

Адсорбция бария на поверхности GaN(0001)

М.Н. Лапушкин

ФГБУН «Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН»

194021, Россия, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26

lapushkin@ms.ioffe.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.210

Аннотация: Впервые проведен расчет адсорбции атомов бария на поверхности грани (0001) GaN методом функционала плотности. 2D-слой GaN моделировался суперъячейкой GaN(0001) 2×2 содержащих 10 бислоя GaN. Расчет электронной плотности состояния и энергии адсорбции атома Ba проводился для пяти мест адсорбции атома Ba: в ямочной позиции, в мостиковых позициях между поверхностными атомами Ga (N) и над поверхностным атомом Ga (N). Один атом Ba приходился на 4 поверхностных атомов Ga в первом бислое GaN. Наиболее предпочтительно адсорбция атома бария над поверхностным атомом N. Энергия адсорбции составляет величину: 2,96 эВ. Адсорбция атомов Ba приводит к незначительной реконструкции поверхности GaN: максимальный сдвиг слоя атомов Ga (N) не превышает 0,11 Å. Адсорбция Ba приводит к образованию поверхностной зоны ниже уровня Ферми.

Ключевые слова: метод функционала плотности, электронная структура, интерфейс, поверхность, адсорбция, барий, GaN.

1. Введение

Кристалл GaN является широкозонным полупроводником обладающий хорошей теплопроводностью [1], высокой светоотдачей [2], высокой термостойкостью [3], что обеспечило широкое применение GaN в электронике: мощных полупроводниковых элементов [4,5] и синих светодиодов [6,7]. Переход от кристаллов к двумерным (2D) материалам приводит к тому, что спектр энергетических уровней и плотность состояний (*DOS* – density of states) этих материалов значительно изменяется. Это обеспечивает 2D материалам уникальные физические и химические свойства. Детальный обзор экспериментальных и теоретических исследований, а также физических и химических свойств поверхности GaN приведен в большом обзоре [8].

Существуют большое количество расчетов как кристаллов, так и 2D-слоев GaN, ссылки на эти работы приведены в обзоре [8].

Исследованиям адсорбции атомов щелочноземельных металлов на поверхности уделялось мало внимания, хотя были получены интересные результаты. В работе [9] проведен расчет адсорбции атомов бериллия на поверхности 2D-слоя GaN(0001) и показано, что выгодно замещение поверхностного атома Ga атомом Be. Исследованиям адсорбции атомов магния на поверхности уделено больше всего внимания так как Mg является популярной примесью *p*-типа в GaN [10,11]. Так, например, в [12] исследована адсорбция и внедрение атомов Mg в 2D-слой GaN(0001).

При покрытии 0,25 монослоя Mg предпочтительна адсорбция в позиции $T4$ над поверхностным атомом N .

Синтез графеноподобного $g-GaN$ [13] стимулировал и расчеты адсорбции различных атомов на данной поверхности. Так в работе [14] была исследована адсорбция атомов щелочноземельных атомов и в том числе Ba на поверхности $g-GaN$. Показано, что предпочтительна адсорбция Ba либо над поверхностным атомом Ga либо в мостиковой позиции между атомами Ga и N . Энергия адсорбции E_{ads} равна 4,11 эВ. Адсорбированный атом Ba расположен на высоте 3,21 Å над $g-GaN$. Адсорбция Ba приводит к образованию узкой зоны около уровня Ферми E_F .

Экспериментально адсорбция бария на поверхности $n-GaN(0001)$ была исследована, например, в [15,16]. В [15] исследована пленка $GaN(0001)$ n -типа толщиной 4 мкм на поверхности сапфира методом пороговой фотоэмиссионной спектроскопии. Найдены осцилляции фотоэмиссионного тока связанные с интерференционными эффектами в пленке $GaN(0001)$. Результаты фотоэмиссионных экспериментов были интерпретированы как формирование аккумуляционного $2D$ -слоя. В [16] исследована пленка $GaN(0001)$ n -типа толщиной 4,2 мкм на поверхности сапфира методом при синхронном облучении при энергии квантов от 50 до 400 эВ. Для чистой поверхности $GaN(0001)$ выше максимума валентной зоны было найдена широкая зона поверхностных состояний. Адсорбция атомов бария привела к формированию новой узкой зоны шириной ~1,5 эВ ниже уровня Ферми, которую интерпретировали как зону аккумуляционного $2D$ -слоя.

