

Cs/GaN(0001) 吸附体系电子结构和光学性质研究*

杜玉杰¹⁾²⁾ 常本康^{1)†} 王晓晖¹⁾ 张俊举¹⁾ 李飙¹⁾ 付小倩¹⁾

1) (南京理工大学电子工程与光电技术学院, 南京 210094)

2) (滨州学院物理与电子科学系, 滨州 256603)

(2011年9月28日收到; 2011年10月14日收到修改稿)

采用基于第一性原理的密度泛函理论平面波超软赝势方法计算了 1/4ML Cs 原子吸附 (2×2) GaN(0001) 表面的吸附能、能带结构、电子态密度、电荷布居数、功函数和光学性质. 计算发现, 1/4ML Cs 原子在 GaN(0001) 表面最稳定吸附位为 N 桥位, 吸附后表面仍呈现为金属导电特性, Cs 原子吸附 GaN(0001) 表面后主要与表面 Ga 原子发生作用, Cs6s 态电子向最表面 Ga 原子转移, 引起表面功函数下降. 研究光学性质发现, Cs 原子吸附 GaN(0001) 表面后, 介电函数虚部、吸收谱、反射谱向低能方向移动.

关键词: 第一性原理, Cs/GaN(0001) 吸附体系, 吸附能, 电子结构

PACS: 71.55.Eq, 78.20.Ci

1 引言

GaN 是具有直接带隙宽、热导率大、击穿电压高、耐高温和化学稳定性好等特点的新型半导体材料^[1,2]. 基于负电子亲和势 (NEA) GaN 紫外光电阴极具有灵敏度高、暗发射小、发射电子能量分布集中、宽直接带隙、高量子效率发射和太阳盲响应等优点, 在平板电子印刷、紫外真空探测等领域具有重要应用价值^[3,4]. 通过典型的 Cs 或 Cs, O 激活工艺制备 NEA GaN 光电阴极激活实验方面已开展了大量研究工作^[5-8]. Machuca 等^[9]用 Cs 激活后的 GaN 光电阴极, 在 310 nm 处获得高达 50% 的量子效率; Norton 等^[10]通过对 GaN 进行钽化处理, 在 185 nm 处获得了大于 40% 的量子效率. 但对 Cs 和 GaN 表面相互机理的研究, 特别是包括密度泛函理论 (DFT) 在内的理论研究还很少, 有待进一步探讨.

本文利用第一性原理方法研究了 Cs 吸附对 (2×2) GaN(0001) 表面电子结构和光学性质的影响, 以期从电子结构层次上研究 Cs 在 ($2 \times$

2) GaN(0001) 表面的吸附位置及功函数的变化, 从而揭示 Cs 原子与 GaN 表面相互作用机理, 为进一步的实验研究提供理论参考和借鉴.

2 计算方法及模型

2.1 计算方法

文中计算工作基于 DFT 的从头算量子力学程序 CASTEP 完成^[11]. 采用的晶格常数都为实验值^[12], 采用 BFGS 算法对晶体模型进行结构优化, 将原胞中的价电子波函数用平面波基矢进行展开, 并设置平面波截断能量 $E_{\text{cut}} = 400$ eV, 迭代过程中的收敛精度为 2×10^{-6} eV/atom, 原子间相互作用力收敛标准为 0.005 eV/nm, 单原子能量的收敛标准为 1.0×10^{-5} eV/atom, 晶体内应力收敛标准为 0.05 Gpa, 原子最大位移收敛标准设为 0.0001 nm, 采用 DFT 的广义梯度近似 (GGA) 下的平面波超软赝势方法^[13,14], Brillouin 区积分采用 Monkors-Pack 形式^[15]的高对称特殊 k 点方法,

* 国家自然科学基金 (批准号: 60871012)、山东省自然科学基金 (批准号: ZR2010FL018)、山东省科学技术发展计划 (批准号: 2010GWZ20101) 和山东省高校科研发展计划 (批准号: J10LG74) 资助的课题.

† E-mail: bkchang@mail.njust.edu.cn

k 网格点设置为 $4 \times 4 \times 1$, 能量计算都在倒易空间中进行. 参与计算的价态电子为 Ga: $3d^{10}4s^24p^1$, N: $2s^22p^3$, Cs: $5s^25p^66s^1$.

