

АНОМАЛЬНІ ЕЛЕКТРОННІ ВЛАСТИВОСТІ ТОНКИХ МЕТАЛЕВИХ ПЛІВОК ОСТРІВЦЕВОЇ СТРУКТУРИ: РОЗРАХУНКИ З ПЕРШИХ ПРИНЦИПІВ

Р. М. Балабай, Д. Ю. Кравцова

*Кафедра фізики та методика її навчання, ДВНЗ “Криворізький державний педагогічний університет”,
просп. Гагаріна, 54, Кривий Ріг, 50086, Україна*

(Отримано 02 лютого 2017 р.; в остаточному вигляді — 28 квітня 2017 р.)

Методами теорії функціонала електронної густини та псевдопотенціалів із перших принципів, із використанням авторського програмного комплексу, розраховано просторові розподіли густини валентних електронів, розподіли густини електронних станів та ширини забороненої зони, кулонівські потенціали вздовж металевих ($\text{Ni}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}$, Ni, Cu, Pt) плівок острівцевої структури. Розрахунок показав наявність розмірних ефектів, що проявилися в осциляціях ширини забороненої зони в електронному спектрі зі зміною відстані між острівцями в плівках $\text{Ni}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}$, Ni, Cu, проти практично відсутньої забороненої зони в суцільних плівках неоднорідної товщини тих же металів. Прокоментовано особливості просторового розподілу валентних електронів острівцевих плівок, що виявили відхилення від характерних металом розподілів.

Ключові слова: тонкі острівцеві плівки перехідних металів, функціонал електронної густини, псевдопотенціал, розмірні ефекти, просторовий розподіл густини валентних електронів, ширина забороненої зони.

PACS number(s): 71.15.Mb, 73.61.At, 71.20.Be, 72.80.Ga, 73.50.Bk

I. ВСТУП

Із кожним роком зацікавлення тонкими металевими острівцевими плівками зростає внаслідок кількох причин. По-перше, відмінність їхніх властивостей від властивостей макроскопічних об'єктів того ж хімічного складу, по-друге, відносно прості й доступні технології створення, по-третє, безліч ефектів із досі не поясненими механізмами та, можливо, велика кількість не відкритих квантових явищ.

Так, у перших дослідженнях металевих плівок були виявлені аномальні ефекти: високий магнітоопір [1] та гігантський ефект Холла [2]. Експериментальні зразки з наведених робіт — це плівки діелектрика товщиною в межах 0.1–0.9 мкм (SiO_2 , Al_2O_3 , AlO), на які нанесено гранули металу розміром 1–10 нм (Ni, Pt, Au, Fe, Co, W, Ag, Bi або Pb). Такі плівки називають гранульованими. Сьогодні ж експериментальними зразками для вивчення фізичних властивостей стають полікристалічні плівки різних ефективних товщин та ступенів дисперсності зерен, монокристалічні плівки, моношари металів, острівцеві плівки.

Наприклад, у праці [3] досліджено чутливість локалізованого поверхневого плазмонного резонансу золотих острівцевих плівок. Автори доводять переваги плівок різних структур у спектрофотометричних та еліпсометричних вимірюваннях. Робота [4] присвячена спектрам пропускання тонких металевих плівок, щільно перфорованих невпорядкованими субхвильовими циліндричними отворами. Результати цього дослідження свідчать про те, що можливо створити перфоровану плівку, що має порівняно високе значення світлопропускання й малий електричний опір. Також досліджують спектри пропускання суцільних та острівцевих металевих плівок [5, 6]. У перерахованих

експериментах зазначено, що в тонких острівцевих зразках будь-якого металу спостерігається збільшений опір порівняно з товстими або суцільними плівками. Дослідники [3–7] коментують, що такий розмірний ефект притаманний острівцевим плівкам, але не пояснюють механізму підвищення опору у провіднику.

Недавно експериментально виявлено гігантську діелектричну проникність у тонких ($\sim 7\text{--}10 \text{ \AA}$) острівцевих металевих плівках, що нехарактерно для металів [8, 9]. Автори пояснюють цей факт тим, що між острівцями відбувається перерозподіл заряду й сусідні острівці виявлялися зарядженими різною мірою. Такий перерозподіл, вважають автори [10], можливий унаслідок тунельних переходів електронів через потенціальний бар'єр між острівцями. Також автори дослідження [10] зафіксували ємнісний характер провідності, що свідчить про наявність діелектричних властивостей цих металевих об'єктів.

Отже, отримані в працях [8–10] непритаманні металевим зразкам характеристики потребують підґрунтя теоретичними дослідженнями, які не використовують даних з експерименту, щоб прокоментувати причину незвичайної поведінки металу.

Застосовуючи методи функціонала електронної густини та псевдопотенціалу з перших принципів, ми виконали обчислювальний експеримент, користуючись авторським програмним засобом (ПЗ) [11], на атомних моделях, що адекватно відтворювали плівки дослідників [8–10], щоб пояснити ефекти, які вони спостерігали.