В работе [17] синтезировано тройное соединение $Ba_3Ga_3N_5$, которое является широкозонным полупроводником.

Целью данной работы было рассчитать электронную структуру адсорбированного Ba на поверхности $2D$ -слоя $GaN(0001)$ и энергию связи атомов Ba , что позволит определить предпочтительные места адсорбции атомов Ba на поверхности $GaN(0001)$. Результаты работы позволят лучше понять и интерпретировать результаты более ранних работ по исследованиям адсорбции атомов щелочноземельных металлов на поверхности $GaN(0001)$.

2. Методический раздел

Расчеты из первых принципов выполняются в рамках теории функционала плотности DFT, реализованной в пакете QUANTUM ESPRESSO [18] с использованием обменно-корреляционного функционала описанного в аппроксимации локальной плотности (LDA – local density

approximation) в форме Perdew-Zinger (PZ) интерполяции [19]. Суперъячейка (0001) $2 \times 2 \times 2$ была изготовлена с использованием графической программы с открытым исходным кодом BURAI-1.3 [20]. Вакуумный зазор между 2D-слоями был 18 Å, чтобы избежать влияния паразитных электрических полей. Ограничение кинетической энергии и ограничение плотности заряда были выбраны 40 Ry и 350 Ry. Использована гамма-центрированная сетка по k -точкам $4 \times 4 \times 1$ для всех 2D систем в этой статье. Сходимость составила $1 \cdot 10^{-6}$ Ry.

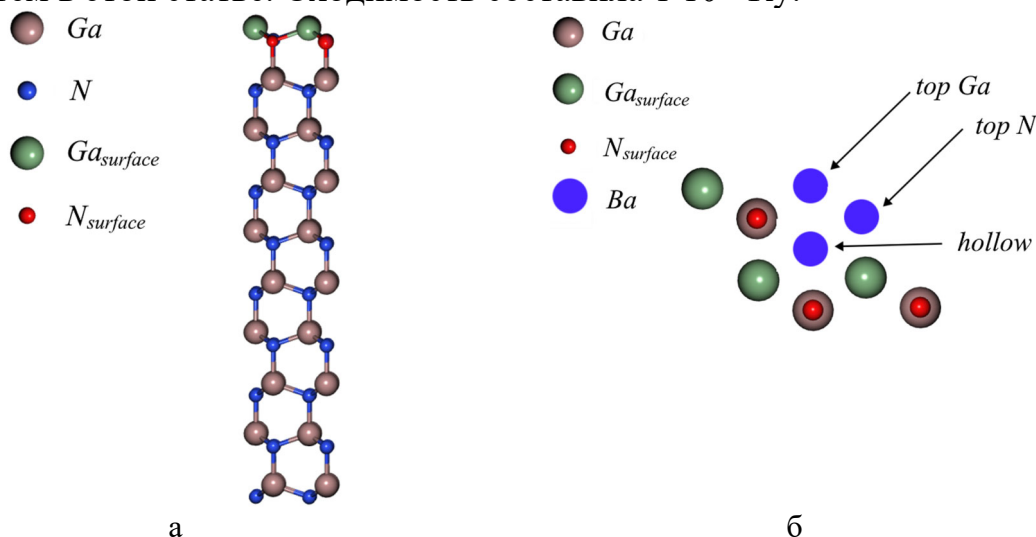


Рис. 1. 2D-слой W (а). Положение адатомов Ge на 2D-слое W : вид сверху (б). Синий шар – атом W , тёмно-синий шар – поверхностный атом W , красный шар – атом Ge .

