

GaN(0001) 表面电子结构和光学性质的第一性原理研究*

杜玉杰^{1)2)†} 常本康²⁾ 张俊举²⁾ 李飙²⁾ 王晓晖²⁾

1) (滨州学院物理与电子科学系, 滨州 256603)

2) (南京理工大学电子工程与光电技术学院, 南京 210094)

(2011年5月5日收到; 2011年12月5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 (2×2) GaN(0001) 清洁表面的能带结构、态密度、表面能、功函数和光学性质. 发现弛豫后 GaN(0001) 表面的能带结构发生较大变化, 表面呈现金属导电特性, 导带底附近存在明显的表面态, 在偶极矩的作用下表面电荷发生转移, Ga 端面为正极性表面; 计算获得了 GaN(0001) 表面的表面能和功函数分别为 $2.1 \text{ J}\cdot\text{m}^{-2}$ 和 4.2 eV ; 比较分析了 GaN(0001) 表面和体相 GaN 的光学性质, 发现两者存在较大差异.

关键词: GaN(0001) 表面, 电子结构, 光学性质, 功函数

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], 在蓝光发光二极管、蓝光激光器和紫外探测器等光电子器件领域有着广阔的应用前景^[3,4]. 在 GaN(0001) 表面通过 Cs, O 激活工艺降低材料表面功函数可以获得负电子亲和势 (negative electron affinity, 简记为 NEA) 状态已被大量的实验证实^[5-7], 并已用于 NEA GaN 紫外光电阴极的制备^[8-10]. 由于 NEA GaN 紫外光电阴极具有灵敏度高、发射电子能量分布集中、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^[11,12], 近年来备受关注. 尽管对 NEA GaN 光电阴极激活实验方面已进行了大量的实验研究^[13,14], 但对 GaN(0001) 表面电子结构和光学性质的研究还有待深入. 进一步探讨 GaN(0001) 表面电子结构、表面极性、表面能、功函数和光学性质对提高 GaN 光电阴极激活工艺并了解其光电发射机理具有十分重要

要的意义.

本文利用基于密度泛函理论 (density functional theory, 简记为 DFT) 的第一性原理平面波超软赝势方法, 计算并分析了 GaN(0001) 表面的能带结构、态密度 (DOS)、光学性质、表面能和功函数, 为 GaN 光电器件实验研究提供理论参考和借鉴.

2 理论模型及计算方法

2.1 理论模型

体相 GaN 晶体是六方纤锌矿结构, 属于 $P63mc$ 空间群, 对称性为 C_{6v-4} , 晶格常数 $a = b = 0.3189 \text{ nm}$, $c = 0.5185 \text{ nm}$ ^[15], $\alpha = \beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$. 其中 c/a 为 1.626, 比理想的六角密堆积结构的 1.633 稍小, 其晶胞由 Ga 的六角密堆积和 N 的六角密堆积反向套构而成. GaN 原胞包括 2 个 Ga 原子和 2 个 N 原子. 本文计算采用 8 个原胞组成的超晶胞 (图 1), 再对体相超晶胞做切面得到 (2×2) GaN(0001) 表面模型 (图 2).

* 国家自然科学基金 (批准号: 60871012, 61171042)、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) 和山东省高校科技发展计划 (批准号: J10LG74) 资助的课题.

† E-mail: dyj@bzu.edu.cn

(2 × 2)GaN(0001) 表面计算模型采用平板 (Slab) 模型, 选用具有 6 个 Ga-N 双分子层厚的平板 (Slab) 模型来模拟 GaN(0001) 表面, 其中允许上面 3 个双分子层自由弛豫, 对下面 3 个双分子层进行固定来模拟大块 GaN 的固体环境. 为了避免平板间发生镜像相互作用, 沿 z 轴方向采用厚度为 1.5 nm 的真空层; 为了防止表面电荷发生转移, 对 GaN(0001) 面底部用 H 原子进行钝化处理.