Розраховано просторові густини валентних електронів та їх перетини, розподіли станів валентних електронів, ширини заборонених зон, кулонівські потенціали вздовж заданих напрямків у плівках.

Використаний ПЗ є унікальним кодом авторів статті і чи не єдиним у своєму роді розробленим на теренах України. Він має ряд переваг порівняно з іншими існуючими програмними засобами. По-перше, працюючи з власним продуктом, автори цілком упевнені, що розрахункові алгоритми справді розроблені та працюють згідно з математичними теоріями та методами, на які посилаються, а також автори беруть на себе відповідальність за відсутність в алгоритмах будь-яких помилок математичного чи програмного характеру. По-друге, цей ПЗ пройшов успішну багатолітню апробацію в багатьох наукових працях авторів [12–16]. По-третє, маючи власний відкритий код процес наукового фізичного аналізу результату розрахунку виявляється гнучкішим, тому що так стає можливо аналізувати результати на будь-якому проміжному етапі й бачити будь-які дані, а не лише ті, що запрограмовані стороннім розробником, а також самостійно вдосконалювати ПЗ згідно з потребами конкретного дослідження. Це забезпечує незалежність від оновлень програми та широкий спектр розрахованих даних для наукового пошуку. У зв'язку з тим, що програмний засіб поки що не зареєстрований, за посиланням [11] можна знайти додаток для контрольного розрахунку

просторового розподілу густини й густини станів валентних електронів, повної енергії кристала кремнію.

II. МЕТОДИ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ОБЧИСЛЕНЬ

Розрахункові результати одержано за допомогою авторського програмного коду [11], що реалізує алгоритм самоузгодженого розв'язку рівнянь Кона–Шема в локальному наближенні, якщо визначаються тільки електронні змінні при фіксованих атомних остовах. Ідучи за Коном і Шемом [17, 18], електронну густину записували в термінах зайнятих ортонормованих одночастинкових хвильових функцій:

$$n(\mathbf{r}) = \sum_i |\psi_i(\mathbf{r})|^2. \quad (1)$$

Точку на поверхні потенціальної енергії в наближенні Борна–Оппенгайма визначали мінімумом енергетичного функціонала стосовно до хвильових функцій:

$$E[\{\psi_i\}, \{R_j\}, \{\alpha_v\}] = \sum_i \int_{\Omega} d^3r \psi_i^*(\mathbf{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right] \psi_i(\mathbf{r}) + U[\{n(\mathbf{r})\}, \{R_j\}, \{\alpha_v\}], \quad (2)$$

де $\{R_j\}$ — координати атомних остовів, $\{\alpha_v\}$ — усі можливі зовнішні впливи на систему.

У загальноприйнятому формулюванні мінімізація енергетичного функціонала (2) стосовно до одночастинкових орбіталей за накладених на них додаткових умов ортонормування приводить до одночастинкових рівнянь Кона–Шема [19]:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{\partial U}{\partial n(\mathbf{r})} \right\} \psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r}). \quad (3)$$

У розв'язку цих рівнянь можна використовувати формалізм псевдопотенціалу [20, 21], згідно з яким тверде тіло розглядається як набір валентних електронів та йонних остовів. У псевдопотенціальному наближенні оператор псевдопотенціалу V_{ps} , що описує взаємодію валентних електронів з остовом, є малим, а відповідна йому псевдохвильова функція гладкою. Псевдохвильові одноелектронні функції розклали-

ся в ряд за плоскими хвилями:

$$\Psi_j(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N_0} \sqrt{\Omega}} \sum_{\mathbf{G}} b_j(\mathbf{k} + \mathbf{G}) \exp(i(\mathbf{k} + \mathbf{G})\mathbf{r}), \quad (4)$$

де \mathbf{G} — вектори оберненої ґратки, \mathbf{k} — хвильовий вектор із зони Бріллюена кристала або штучної суперґратки, Ω — об'єм одиничних комірок, з яких складається періодичний кристал або штучна суперґратка при відтворенні неперіодичних об'єктів.