GaN имеет структуру вюрцита с следующими параметрами решетки: $a = b = 3,21629$ Å и $c = 5,23996$ Å. Один атом Ba приходится на 4 поверхностных атомах Ga . Суперъячейка состоит из 10 бислоев GaN . Релаксации подвергались только верхний бислой GaN . Положение остальных бислоев GaN было зафиксировано, что было сделано для моделирования объема GaN . Связи атомов азота нижнего бислоя GaN были насыщены псевдоатомами водорода. Стадия релаксации параметров ячейки суперъячейки длится до достижения давления менее 0,5 кбар.

3. Результаты и обсуждение

Для чистой поверхности релаксированного 2D-слоя GaN (0001) была рассчитана релаксация поверхности относительно нерелаксированного 2D-слоя GaN (0001). Величину релаксации можно определить по следующей формуле:

$$\Delta_{ij} = (d_{ij} - d_{0ij}) / d_{0ij}, \quad (1)$$

где Δ_{ij} – относительное изменение расстояния между i -тым и j -тым слоями атомов Ga для релаксированной и нерелаксированной поверхности. d_{0ij} – расстояние между i -тым и j -тым слоем атомов

Ga для нерелаксированной поверхности и d_{ij} – расстояние между i -тым и j -тым слоем атомов Ga для релаксированной поверхности. Знак «—» означает уменьшение расстояния. Получено следующее значение: $\Delta_{12} = -0,010$.

Была рассчитана энергия адсорбции (E_{ads}) атомов Ba на поверхности GaN в пяти позициях: ямочной (hollow), над поверхностным атомом Ga (top Ga), над поверхностным атомом N (top N), мостиковой между атомами Ga (bridge Ga) и мостиковой между атомами N (bridge N) по следующей формуле:

$$E_{ads} = -(E_{Ba/GaN} - E_{GaN} - E_{Ba}), \quad (2)$$

где $E_{Ba/GaN}$ и E_{GaN} – полные энергии поверхности с адсорбированным Ba и без него, E_{Ba} – полная энергия атома Ba . Значения энергии адсорбции атомов Ba и расстояния между плоскостью, образованной центрами поверхностных атомов Ga , и положением адсорбированного атома Ba приведены в Таблице 1. Наиболее предпочтительной является адсорбция Ba над поверхностным атомом N . Адсорбция атомов Ba в мостиковых позициях bridge Ga и bridge N приводит к смещению атомов Ba соответственно в положение top N и hollow.

Таблица 1. Энергия адсорбции атома бария и расстояние между уровнем поверхностных атомов Ga и плоскостью адсорбированных атомов.

Положение	E_{ads} , эВ	h , Å
hollow	2,95	2,60
top Ga	2,42	3,11
top N	2,96	2,60

Разницы между энергиями в положении hollow и top N незначительная, в обоих случаях образуется связь с тремя атомами галлия. Наиболее удаленный атом галлия от атома азота сдвигается на 0,45 Å вниз.

Наблюдается незначительная реконструкция поверхности GaN , вызванная адсорбцией атомов Ba , вызванная взаимодействием валентных электронов адсорбционной системы. Поверхностные атомы GaN , выделенные зеленым и красным цветом на рис. 1 б, сдвигаются вверх и получено следующее значение для релаксации поверхности: $\Delta_{12} = 0,041$.

Результаты расчета плотности состояний (DOS) чистой поверхности 2D-слоя GaN и с адсорбированным барием представлены на рис. 2. На рис. 2 а-в представлена плотность состояний 2D-слоя GaN в поверхностном бислое GaN и приповерхностном бислое и десятом бислое, самом удаленном от поверхностного бислоя GaN . Валентная зона GaN сформирована $N2p$ состояниями и $Ga4s$ и $Ga4p$ состояниями с преобладающим вкладом $N2p$ состояний.

