 (1972).
- [16] И.П. Калинин, С.А. Кукушкин, А.В. Осипов. *ФТП* **52**, 656 (2018).

Редактор Е.Ю. Флегонтова