Повний кристалічний потенціал конструюється як сума йонних псевдопотенціалів, які не перекриваються та пов'язані з йонами (ядра + остовні електрони), розташовані в позиціях \mathbf{R}_S :

$$V_{\text{крисст}}(\mathbf{r}) \rightarrow V_{ps}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{p}} \sum_S V_S^{ps}(\mathbf{r} - \mathbf{p} - \mathbf{R}_S) \quad (5)$$

Рівняння (3) після Фур'є-перетворення в обернений простір має вигляд:

$$\sum_{\mathbf{G}} \left[\left\{ \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} + \mathbf{G})^2 - \varepsilon_j \right\} \delta_{\mathbf{G}, \mathbf{G}'} + V_{KS}(\mathbf{k} + \mathbf{G}, \mathbf{k} + \mathbf{G}') \right] b_j(\mathbf{k} + \mathbf{G}) = 0, \quad (6)$$

де V_{KS} — потенціал Кона–Шема, що визначається як

$$V_{KS}(\mathbf{k} + \mathbf{G}, \mathbf{k} + \mathbf{G}') = V_{ps}(\mathbf{k} + \mathbf{G}, \mathbf{k} + \mathbf{G}') + V_h(\mathbf{G}' - \mathbf{G}) + V_{xc}(\mathbf{G}' - \mathbf{G}). \quad (7)$$

У загальному випадку вирази, що описують потенціали взаємодій, є комплексними. Використання атомних базисів, що містять у точковій групі симетрії операцію інверсії, приводить до того, що Фур'є-компоненти в розкладі всіх виразів є дійсними [22].

Основною величиною у формалізмі функціонала електронної густини є густина заряду. Її оцінюють із самоузгодженого розв'язку рівнянь (6), який має бути проведений у всіх точках неприведеної частини зони Бріллюена:

$$\rho(\mathbf{G}) = \frac{2}{N_T} \sum_{\mathbf{k}} \sum_j \sum_{\alpha \in T} \sum_{\mathbf{G}'} b_j^*(\mathbf{k} + \mathbf{G}' + \alpha \mathbf{G}) b_j(\mathbf{k} + \mathbf{G}'), \quad (8)$$

де j означає додавання за всіма зайнятими станами, N_T — число операторів α в точковій групі T і множник 2 враховує виродження по спіну.

Розрахункові зусилля можна скоротити, якщо використовувати метод спеціальних точок. Є різні підходи щодо вибору цих точок. Так, можна використовувати рівномірні або нерівномірні сітки Γ -точок, можна з прийнятною точністю замінити сумування за кінцевим числом спеціальних точок до однієї точки в зоні Бріллюена. Можна обмежитися лише Γ -точкою в зоні Бріллюена, особливо це стосується штучних періодичних систем [23].

Розподіл електронів за енергіями отримували числовим обчисленням похідної

$$\lim_{\Delta E \rightarrow 0} \Delta N / \Delta E,$$

де ΔN — кількість дозволених станів, що припадають на проміжок енергії ΔE , із отриманого під час діагоналізації матриці Кона–Шема одночастинкового енергетичного спектра, кількість значень у якому

контролюється розміром розкладу хвильової функції. Відповідно до ідеології функціонала електронної густини кількість зайнятих станів при $T = 0$ визначали половиною кількістю електронів в атомному базисі (у зв'язку з неврахуванням спіну електрона).

Кулонівський потенціал уздовж заданої прямої в комірці розраховували за формулою, що в оберненому просторі має вигляд:

$$V_h(\mathbf{G}) = \frac{4\pi e^2 \rho(\mathbf{G})}{G^2}, \quad (9)$$

де \mathbf{G} — вектор оберненої ґратки, $\rho(\mathbf{G})$ — Фур'є-компоненти електронної густини (8).

У зв'язку з тим, що алгоритм обчислень передбачає наявність трансляційної симетрії в досліджуваній атомній системі, ми моделювали суперкомірку тетрагонального типу $a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, параметри та атомний базис якої визначав об'єкт дослідження.

Під час моделювання штучних неперіодичних систем, таких, як тонка плівка чи кластер, ізоляція транслятованих об'єктів один від одного забезпечується вакуумним проміжком між ними [24]. Нехай потрібно змоделювати тонку плівку в декілька атомних шарів. Тоді під час трансляції комірки з 8-атомним базисом (рис. 1,а) у площині XY отримаємо нескінченну тонку плівку в 4 атомні шари (рис. 1,б). При трансляції по Z плівки також будуть повторюватися, але при достатньо великому проміжку між ними, що регулюється довжиною вектора трансляції по Z , хвильові функції електронів ефективно спадають і їх перекриття можна знехтувати. Так, фактично, кожному плівку можна вважати окремим об'єктом (рис. 1,в).

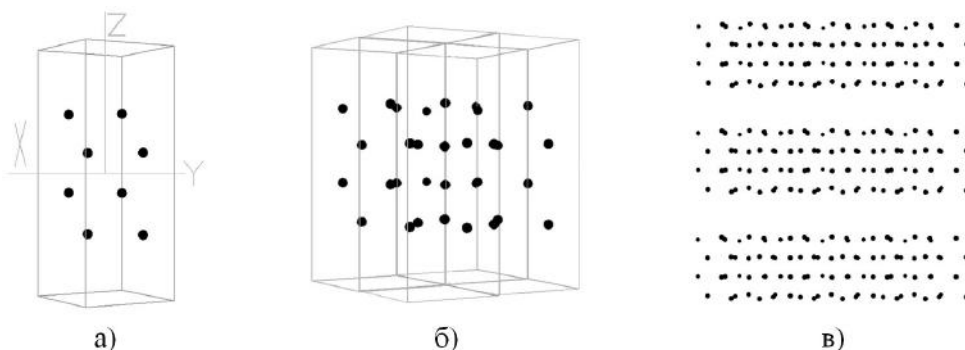


Рис. 1. Моделі тонкої плівки: а — 8-атомний базис штучної суперкомірки, б — транслявана суперкомірка у площині XY , в — тонкі модельні плівки, розділені вакуумним проміжком.