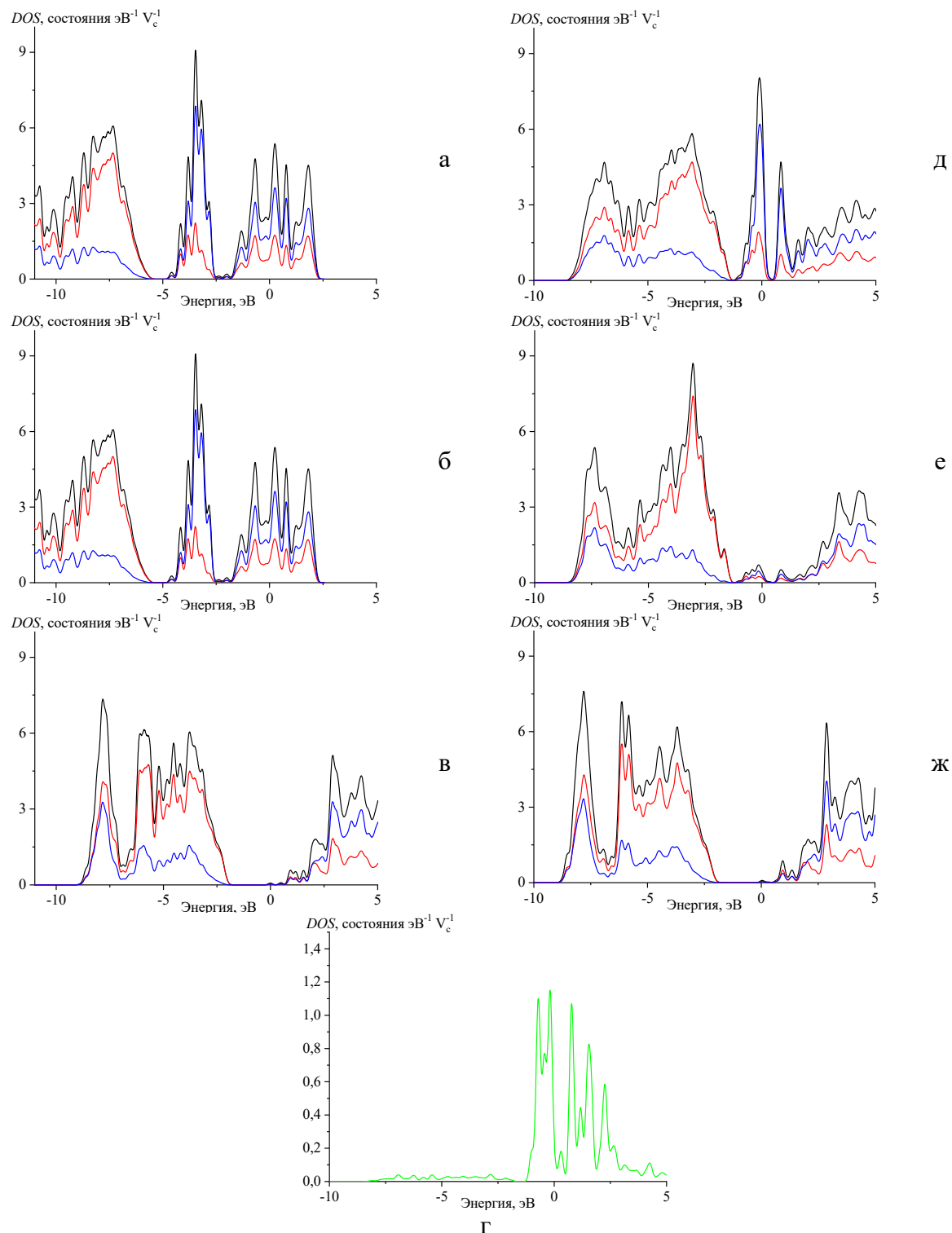


Рис. 2. Рассчитанная полная и парциальная плотность состояний 2D-слоя *GaN* (а-в) и с адсорбированным слоем *Ba* (г-ж). Полная плотность состояний, поверхностного бислоя *GaN* (а, д), приповерхностного бислоя *GaN* (б, е), десятого считая от поверхности бислоя *GaN* (ж) и адсорбированного слоя *Ba* (г). V_c – объем элементарной ячейки. Полная плотность состояний в бислое *GaN* – черным цветом и в слое бария – зеленым цветом. Плотность состояний азота – красным цветом и галлия – синим цветом.