2.2 计算模型

计算模型采用广泛用于各种表面计算的 slab 模型, 选用具有 12 个原子层 (6 个 Ga-N 双分子层) 厚的平板 (Slab) 模型来模拟 $(2 \times 2)\text{GaN}(0001)$ 表面, 其中允许上面 3 个双分子层自由弛豫, 对下面 3 个双分子层进行了固定. 为了避免平板间发生镜像相互作用, 沿 z 轴方向采用了厚度为 1.3 nm 的真空层, 为了防止表面电荷发生转移, 对 GaN (0001) 底部进行了假氢处理. 计算模型主要考虑 Cs 原子在 GaN (0001) 表面的五个高对称吸附位置, 即 T1 位 (Ga 顶位), H3 位 (穴位), T4 位 (N 顶位), B_{Ga} 位 (Ga 桥位) 和 B_{N} 位 (N 桥位), 其位置如图 1 所示.

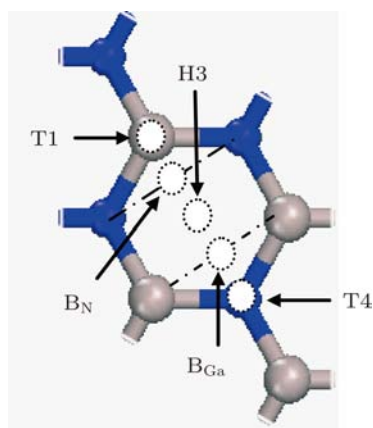


图 1 GaN(0001) 表面俯视图以及几种可能的 Cs 吸附位置

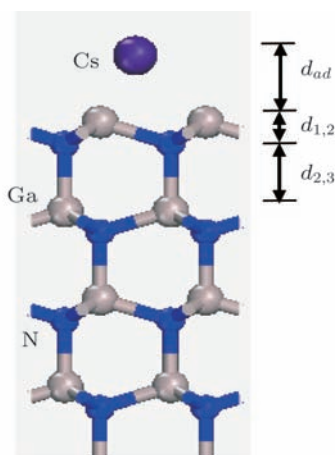


图 2 Cs/GaN(0001) 吸附体系表面透视图

3 计算结果与讨论

3.1 结构属性

首先对纤锌矿 GaN 的晶体结构进行了优化, 得到如下晶格常数: $a = b = 0.32247 \text{ nm}$, $c = 0.52537 \text{ nm}$, 这与实验值^[12] $a = b = 0.3189 \text{ nm}$, $c = 0.5185 \text{ nm}$ 符合得较好. 然后选用具有 12 个原子层 (6 个 Ga-N 双分子层) 厚的平板 (Slab) 模型来模拟 $(2 \times 2)\text{GaN}(0001)$ 表面, 优化后的几何结构参数如图 2 和表 1 所示.

表 1 吸附原子 Cs 在 GaN (0001) 表面不同吸附位置的吸附能、功函数及几何结构参数

	$d_{\text{Cs-Ga}}/\text{\AA}$	$d_{\text{ad}}/\text{\AA}$	$d_{1,2}/\text{\AA}$	$d_{2,3}/\text{\AA}$	E_{ads}/eV	ϕ/eV
Clean			0.65	2.02		4.2
			0.67 ^[17]	2.00 ^[17]		4.4 ^[18]
Cs-T1	3.4974	2.7958	0.64	2.01	1.89	2.30
Cs-H3	3.6503	3.1144	0.62	2.01	2.02	2.16
Cs-T4	3.6714	3.1368	0.64	2.01	1.96	2.37
Cs- B_{Ga}	3.8273	2.6479	0.62	2.01	1.98	2.36
Cs- B_{N}	3.6402	2.2775	0.63	2.01	2.04	2.36

d_{ad} 为 Cs 原子距离最顶层 Ga 原子质心的高度, $d_{\text{Cs-Ga}}$ 为 Cs 原子与顶层最近邻 Ga 原子成键键长, $d_{1,2}$ 为表面双分子层厚度, $d_{2,3}$ 表示第一、第二双分子层层间距.