Такий же прийом ефективний для створення моделі кластера. Наприклад, розгляньмо суперкомірку алмазу, що складається із 28 атомів вуглецю, зображену на рис. 2,а. Збільшивши параметри комірки, можна

отримати ізольований нанокристалік алмазу. Впевнитися у відсутності взаємодії між трансляваними атомними базисами можна, отримавши в розрахунку та проаналізувавши просторовий розподіл електрон-

ної густини малих ізозначень. На рис. 2,б та 2,в зображені просторові розподіли густини валентних електронів у нанокристаліка алмазу за ізозначень 0.4–0.3 та 0.2–0.1 від максимального відповідно. Легко бачи-

ти, що електронна хмара кластера зосереджена всередині елементарної комірки та не має зв'язку зі своїм транслятованим сусідом у будь-якому напрямку.

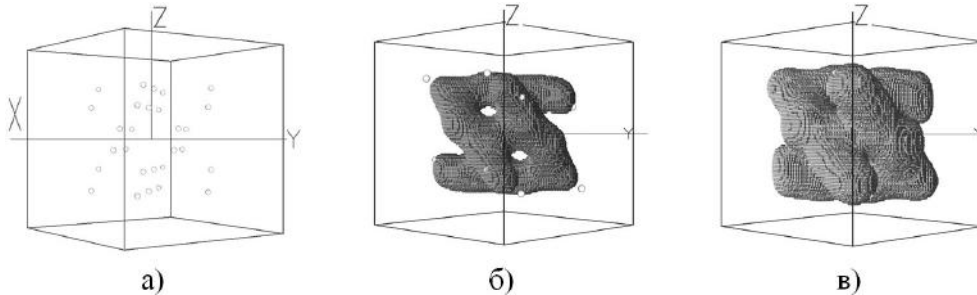


Рис. 2. Модель кластера алмазу: а — атомний базис суперкомірки, б, в — просторовий розподіл електронної густини модельного кластера за ізозначень 0.4–0.3 та 0.2–0.1 від максимального відповідно.

III. ОБ'ЄКТИ ТА МОДЕЛІ ОБЧИСЛЕНЬ

Одна група атомних моделей для чисельних оцінок їх електронних характеристик становила собою суцільні плівки металів із поверхнею типу [100] в площині XY, що неоднорідні за товщиною в напрямку Z, з найбільшим значенням товщини в 4 атомні шари, яке для Ni становило 5.29 Å, для FeNi-сплаву — 5.08 Å, для Cu — 5.41 Å. Інша група модельних об'єктів імітувала острівцеві плівки — кластери металу, розділені вакуумними проміжками, що змінювалися.

Для відтворення нескінченної суцільної або острівцевої плівки у площині XY були розроблені атомні базиси примітивної тетрагональної комірки суперґратки, що виділені квадратами (рис. 3,а,в). Розмір примітивної комірки добирали таким, щоб уникнути взаємодії плівок, що транслюються в напрямку Z. Обчислення проводилося тільки для Г-точки зони Брілюєна суперрешітки.

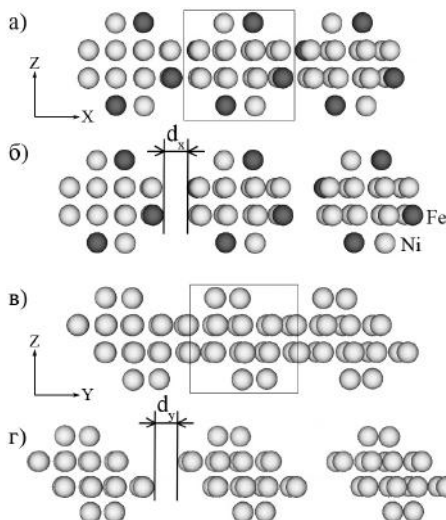


Рис. 3. Модельні суцільні неоднорідні за товщиною плівки неоднорідного (а, б) та однорідного (в, г) хімічного складу (а, в) та острівцеві плівки (б, г), утворені розривом суцільної плівки за рахунок збільшення параметрів трансляції A і B.