Для поверхностного бислоя (см. рис. 2 а) характерна зона, обладающая три выделяющихся пика, с максимумом и 3,5, 7,4 и 11,8 эВ. Вклад в первый пик вносит в основном $N2p$ состояния с примесью $Ga4p$ состояний. Вклад во второй пик вносит в основном $N2p$ состояния с примесью $Ga4s$ состояний. На уровне Ферми наблюдается широкий пик поверхностных состояний, который сформирован состояниями Ga в основном $Ga4p$. Небольшой пик $N2p$ состояний слоя атомов N также расположен на уровне Ферми, отметим, что атомы N расположены на 0,75 ниже атомов Ga . Для первого подповерхностного бислоя (см. рис. 2 б) структура валентной зоны намного изменяется и исчезает пик при 3,5 эВ. Также основной вклад вносят состояния азота. Пик поверхностных состояний уменьшается в 30 раз. Для десятого (пятого) слоя вид валентной зоны совпадает с валентной зоной кристалла GaN . Ширина запрещенной зоны $\sim 2,3$ эВ.

Результаты расчета чистой поверхности хорошо совпадают с теоретическими расчетами [8] и экспериментальными данными [8].

Адсорбция бария приводит к следующим изменениям в спектре валентной зоны и зоны поверхностных состояний. На уровне Ферми и ниже наблюдается пик поверхностных состояний $Ba6s$. Для первого (поверхностного) бислоя GaN валентная зона становится более приближенной к валентной зоне объема. Для второго (подповерхностного) бислоя GaN изменения незначительны. Для десятого бислоя GaN изменения еще менее заметны.

Полученные результаты находятся в некотором противоречии с интерпретацией экспериментальных данных по адсорбции 0,25 монослоя Ba на поверхности $n-GaN(0001)$ в работе [15]. При используемых энергиях возбуждения 50-150 эВ в [15] глубина зондирования составляет порядка ~ 12 Å, что соответствует 5 бислоям GaN . Однако основной вклад вносит поверхностный слой Ba и два ближайших к нему бислоя GaN . В работе [15] после адсорбции 0,25 монослоя Ba на E_F наблюдался пик, который был связан с аккумуляционным слоем и не наблюдался пик поверхностных состояний GaN на E_F . Однако из расчета следует, что это пик связан с состояниями Ba и поверхностными состояниями GaN . В эксперименте не наблюдалось для чистой поверхности поверхностного состояния на E_F , а наблюдался пик поверхностных состояний рядом максимумом валентной зоны, что можно связать с особенностями обработки поверхности перед измерениями.

Наиболее вероятно расхождение в интерпретации данных [15] и расчета связано может быть с некорректным определением потока атомов бария.

4. Заключение

Впервые проведен расчет адсорбции *Ba* на поверхности 2D-слоя *GaN* (0001) методом функционала плотности. Валентная зона 2D-слоя *GaN* (0001) сформирована *N2p* состояниями и *Ga4s* и *Ga4p* состояниями с преобладающим вкладом *N2p* состояний. Ширина запрещенной зоны равна 2,30 эВ. На уровне Ферми расположено поверхностное состояние, образованное электронами галлия. Показано, что адсорбция атома *Ba* предпочтительна над поверхностным атомом *N* и энергия адсорбции атомов *Ba* равна 2,96 эВ. Энергия адсорбции атомов *Ba* в ямочной позиции чуть меньше и равна 2,95 эВ. Наблюдается незначительная реконструкция поверхности *GaN* (0001) при адсорбции атомов *Ba*. Адсорбция *Ba* приводит к образованию поверхностного состояния на уровне Ферми с шириной на полувысоте 1,0 эВ.