3.2 吸附能和几何结构

表 1 计算了 1/4ML Cs 原子吸附 GaN(0001) 表面的吸附能^[16].

$$E_{\text{ads}} = -(E_{\text{Cs/GaN}(0001)} - E_{\text{GaN}(0001)} - nE_{\text{Cs}})/n, \quad (1)$$

其中, n 为吸附原子的个数, $E_{\text{GaN}(0001)}$ 和 $E_{\text{Cs/GaN}(0001)}$ 分别表示 GaN(0001) 表面无吸附和有吸附时体系的总能, $E_{\text{Cs}} = -548.9466 \text{ eV}$ 表示孤立 Cs 原子的总能. 根据定义, 若吸附能为正值, 表示吸附过程为放热过程, 则吸附是稳定的; 若吸附能为负值, 表示吸附过程为吸热过程, 则吸附是不稳定的.

计算获得 Cs 原子在 T1, H3, T4, B_{Ga} , B_{N} 五个高对称位的吸附能大小分别为 1.89, 2.02, 1.96, 1.98, 2.04 eV; T1 位吸附能最小, B_{N} 位吸附能最高, 各吸附位吸附能差别较小. Cs 原子在 GaN(0001) 面稳定的吸附位应该在 B_{N} 位和 H3 位, B_{N} 位最稳

定, 当 Cs 原子在 GaN(0001) 表面迁移时, 迁移路线为 $T1 \rightarrow T4 \rightarrow B_{Ga} \rightarrow H3 \rightarrow B_N$.

3.3 Cs/GaN(0001) 吸附体系的电子结构

Cs 原子吸附于 GaN(0001) 表面后, 由于 Cs 原子作用引起 GaN(0001) 表面重构, 与吸附前相比, GaN(0001) 双分子层厚度和层间距都略微减小, 如表 1 所示. 从吸附后 Cs 原子与顶层最近邻 Ga 原子键长 (以下简称“Cs—Ga 键长”) 来看, T1 位键长最短, 但在该位吸附能最小, 最不稳定, 这主要是由于在吸附后 Cs 原子失去电子带正电, Ga 原子虽然获得电子但仍带正电, 距离较近时它们之间存在较强的静电排斥作用, 造成该位吸附最不稳定. Cs 原子在 B_N 位和 H3 位吸附能相近, B_N 位仅比 H3 位高 0.02 eV, B_N 位 Cs—Ga 键长比 H3 位 Cs—Ga 键长短 0.001 nm, 计算获得 B_N 位 Cs—Ga 键布居为 0.08, H3 位 Cs—Ga 键布居为 -0.09, 说明在 B_N 位 Cs—Ga 键呈较弱共价键特性, 也进一步说明了 B_N 是最稳定的吸附位.

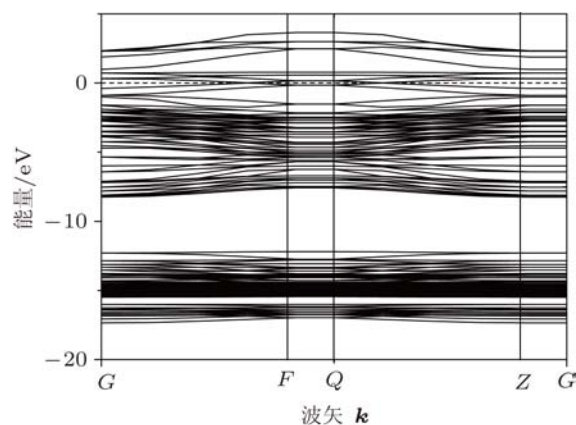


图3 GaN(0001) 清洁表面能带结构图

图 3 和图 4 分别为弛豫后 GaN(0001) 清洁表面能带结构图和态密度图 (图中虚线为 Fermi 能级). 从 GaN(0001) 清洁表面能带结构图和分波态密度图看, 价带顶主要由 N 2p 态电子、Ga 4p 态电子贡献, 导带底主要由 Ga 4s 态电子贡献, 在导带和价带间发现表面态的存在, 主要来自 Ga 4s 态电子, Ga 4p 态电子和少量 N 2p 态电子的贡献, GaN(0001) 表面呈现金属导电特性.

图 5 和图 6 分别给出了吸附 B_N 位 Cs/GaN(0001) 吸附体系的能带结构图和分波态密度图 (图

中虚线为 Fermi 能级). 与吸附前相比变化不大, 价带顶仍由 N 2p 态电子, Ga 4p 态电子贡献, 但导带底除由 Ga 4s 态电子贡献外还有 Cs 6s 态电子的贡献; 在导带和价带间发现表面态的存在, 表面态除了来自 Ga 4s 态电子, Ga 4p 态电子和少量 N 2p 态电子的贡献外, Cs 6s 态电子也参与贡献, 表面仍呈现为金属导电特性, 但导带宽度变窄并向低能方向移动. 在 -10.52 eV 和 -23.69 eV 处产生了两个深能级, 主要来自 Cs 5s 态电子和 Cs 5p 态电子的贡献.