На рис. 3 зображено фрагменти нескінченних суцільної та острівцевої плівок, що формуються трансляцією атомного базису, виділеного в чотирикутнику, сторони якого дорівнюють параметрам примітивної трансляції A, B, C (а, б — вид на площину ZX, в, г — ZY). Для моделювання острівцевої плівки параметри трансляції A і B збільшували для введення вакуумного проміжку, що при трансляції віддаляли групи атомів, які входили в базис, тим самим формуючи нескінченний набір кластерів (острівців). Відстані між крайніми атомами сусідніх кластерів, що утворилися після трансляції атомного базису, були неоднаковими в напрямках X і Y, тобто $d_x \neq d_y$. Для відстеження залежностей електронних властивостей острівцевої плівки від відстані між кластерами вказували відстань d_y , що далі помічали як d . Наприклад, для суцільної плівки ця відстань була $d = 0$. Залежно від хімічного складу розміри кластерів (острівців) становили 8–10 Å.

За хімічним складом модельні плівки були однорідними і складалися тільки з атомів Ni або Cu (рис. 3,в,г), а також неоднорідні — Ni_xFe_{1-x} (рис. 3,а,б), де $x = 0.8$, такий сплав називають пермалоєм.

IV. РЕЗУЛЬТАТ РОЗРАХУНКІВ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Розраховано просторові розподіли валентних електронів та їх перетини, густини електронних станів, ширини заборонених зон, кулонівські потенціали вздовж заданих напрямків для модельних плівок.

На рис. 4,а зображені просторові розподіли густини валентних електронів у межах примітивної комірки для модельних острівцевих плівок сплаву $Ni_{0.8}Fe_{0.2}$. Об'єкти зліва направо на рис. 4,а відрізняються збільшеними відстанями між острівцями. Можна помітити, що зі збільшенням відстані між острівцями відбувається перерозподіл електронів — електрони, мовби, “стікаються” в середину острівця. Особливості просторового розподілу електронної густини всередині ос-

трівця демонструються на рис. 4,б,в для різних ізозначень густини. Так, електронні хмари з більшою густиною утворюють оболонки, що заповнені електронними хмарами меншої густини (порівняй острівці на рис. 4,в), тобто утворюються електронні структу-

ри, які назвемо “вбудовані конденсатори”. Такі отримані особливості просторового розподілу електронної густини можуть пояснити появу ємнісного характеру провідності, що було зафіксовано в експериментах [8–10].

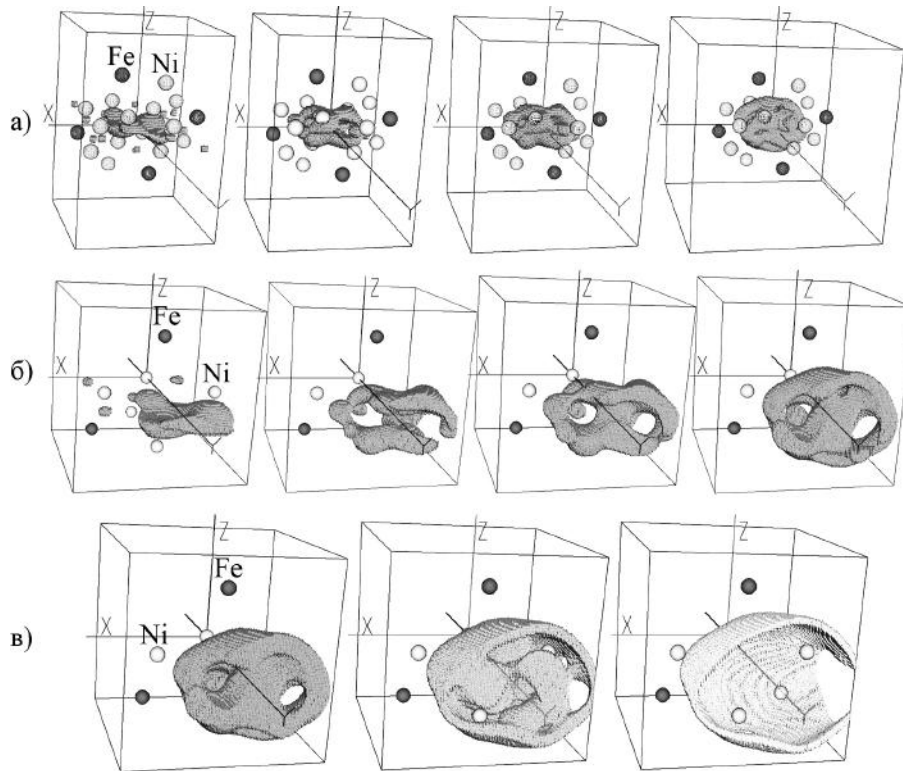


Рис. 4. Просторові розподіли густини валентних електронів у суцільній плівці $\text{Ni}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}$ (лівий) та острівцях $\text{Ni}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}$, розташованих на відстанях $d = 1.16, 1.69$ та 3.27 \AA (зліва направо), для ізозначень 1–0.9 від максимального: а — показаний весь простір примітивної комірки, б — показана частина простору примітивної комірки; в — просторові розподіли густини валентних електронів в острівцях $\text{Ni}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}$ (в), що знаходяться на відстані 3.01 \AA один від одного, для ізозначень 1–0.9, 0.9–0.8 та 0.8–0.7 від максимального (зліва направо); показана частина простору примітивної комірки.