Библиографический список:

1. **Qian, X.** Phonon-engineered extreme thermal conductivity materials / X. Qian, J. Zhou, G.Chen // *Nature Materials*. – 2021. – V. 20. – I. 9. – P. 1188-1202. DOI: 10.1038/s41563-021-00918-3.
2. **Buffolo, M.** Defects and reliability of GaN-based LEDs: review and perspectives / M. Buffolo, A. Caria, F. Piva et al. // *Physica Status Solidi (a)*. – 2022. – V. 219. – I. 8. – Art № 2100727. – 22 p. DOI: 10.1002/pssa.202100727.
3. **Emon, A.I.** A review of high-speed GaN power modules: state of the art, challenges, and solutions / A.I. Emon, A.B. Mirza, J. Kaplun et al. // *IEEE Journal of Emerging and Selected Topics in Power Electronics*. – 2022. – V. 11. – I. 3. – P. 2707-2729. DOI: 10.1109/JESTPE.2022.3232265.
4. **Sun, R.** GaN power integration for high frequency and high efficiency power applications: a review / R. Sun, J. Lai, W. Chen, B. Zhang // *IEEE Access*. – 2020. – V. 8. – P. 15529-15542. DOI: 10.1109/ACCESS.2020.2967027.
5. **Kozak, J.P.** Stability, reliability, and robustness of GaN power devices: a review / J.P. Kozak, R. Zhang, M. Porter et al. // *IEEE Transactions on Power Electronics*. – 2023. – V. 38. – I. 7. – P. 8442-8471. DOI: 10.1109/TPEL.2023.3266365.
6. **Zhang, Y.** Recent advances on gan-based micro-leds / Y. Zhang, R. Xu, Q. Kang et al. // *Micromachines*. – 2023. – V. 14. – I. 5. – Art. № 991. – 19 p. DOI: 10.3390/mi14050991.
7. **Behringer, M.** Blue high-power laser diodes--beam sources for novel applications: overview and outlook / M. Behringer, H. König // *PhotonicsViews*. – 2020. – V. 17. – I. 2. – P. 60-63. DOI: 10.1002/phvs.202000018.
8. **Bermudez, V.M.** The fundamental surface science of wurtzite gallium nitride / V.M. Bermudez // *Surface Science Reports*. – 2017. – V. 72. – I. 4. – P. 147-315. DOI: 10.1016/j.surfrep.2017.05.001.
9. **Northrup, J.E.** Incorporation of beryllium on the clean and indium-terminated GaN (0001) surface / J.E. Northrup // *Applied Physics Letters*. – 2001. – V. 78. – I. 19. – P. 2855-2857. DOI: 10.1063/1.1368369.
10. **Lyons, J.L.** First-principles theory of acceptors in nitride semiconductors / J.L. Lyons, A. Alkauskas, A. Janotti, C.G. Van de Walle // *Physica Status Solidi (b)*. – 2015. – V. 252. – I. 5. – P. 900-908. DOI: 10.1016/j.cossms.2024.101148.
11. **Reshchikov, M.A.** Photoluminescence from vacancy-containing defects in GaN / M.A. Reshchikov // *Physica Status Solidi (a)*. – 2023. – V. 220. – I. 10. – Art. № 2200402. – 8 p. DOI: 10.1002/pssa.202200402.
12. **Sun, Q.** Energetics of Mg incorporation at GaN (0001) and Ga N (000 $\bar{1}$) surfaces / Q. Sun, A. Selloni, T.H. Myers et al. // *Physical Review B*. – 2006. – V. 73. – I. 15. – Art. № 155337. – 9 p. DOI: 10.1103/PhysRevB.73.155337.
13. **Al Balushi, Z.Y.** Two-dimensional gallium nitride realized via graphene encapsulation / Z.Y. Al Balushi, K. Wang, R. K. Ghosh et al. // *Nature Materials*. – 2016. – V. 15. – I. 11. – P. 1166-1171. DOI: 10.1038/nmat4742.
14. **Cui, Z.** Tuning the optoelectronic properties of graphene-like GaN via adsorption for enhanced optoelectronic applications / Z. Cui, X.Wang, M. Li et al. // *Solid State Communications*. – 2019. – V. 296. – P. 26-31. DOI: 10.1016/j.ssc.2019.04.010.