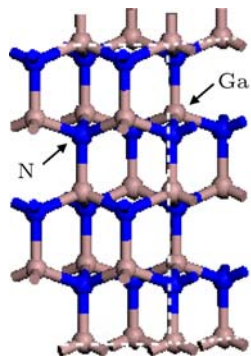


图 1 体相 GaN 晶胞侧视图

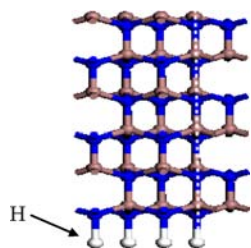


图 2 (2 × 2) GaN(0001) 表面体系透视图

2.2 计算方法

计算基于 DFT 的从头算量子力学程序 CASTEP (Cambridge Serial Total Energy Package) 完成 [16]. 将原胞中的价电子波函数用平面波基矢进行展开, 计算采用 DFT 的广义梯度近似 (generalized gradient approximation, 简记为 GGA) 下的平面波赝势方法 [17,18], 模型结构优化采用 BFGS (Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno) 算法. 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, 晶体内应力收敛标准为 0.05 GPa, 单原子能量的收敛标准为 1.0×10^{-5} eV/atom, 原子最大位移收敛标准设为 0.0001 nm. Brillouin 区积分采用 Monkhor-Pack 形式 [19] 的高对称特殊 k 点方法, 对布里渊区的 k 点和平面波截止能量进行了一系列的测

试计算. GaN 体相的总能计算中 k 网格点设置为 $9 \times 9 \times 9$, GaN(0001) 表面模型计算中 k 网格点设置为 $4 \times 4 \times 1$. 平面波截断能量 $E_{\text{cut}} = 400$ eV, 能量计算都在倒易空间中进行. 发现这些设定足以保证计算的精确度, 参与计算的价态电子为 Ga: $3d^{10}4s^24p^1$, N: $2s^22p^3$, 文中对光学性质计算采用了剪刀符修正.

3 计算结果与讨论

3.1 体相 GaN 计算结果与分析

为了便于和 GaN(0001) 表面进行比较, 首先对体相 GaN 晶体进行几何优化, 优化后得到的理论晶胞参数 $a = b = 0.3225$ nm, $c = 0.5224$ nm, 与实验值 [15] 符合得较好, 误差在 0.43%—1.13%, 说明计算方法的可靠性.

图 3 为体相 GaN 晶体的能带结构, 其中虚线代表费米能级. 从能带图可以看出, 体相 GaN 晶体的导带底和价带顶均位于布里渊区的 G 点处, 是直接带隙半导体. 计算所得的带隙值 $E_g = 1.66$ eV, 与柯福顺等 [20] 的计算结果 1.65 eV 一致, 但较实验值 $E_g = 3.39$ eV 偏低. 这主要是由于广义梯度近似和局域密度近似都存在带隙计算值偏低的普遍性问题 [21], 但这并不影响对 GaN 电子结构的理论分析.

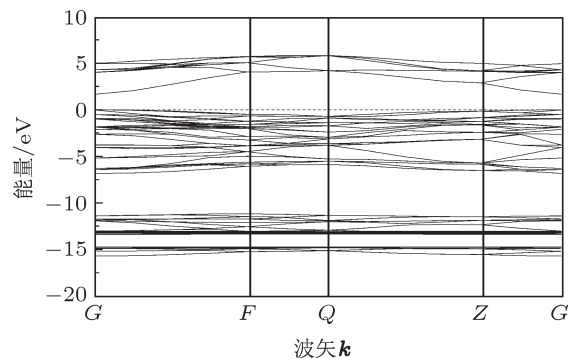


图 3 GaN 能带结构图

图 4 为计算得到的 GaN 总态密度和 Ga, N 分波态密度. 从态密度图可以看出, GaN 的价带由 -16.5 eV 到 -10.3 eV 的下价带和 -7.4 eV 到 0 eV 的上价带组成. 下价带主要由 Ga 3d 态电子和 N 2s 态电子构成, 上价带主要由 N 2p 态电子和 Ga 4s 态电子贡献, 而且价带顶由 N 2p 态电子决定. 导带部分主要由 Ga 4s 态电子, Ga 4p 态电

子和少量 N 2p 态电子决定. 因此, GaN 价带主要由 Ga 3d 态, N 2s 态和 N 2p 态电子构成, 导带主要由 Ga 4s 态和 Ga 4p 态电子构成.