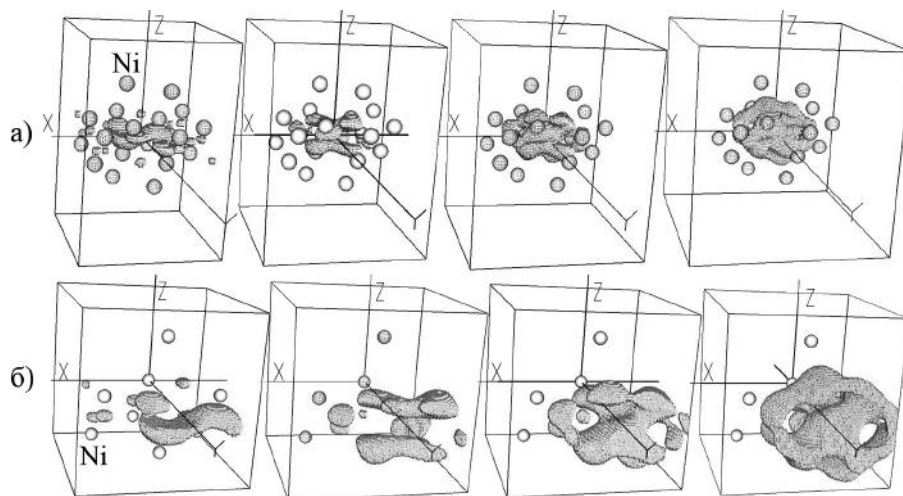


Рис. 5. Просторові розподіли густини валентних електронів у суцільній плівці Ni (лівий) та острівцях Ni на відстанях $d = 1.15, 1.68$ та 3.27 \AA (зліва направо) для ізозначень 1–0.9 від максимального: а — показаний весь простір примітивної комірки, б — показана частина простору примітивної комірки.

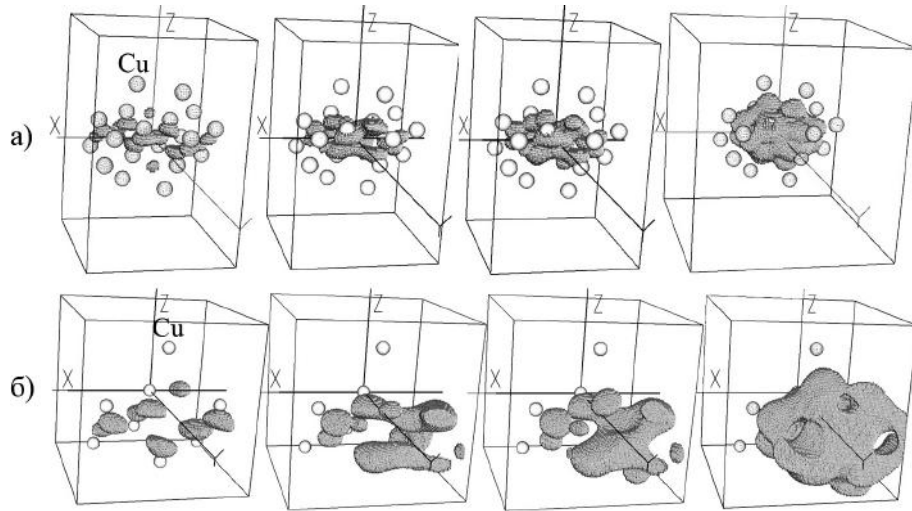


Рис. 6. Просторові розподіли густини валентних електронів у суцільній плівці Cu (лівий) та острівцях Cu, що знаходяться на відстанях $d = 0.97, 1.50$ та 3.09 \AA один від одного (зліва направо), для ізомаркування 1–0.9 від максимального; а — показаний весь простір примітивної комірки, б — показана частина простору примітивної комірки.

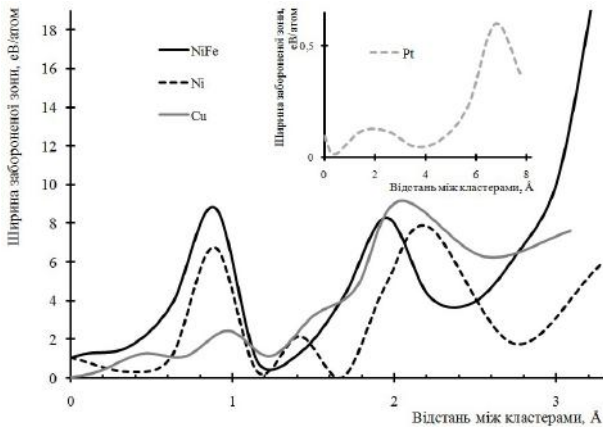


Рис. 7. Залежність ширини забороненої зони енергій від відстані d між острівцями $\text{Ni}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}$, Ni, Cu та Pt острівцевих плівок