15. Бенеманская, Г.В. Модификация электронной структуры и формирование аккумуляционного слоя ультратонких интерфейсов Ba/n-GaN и Ba/n-AlGaN / Г. В. Бенеманская, С. Н. Тимошнев, С. В. Иванов и др. // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2014. – Т. 145. – Вып. 4. – С. 684-696.
16. Бенеманская, Г.В. Аккумуляционный зарядовый слой на поверхности n-GaN (0001) с ультратонкими Ba покрытиями / Г. В. Бенеманская, Г. Э. Франк-Каменецкая // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2005. – Т. 81. – Вып. 10. – С. 642-645
17. Hintze, F. Ba₃Ga₃N₅: a novel host lattice for Eu²⁺-doped luminescent materials with unexpected nitridogallate substructure / F. Hintze, F. Hummel, P. J. Schmidt et al. // Chemistry of Materials. – 2012. – V. 24. – I. 2. – P. 402-407. DOI: 10.1021/cm203323u.
18. Giannozzi, P. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials / P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2009. – V. 21. – №. 39. – Art. № 395502. – 19 p. DOI: 10.1088/0953- 8984/21/39/395502.
19. Perdew, J.P. Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems / J.P. Perdew, A. Zunger // Physical Review B. – 1981. – V. 23. – I. 10. – P. 5048-5079. DOI: 10.1103/PhysRevB.23.5048.
20. Nishihara, S. BURAI 1.3 A GUI of Quantum ESPRESSO / S. Nishihara. – Режим доступа: www.url:https://nisihara.wixsite.com/burai. – 16.07.2024.

References:

1. Qian X., Zhou J., Chen G. Phonon-engineered extreme thermal conductivity materials, *Nature Materials*, 2021, vol. 20, issue 9, pp. 1188-1202. DOI: 10.1038/s41563-021-00918-3.
2. Buffolo M., Caria A., Piva F. et al. Defects and reliability of GaN-based LEDs: review and perspectives, *Physica Status Solidi (a)*, 2022, vol. 219, issue 8, art. no. 2100727, 25 p. DOI: 10.1002/pssa.202100727.
3. Emon A.I., Mirza, A. B., Kaplun, J. et al. A review of high-speed GaN power modules: state of the art, challenges, and solutions, *IEEE Journal of Emerging and Selected Topics in Power Electronics*, 2022, vol. 11, issue 3, pp. 2707-2729. DOI: 10.1109/JESTPE.2022.3232265.
4. Sun R., Lai J., Chen W., Zhang B. GaN power integration for high frequency and high efficiency power applications: a review, *IEEE Access*, 2020, vol. 8, pp. 15529-15542. DOI: 10.1109/ACCESS.2020.2967027.
5. Kozak J.P., Zhang R., Porter M. et al. Stability, reliability, and robustness of GaN power devices: a review, *IEEE Transactions on Power Electronics*, 2023, vol. 38, issue 7, pp. 8442-8471. DOI: 10.1109/TPEL.2023.3266365.
6. Zhang Y., Xu R., Kang Q. et al. Recent advances on gan-based micro-leds, *Micromachines*, 2023, vol. 14, issue 5, art. no. 991, 19 p. DOI: 10.3390/mi14050991.
7. Behringer M., König H. Blue high-power laser diodes--beam sources for novel applications: overview and outlook, *PhotonicsViews*, 2020, vol. 17, issue 2, pp. 60-63. DOI: 10.1002/phvs.202000018.
8. Bermudez V.M. The fundamental surface science of wurtzite gallium nitride, *Surface Science Reports*, 2017, vol. 72, issue 4, pp. 147-315. DOI: 10.1016/j.surfrep.2017.05.001.
9. Northrup J.E. Incorporation of beryllium on the clean and indium-terminated GaN (0001) surface, *Applied Physics Letters*, 2001, vol. 78, issue 19, pp. 2855-2857. DOI: 10.1063/1.1368369.
10. Lyons J.L., Alkauskas A., Janotti A., Van de Walle C.G. First-principles theory of acceptors in nitride semiconductors, *Physica Status Solidi (b)*, 2015, vol. 252, issue 5, pp. 900-908. DOI: 10.1016/j.cossms.2024.101148.
11. Reshchikov M.A. Photoluminescence from vacancy-containing defects in GaN, *Physica Status Solidi (a)*, 2023, vol. 220, issue 10, art. no. 2200402, 8 p. DOI: 10.1002/pssa.202200402.
12. Sun Q., Selloni A., Myers T.H., Doolittle W.A. Energetics of Mg incorporation at GaN (0001) and GaN (000 $\bar{1}$) surfaces, *Physical Review B*, 2006, vol. 73, issue 15, art. no. 155337, 9 p. DOI: 10.1103/PhysRevB.73.155337.
13. Al Balushi Z.Y., Wang K., Ghosh R.K. et al. Two-dimensional gallium nitride realized via grapheme encapsulation, *Nature Materials*, 2016, vol. 15, issue 11, pp. 1166-1171. DOI: 10.1038/nmat4742.
14. Cui Z., Wang X., Li M. et al. Tuning the optoelectronic properties of graphene-like GaN via adsorption for enhanced optoelectronic applications, *Solid State Communications*, 2019, vol. 296, pp. 26-31. DOI: 10.1016/j.ssc.2019.04.010.
15. Benemanskaya G.V., Timoshnev S.N., Ivanov S.V et al. Modification of the electronic structure and formation of an accumulation layer in ultrathin Ba/n-GnN and Ba/n-AlGaN interfaces, *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 2014. vol. 118, issue 4, pp. 600-610. DOI: 10.1134/S1063776114040098.
16. Benemanskaya G. V., Frank-Kamenetskaya G.É., *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, 2005, vol. 81, issue 10, pp. 519–522 DOI: 10.1134/1.1996761.