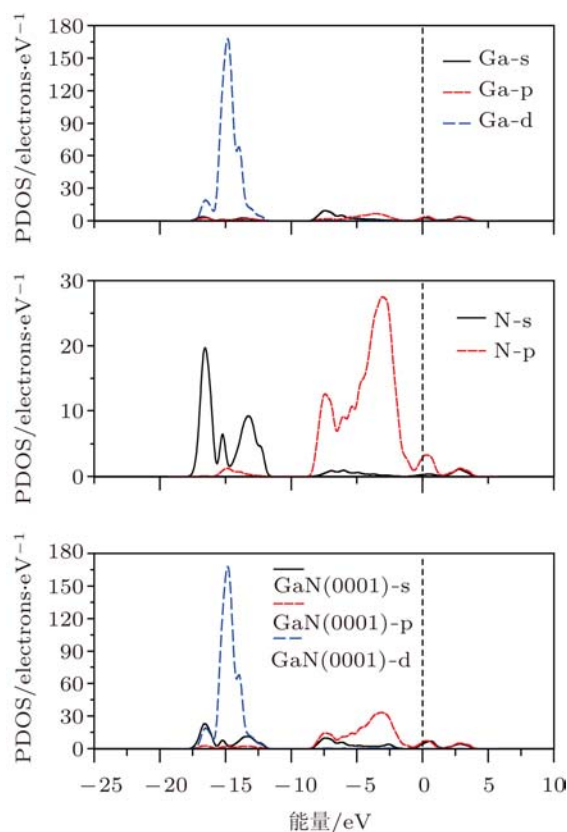


图4 GaN(0001) 清洁表面分波态密度图

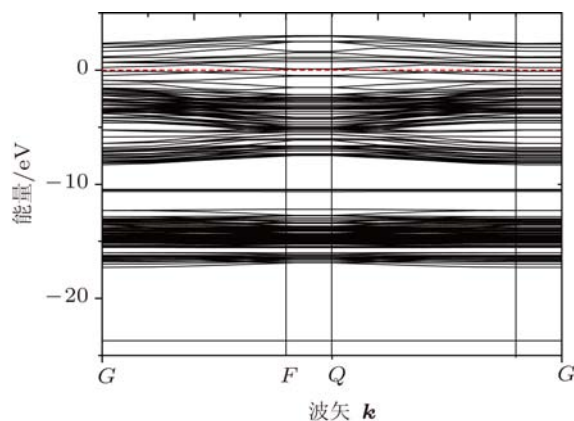


图5 Cs/GaN(0001) 吸附体系能带结构图

另外, 比较吸附前后的能带结构和态密度图发现, 吸附后 Fermi 能级处态密度峰下降 (电子数由吸附前的 9.2 降为 6.8), 主要是由于 Cs 6s 轨道, Cs 5p 轨道与 Ga 4p 轨道的耦合、杂化, Cs 6s 轨道电子向 Ga 4p 轨道进行了电子转移, 使得最表面 Ga 原子部分悬挂键被饱和, 致使 Fermi 能级处态密度峰下降. 由于 Cs 5p 态电子的介入, 受 Cs 5p 轨道和 Ga 4s 轨道耦合、杂化的影响, 吸附体系导带宽度变窄并向低能方向移动, 同时也对表面态产生微弱影响.