Аналогічні особливості просторового розподілу валентних електронів можна помітити і для хімічно однорідних плівок Ni (рис. 5) та Cu (рис. 6). Тоді як просторовий розподіл валентних електронів острівце-

вих плівок Pt значно відрізняється — у ньому не проявляється наявність “вбудованих конденсаторів”, тобто не спостерігається таких топологічних форм у розподілі електронної густини, у яких електронна густина меншого значення заповнює порожнину електронної хмари більшої густини.

Під час аналізу електронного спектра помічені осциляції ширини забороненої зони досліджених острівцевих та плівкових об’єктів залежно від відстані d між острівцями (рис. 7). На піках осциляцій ширина забороненої зони сягає до 10 eV/атом. Слід зазначити, що в модельних об’єктах на основі Cu осциляції слабше виражені, ніж осциляції об’єктів, що містять Ni. Щодо хімічно однорідних острівцевих плівок Pt, то розмах осциляцій у зміні ширини забороненої зони не перевищував 0.6 eV/атом (вставка на рис. 7), що на порядок менше порівняно з плівками інших перехідних металів (Ni, Cu). Також слід зазначити, що для всіх суцільних плівок неоднорідної товщини ширина забороненої зони мала порівняно з величинами забороненої зони острівцевих плівок, що спостерігалися на піках їх осциляційних змін.

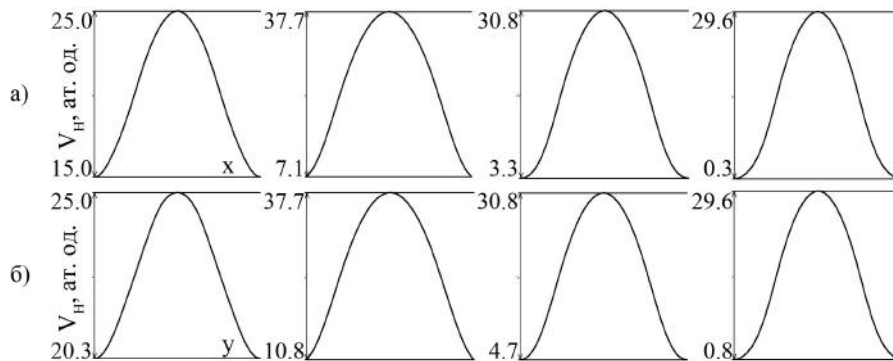


Рис. 8. Кулонівські потенціали, побудовані уздовж острівців $\text{Ni}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}$ для $d = 0, 1.16, 1.69$ та 3.27 \AA (зліва направо): а — уздовж осі X, б — уздовж осі Y; значення наведені в атомних одиницях.

Аргументом, який доводить, що досліджувані острівцеві плівки — єдиний об'єкт із наявною взаємодією між острівцями, є обчислені за формулою (9) кулонівські потенціали в напрямку трансляції кластерів. Із рис. 6 видно, що кулонівські потенціали мають ненульові значення в області між острівцями. Оскільки при розрахунку потенціалів використовували самоузгоджену електронну густину, оцінену з урахуванням обмінно-кореляційної взаємодії в операторі Кона-Шема, то можна вважати, що взаємодія між атомами сусідніх острівців була як кулонівського типу, так і квантового (обмінно-кореляційного), що збігається з коментарями авторів експерименту [8].

V. ВИСНОВКИ

Методами теорії функціонала електронної густини та псевдопотенціалів із перших принципів, використовуючи авторський програмний комплекс, розраховані просторові розподіли валентних електронів, густини електронних станів, ширини забороненої зо-

ни, кулонівські потенціали вздовж заданих напрямків для модельних металевих суцільних плівок неоднорідної товщини та острівцевих плівок різного хімічного складу ($\text{Ni}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}$, Ni, Cu, Pt).

Помічено особливості в просторовому розподілі електронної густини в острівцевих плівках із Ni, Cu та $\text{Ni}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}$. У просторовому розподілі електронної густини в острівцях спостерігали такі топологічні форми, у яких електронна густина меншого значення заповнювала порожнину електронної хмари більшої густини, що були названі “вбудовані конденсатори”. У платинових острівцевих плівках такого перерозподілу електронної густини не спостерігали.

Зафіксовані осциляції величини забороненої зони в електронному спектрі острівцевих плівок на основі $\text{Ni}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}$, Ni, Cu зі зміною відстані між острівцями. Розмах осциляцій для них сягав 10 eV/атом. Для острівцевих плівок Pt осциляції не перевищували 0.6 eV/атом. Заборонена зона в електронному спектрі суцільних неоднорідних за товщиною плівках будь-якого дослідженого хімічного складу практично відсутня.