17. Hintze F., Hummel F., Schmidt P.J. et al. $\text{Ba}_3\text{Ga}_3\text{N}_5$: a novel host lattice for Eu^{2+} -doped luminescent materials with unexpected nitridogallate substructure, *Chemistry of Materials*, 2012, vol. 24, issue 2, pp. 402-407. DOI: 10.1021/cm203323u.
18. Giannozz, P., Baroni S., Bonini N. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2009, vol. 21, no. 39, art. no. 395502, 19 p. DOI: 10.1088/0953-8984/21/39/395502.
19. Perdew J.P., Zunger A. Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems, *Physical Review B*, 1981, vol. 23, issue 10, pp. 5048-5079. DOI: 10.1103/PhysRevB.23.5048.
20. Nishihara S. BURAI 1.3 A GUI of Quantum ESPRESSO. Available at: <https://nisiyara.wixsite.com/burai> (accessed 16.07.2024).

Original paper

Adsorption of barium on surface of GaN(0001)

M.N. Lapushkin

Ioffe Institute, St. Petersburg, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.210

Abstract: For the first time, the adsorption of barium atoms on the surface of the (0001) face of *GaN* was calculated using the density functional method. The 2D *GaN* layer was modeled using a *GaN*(0001) 2×2 supercell containing 10 *GaN* bilayers. The electron density of state and the adsorption energy of the *Ba* atom were calculated for five adsorption sites of the *Ba* atom: in the hollow position, in the bridge position between the surface *Ga* (*N*) atoms, and above the surface *Ga* (*N*) atom. There was one *Ba* atom per 4 surface *Ga* atoms in the first *GaN* bilayer. The adsorption of the barium atom above the surface *N* atom was most preferable. The adsorption energy was 2,96 eV. The adsorption of *Ba* atoms resulted in an insignificant reconstruction of the *GaN* surface: the maximum shift of the *Ga* (*N*) atoms did not exceed 0,11 Å. The adsorption of *Ba* resulted in the formation of a surface band below the Fermi level.

Keywords: *density functional method, electronic structure, interface, surface, adsorption, barium, GaN.*

Лапушкин Михаил Николаевич – к.ф.-м.н., доцент по специальности, старший научный сотрудник ФГБУН «Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН»

Mikhail N. Lapushkin – Ph. D., Docent, Senior Researcher, Ioffe Institute

Поступила в редакцию/received: 27.08.2024; после рецензирования/revised: 03.10.2024; принята/accepted 05.10.2024.