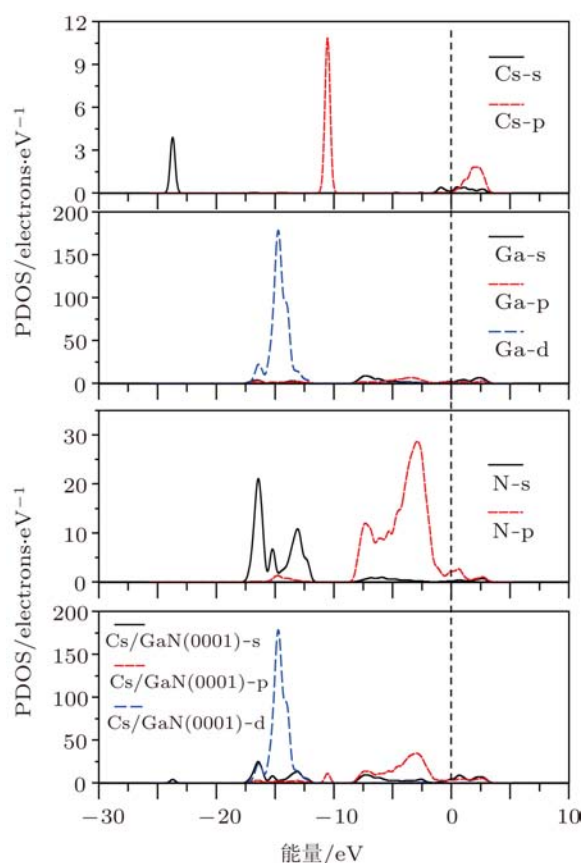


图 6 Cs/GaN(0001) 吸附体系分波态密度图

3.4 Mulliken 电荷布局分析

Cs 原子吸附在 GaN(0001) 表面, 必然引起表面原子间电荷的转移和电子结构的变化, 因此, 可以通过 Cs 原子吸附 GaN(0001) 表面前后电荷布局数的变化情况进一步分析 Cs 原子与 GaN(0001) 表面相互作用的信息. 下面分析最稳定吸附位 N 桥位在吸附前后电荷布居数变化情况.

表 2 给出了 Cs 原子吸附 GaN(0001) 表面前后电荷布居数变化情况, 其中, 表中电荷布居数为该

层 Ga 原子, N 原子电荷布居数的平均值. 从表 2 来看, 第一层 Ga 原子电荷布居数变化较大, 第二层到第六层 Ga 原子电荷布居数变化甚微, 从第一层到第六层 N 原子电荷布居数基本没有变化. 通过分析 Cs 原子吸附前后电荷布居数变化情况可知 Cs 原子主要与第一层 Ga 原子相互作用. 通过进一步分析第一层四个 Ga 原子电荷布居变化情况来看, Cs 原子外层电子只向表面部分 Ga 原子进行了电荷转移, 部分 Ga 原子并未获得电子, 也就是说第一层 Ga 原子部分悬挂键被饱和, 这也是 Cs 原子吸附 GaN(0001) 表面后表面态仍然存在的原因, 与以上能带结构和分波态密度分析结果一致.

表 2 Cs 原子在 N 桥位吸附前后的电荷布居数

原子层	原子	吸附前	吸附后
第一层	Cs		0.71
	Ga	0.75	0.65
第二层	N	-0.98	-0.98
	Ga	0.86	0.84
第三层	N	-1.01	-1.01
	Ga	1.16	1.16
第四层	N	-1.01	-1.01
	Ga	1.07	1.04
第五层	N	-1.01	-1.01
	Ga	1.11	1.13
第六层	N	-1.01	-1.01
	Ga	0.91	0.88
	N	-0.87	-0.87

3.5 吸附诱导功函数的变化

对半导体而言, 功函数是把半导体底部的电子逸出体外所需要的最小能量, 其表达式为^[18]

$$\Phi = E_{\text{vac}} - E_{\text{F}}, \quad (2)$$

其中 E_{vac} 表示真空能级, E_{F} 为体系的 Fermi 能级.

我们计算了 GaN(0001) 面的功函数为 4.2 eV, 与实验值 (4.0 ± 0.2) eV 符合较好^[19], 与文献 [18] 的计算结果 4.42 eV 接近.

Cs 原子吸附 GaN(0001) 表面后功函数降低, T1, H3, T4, B_{Ga} , B_{N} 位的功函数变化量分别为 1.90, 2.04, 1.83, 1.84, 1.85 eV, 其中 H3 位功函数变化最大, T4 位功函数变化最小. 功函数降低的主要原因是由于 Cs 原子电负性较小 (0.79), Ga 原子电负性较高 (1.81), Cs 原子与 Ga 原子相互作用后 Cs 原子

失电子, Ga 原子得电子. 计算发现, Cs 6s 态电子向吸附物表面部分 Ga 原子进行了转移, 形成了偶极矩, 由于偶极矩的存在降低了衬底表面的功函数, 与实验结果一致 [19]. 另外, GaN 表面功函数的变化还与其表面结构变化、电荷转移量等因素有关.