-
- [1] A. Milner, A. Gerber, B. Groisman, M. Karpovsky, A. Gladkikh, Phys. Rev. Lett. **76**, 475 (1996).
- [2] A. B. Pakhomov, X. Yan, B. Zhao, Appl. Phys. Lett. **67**, 3497 (1995).
- [3] V. Janicki, J. Sancho-Parramon, S. Bosch, H. Zorc, F. J. Belarrie, J. Arbiol, Appl. Phys. A **115**, 481 (2014).
- [4] M. Green, F. Yi, Thin Solid Films **467**, 308 (2004).
- [5] A. Azelevitch, B. Gorenstein, G. Golan, Phys. Procedia **32**, (2012).
- [6] A. Azelevitch, A. Boris, G. Gady, Opt. Express **21**, 4126 (2013).
- [7] Р. І. Бігун, М. Д. Бучковська, В. М. Гаврилюх, Я. А. Пастирський, З. В. Стасюк, Наносист. наноматер. нанотехнол. **13**, 75 (2015).
- [8] A. P. Boltaev, F.A.Pudonin, J. Exp. Theor. Phys. **107**, 501 (2008).
- [9] A. P. Boltaev, F.A.Pudonin, I. A. Sherstnev, Phys. Solid. State **57**, 2099 (2015).
- [10] B. A. Belyaev, N. A. Drokin, Phys. Solid. State **54**, 360 (2012).
- [11] Ab initio calculation: <http://sites.google.com/a/kdpu.edu.ua/calculationphysics/>.
- [12] R. M. Balabai, Ukr. J. Phys. **58**, 389 (2013).
- [13] R. M. Balabai, H. N. Chernikova, Appl. Phys. A **116**, 649 (2014).
- [14] R. M. Balabai, D. Yu. Gritsulia, V. G. Litovchenko, J. Nano-Electron. Phys. **8**, 02007 (2016).
- [15] Р. М. Балабай, Д. Ю. Грицуля, А. В. Здециц, О. Ю. Тарасова, Наносист. наноматер. нанотехнол. **13**, 707 (2015).
- [16] R. M. Balabai, A. V. Zdeschyts, A. G. Lubenets, Mol. Cryst. Liq. Cryst. **639**, 39 (2016).
- [17] W. Kohn, L. J. Sham, Phys. Rev. A **140**, 1133 (1965).
- [18] P. Hohenberg, W. Kohn, Phys.Rev. B **136**, 864 (1964).
- [19] R. M. Dreizler, E. K. Gross, *Density functional theory* (Springer Verlag, 1990).
- [20] G. B. Bachelet, D. R. Hamann, M. Schluter, Phys. Rev. B **26**, 4199 (1982).
- [21] D. R. Hamann, M. Schluter, C. Chiang, Phys. Rev. Lett. **43**, 1494 (1979).
- [22] P. J. H. Denteneer, W. van Haeringen, J. Phys. C **18**, 4127 (1985).
- [23] G. Makov, R. Shah, M. C. Payne, Phys. Rev. B **53**, 15513 (1996).
- [24] M. C. Payne, Rev. Mod. Phys. **64**, 1045 (1992).

**ANOMALOUS ELECTRONIC PROPERTIES OF THIN METAL FILMS OF ISLAND
STRUCTURES: THE FIRST PRINCIPLES CALCULATIONS**

R. M. Balabai, D. Yu. Kravtsova
*Department of Physics, Kryvyi Rih State Pedagogical University,
54, Gagarina Ave., Kryvyi Rih, UA-50086, Ukraine*

The paper is devoted to the electron properties of the transition metal films of the islands structure. The main research methods are theoretical calculations based on the density functional theory and the ab initio pseudopotential method. Using the author's software, the spatial distribution of valence electron density, the distribution of electron states density, the bandgap, the Coulomb potential along the transition metal ($\text{Ni}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}$, Ni, Cu, Pt) films with islands structure were calculated. Our calculation showed the presence of the size effects that manifest in the oscillation of a dependence of the bandgap on the distance between the islands. The range of the gap oscillations of the $\text{Ni}_{0.8}\text{Fe}_{0.2}$, Ni, Cu island films reaches about 10 eV/atom, and the gap oscillations of the Pt-film does not exceed 0.6 eV/atom. It is important that the bandgap of the continuous metal films of variable thickness are small. We have discussed the features of the spatial distribution of the valence electrons of the islands films has been revealing a deviation from the typical metal distribution. The potentials which were obtained along the vector through the islands had non-zero values in the area between the islands that confirm their interaction with each other; therefore, the island film is an integral object. Since the self-consistent electron density was analyzed, it can be assumed that the interaction between the atoms of the neighboring islands was of the Coulomb and quantum (exchange-correlation) type.