3.6 光学性质

对于光与固体相互作用通常采用绝热近似和单电子近似的方法. 因为声子频率远小于电子在带间和带内跃迁频率, 采用单电子近似可忽略声子的间接跃迁, 仅考虑电子激发. 如果固体对光波的作用为线性响应, 固体宏观光学响应函数通常可以由光的复介电函数 $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$ 或复折射率 $N(\omega) = n(\omega) + ik(\omega)$ 来描述, 其中

$$\epsilon_1 = n^2 - k^2, \quad (3)$$

$$\epsilon_2 = 2nk. \quad (4)$$

晶体介电函数的虚部和实部、吸收系数、反射率、复光电导率等可以根据直接跃迁概率的定义和 Kramers-Kronig 关系推导出, 具体推导过程不再赘述. 这里只列出所依据的理论公式 [20--22]:

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{\pi}{\epsilon_0} \left(\frac{e}{m\omega} \right)^2 \cdot \sum_{V,C} \left\{ \int_{BZ} \frac{2dK}{(2\pi)^2} |a \cdot M_{V,C}|^2 \times \delta[E_C(K) - E_V(K) - \hbar\omega] \right\}, \quad (5)$$

$$\epsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2e}{\epsilon_0 m^2} \cdot \sum_{V,C} \int_{BZ} \frac{2dK}{(2\pi)^2} \times \frac{|a \cdot M_{V,C}(K)|^2}{[E_C(K) - E_V(K)]/\hbar} \times \frac{1}{[E_C(K) - E_V(K)]^2/\hbar^2 - \omega^2}, \quad (6)$$

$$\alpha \equiv \frac{2\omega k}{c} = \frac{4\pi k}{\lambda_0}, \quad (7)$$

$$R(\omega) = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2}, \quad (8)$$

其中 n 为折射率, k 为消光系数, ϵ_0 为真空中的介电常数, λ_0 为真空中光的波长, C 和 V 分别为导带和价带, BZ 为第一 Brillouin 区, K 为电子波矢, a 为矢量势 A 的单位方向矢量, $M_{V,C}$ 为跃迁矩阵元, ω 为角频率, $E_C(K)$ 和 $E_V(K)$ 分别为导带和价带上的本征能级. 以上关系是分析晶体能带结构和光学性质的理论依据, 它反映了能级间电子跃迁所产生光谱的机理.

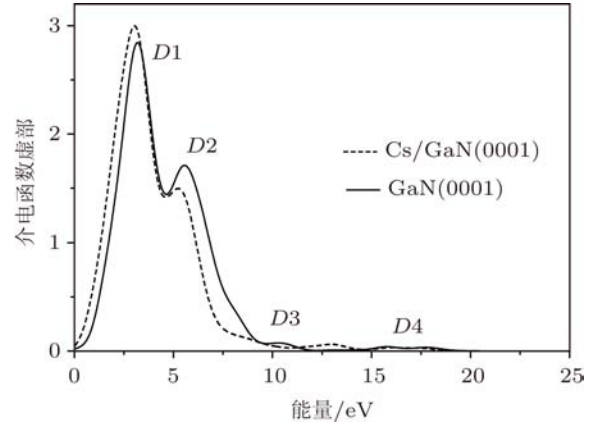


图7 Cs/GaN(0001) 吸附体系介电函数虚部

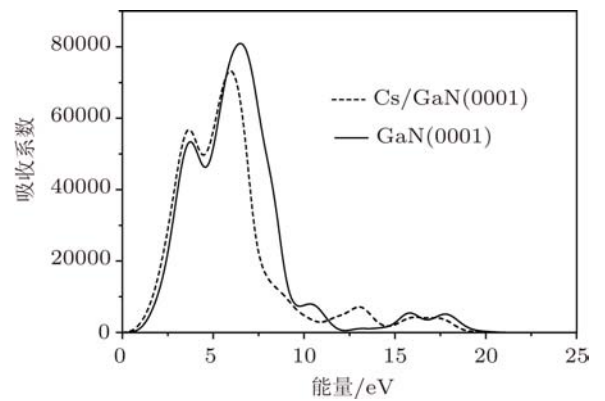


图8 Cs/GaN(0001) 吸附体系吸收谱

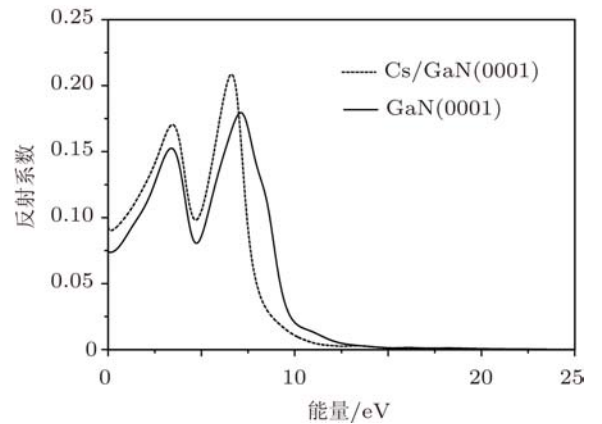


图9 Cs/GaN(0001) 吸附体系反射谱

介电函数作为沟通带间跃迁微观物理过程与固体电子结构的桥梁, 反映了固体能带结构及其他各种光谱信息 [22]. GaN 作为半导体材料, 其光谱是由能级间电子跃迁所产生的, 各个介电峰可以通过 GaN 的能带结构和态密度来解释. 图 7 为清洁 GaN (0001) 表面及其吸附 Cs 原子后的介电函数虚部与能量间的关系图. 从图 7 来看, 清

洁 GaN(0001) 表面介电函数虚部出现了四个介电峰 D_1, D_2, D_3, D_4 . 其中 D_1 峰来自 N 2p 态 (上价带) 到 Ga 4s 态的跃迁, D_2 峰是由 N 2p 态 (下价带) 到 Ga 4s 态的跃迁, D_3 峰是由 Ga 2p 态到 N 2p 态的跃迁, D_4 峰是由 Ga 3d 态到 N 2p 态的跃迁. Cs 吸附以后, 介电函数虚部向低能方向移动, D_3 峰消失, 主要是由于 Cs 原子吸附后 Cs 5p 轨道和 Ga 4s 轨道耦合、杂化, 吸附体系导带宽度变窄并向低能方向移动引起的. 同时, Cs 吸附引起 GaN (0001) 表面结构的改变也是原因之一.

图 8 和图 9 为 Cs 吸附前后 GaN(0001) 表面吸收谱、反射谱随能量变化情况, 与以上分析介电峰情况相似, 吸附后吸收谱、反射谱向低能方向移动, 峰值位置及其变化情况与介电峰峰值位置及变化基本一致.

4 结论

采用基于第一性原理的密度泛函理论平面波超软赝势方法计算了 Cs/GaN(0001) 吸附体系的吸附能、能带结构、电子态密度、电荷布居数、功函数和光学性质. 计算了 Cs 原子在 T1, H3, T4, B_{Ga}, B_N 五个高对称位的吸附能, N 桥位为其稳定吸附位, T1 位最不稳定. 比较吸附前后的能带结构和态密度图发现, 吸附后 Fermi 能级处态密度峰下降, 表面仍呈现为金属导电特性. Cs 原子吸附 GaN(0001) 表面后主要与表面 Ga 原子发生作用, Cs 6s 态电子向表面 Ga 原子转移, 引起表面功函数下降. 研究光学性质发现, Cs 原子吸附 GaN(0001) 表面后, 介电函数虚部、吸收谱、反射谱向低能方向移动.

- [1] Li B, Chang B K, Xu Y, Du X Q, Du Y J, Wang X H, Zhang J J 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 088503 (in Chinese) [李飙, 常本康, 徐源, 杜晓晴, 杜玉杰, 王晓晖, 张俊举 2011 物理学报 **60** 088503]
- [2] Li Y H, Pan H B, Xu P S 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 317 (in Chinese) [李拥华, 潘海滨, 徐彭寿 2005 物理学报 **54** 317]
- [3] Fu X Q, Chang B K, Li B, Wang X H, Qiao J L 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 038503 (in Chinese) [付小倩, 常本康, 李飙, 王晓晖, 乔建良 2011 物理学报 **60** 038503]
- [4] Machuca F, Liu Z, Maldonado J R, Coyle S T, Pianetta P, Pease R F W 2004 *J. Vac. Sci. Technol. B* **22** 3565
- [5] Wang X H, Chang B K, Du Y J, Qiao J L 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 042102
- [6] Wang X H, Chang B K, Ling R, Gao P 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 082109
- [7] Liu Z, Machuca F, Pianetta P 2004 *Appl. Phys. Lett.* **85** 1541
- [8] Fu X Q, Chang B K, Wang X H, Li B, Du Y J, Zhang J J 2011 *Chin. Phys. B* **20** 037902
- [9] Machuca F, Sun Y, Liu Z, Loakeimidi K, Pianetta P, Pease R F W 2000 *J. Vac. Sci. Technol. B* **18** 3042
- [10] Norton T, Woodgate B, Stock J, Hilton G, Ulmer M, Aslam S, Vispute R D 2003 *SPIE* **5164** 155
- [11] Probert M J, Pickard C J, Hasnip P J, Clark S J, Payne M C 2002 *Condens Matter* **14** 2717
- [12] Perlín P, Jaubertie-carillon C, Itie J P, San Miguel A, Grzegory I, Polian A 1992 *Phys. Rev. B* **45** 83
- [13] Perdew J P, Zunger A 1981 *Phys. Rev. B* **23** 5048
- [14] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [15] Monkhorst H J, Pack J D 1976 *Phys. Rev. B* **13** 5188
- [16] Xu G G, Wu Q Y, Zhang J M, Chen Z G, Huang Z G 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 1924 (in Chinese) [许桂贵, 吴青云, 张健敏, 陈志高, 黄志高 2009 物理学报 **58** 1924]
- [17] González-Hernández R, López W, Ortega C, Moreno-Armentad M G, Rodríguez J A 2010 *Appl. Surf. Sci.* **256** 6495
- [18] Rosa A L, Neugebauer J 2006 *Phys. Rev. B* **73** 205346
- [19] Kampen T U, Eyckeler M, Mönch W 1998 *Appl. Surf. Sci.* **123** 28
- [20] Fang R C 2001 *Spectroscopy of Solid* (Hefei: China University of Science and Technology Press) (in Chinese) [方容川 2001 固体光谱学 (合肥: 中国科学技术大学出版社)]
- [21] Shen X C 2002 *The Spectrum and Optical Property of Semiconductor* (Beijing: Science Press) (in Chinese) [沈学础 2002 半导体光谱和光学性质 (第二版)(北京: 科学出版社)]
- [22] Chen Q, Xie Q, Yan W J 2008 *Science in China G* **38** 825 (in Chinese) [陈茜, 谢泉, 闫万珺 2008 中国科学 G 辑 **38** 825]

Electronic structure and optical properties of Cs/GaN(0001) adsorption system*

Du Yu-Jie¹⁾²⁾ Chang Ben-Kang^{1)†} Wang Xiao-Hui¹⁾ Zhang Jun-Ju¹⁾
Li Biao¹⁾ Fu Xiao-Qian¹⁾

1) (*Institute of Electronic Engineering and Opto-Electric Technology, Nanjing University of Science and Technology, Nanjing 210094, China*)

2) (*Department of Physics, Institute of Binzhou, Binzhou 256603, China*)

(Received 28 September 2011; revised manuscript received 14 October 2011)

Abstract

We employ first-principles to calculate the adsorption energy, the band structure, the density of states, the charge populations, the work function and the optical properties of 1/4ML Cs adsorption on (2×2) GaN(0001) surface using the density-functional theory within a plane-wave ultrasoft pseudopotential scheme. The results show that the most stable position of Cs adatom on GaN(0001) surface is at the bridge site of N atoms for 1/4 coverage. The surface of GaN(0001) shows still metallic character after adsorption. Cs adatom affects mainly Ga atoms at surface. The transfer of Cs6s state electrons to Ga atoms at outmost layer leads to the decrease of work function. By analysis of optical properties, we can see imaginary part of dielectric function, absorption spectrum and reflected spectrum shift toward low energy after Cs adsorption.

Keywords: first-principles, Cs/GaN(0001) adsorption system, adsorption energy, electronic structure

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 60871012), the Natural Science Foundation of Shandong Province, China (Grant No. ZR201FL018), the Science and Technology Development Program of Shandong Province, China (Grant No. 2010GWZ20101), and the Central Universities Research Funds of Shandong Province, China (Grant No. J10LG74).

† E-mail: bkchang@mail.njust.edu.cn