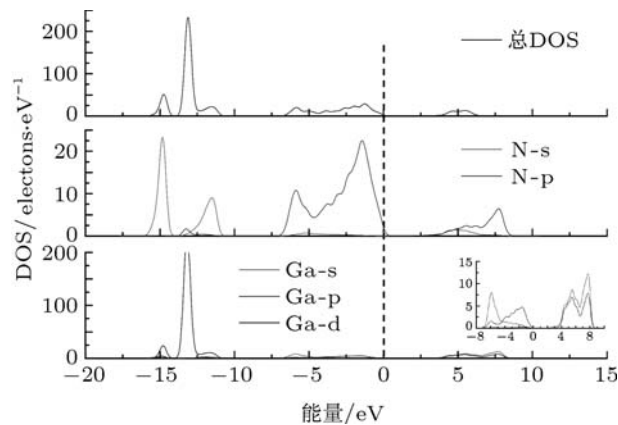


图 4 GaN 总态密度及分波态密度图

3.2 GaN(0001) 表面结构弛豫

计算了 (2 × 2) GaN(0001) 清洁表面的性质. 清洁表面在一般情况下只发生弛豫, 不发生重构, 即表面层及附近的原子只在垂直表面的方向上移动. 利用 BFGS 方法进行优化, 分别得到了 GaN(0001) 表面双分子层的厚度和双分子层与层之间的间距, 如表 1 和表 2 所示. 弛豫后最表面双分子层厚度较体相材料双分子层厚度增加了 0.85%, 与徐彭寿等 [22] 根据实验拟合结果 0.5% 基本一致. 次表面双分子层厚度和再次表面双分子层厚度较体相材料双分子层厚度分别压缩了 1.99%, 2.18%, 弛豫对表面双分子层厚度影响较小. 最表面双分子层间距较 GaN 体相材料双分子层间距向外略有扩张, 扩张幅度大约是体相材料双分子层间距的 2.2%.

表 1 弛豫后 GaN(0001) 表面双分子层厚度及变化情况

双分子层厚及变化	D1/nm	D2/nm	D3/nm	ΔD1/%	ΔD2/%	ΔD3/%
弛豫后	0.0653	0.0635	0.0633	+0.85	-1.99	-2.18

注: D1, D2, D3 分别为第一、二、三双分子层厚度, ΔD1, ΔD2, ΔD3 为弛豫前后双分子层厚度变化量百分比 (弛豫前双分子层厚度为 0.0647 nm), “+” 值表示扩张, “-” 号表示压缩.

表 2 弛豫后 GaN(0001) 表面双分子层层间距及变化情况

表面层层间距及变化	d ₁₂ /nm	d ₂₃ /nm	d ₃₄ /nm	Δd ₁₂ /%	Δd ₂₃ /%	Δd ₃₄ /%
弛豫后	0.2023	0.1995	0.1992	+2.20	+0.81	+0.63

注: d₁₂, d₂₃, d₃₄ 分别为第一与第二双分子层、第二与第三双分子层、第三与第四双分子层层间距, Δd₁₂, Δd₂₃, Δd₃₄ 为弛豫前后双分子层层间距变化量百分比 (弛豫前双分子层间距为 0.1979 nm), “+” 值表示扩张, “-” 号表示压缩.

次表面双分子层间距和再次表面双分子层间距变化幅度为 GaN 体相材料中双分子层间距的 0.81%, 0.63%, 越来越接近体材料.

3.3 GaN(0001) 面的表面能及功函数

表面能是指建立一个新表面所需要消耗的额外能量, 表面能的存在使得材料表面易于吸附其他物质, 它的大小在某种意义上反映了表面的稳定性. 在计算 GaN(0001) 面总能的基础上, 计算了 GaN(0001) 面的表面能 [23]

$$\sigma = (E_{\text{Slab}} - nE_{\text{bulk}})/2A, \quad (1)$$

其中 E_{Slab} 为 GaN(0001) 面弛豫后的总能量, E_{bulk} 为体相 GaN 材料中每个 GaN 分子的平均能量, n 是表面模型中含有的 GaN 分子的数量, A 是层晶原胞的面积 (由于存在两个表面, 所以表面积为 2A). 计算获得 GaN(0001) 面的表面能为 2.1 J·m⁻², 表明 GaN(0001) 表面易于吸附其他物质, 表面稳定性较好.

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 [24]

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

其中 E_{vac} 表示真空能级, E_F 为体系的费米能级.

我们计算了 GaN(0001) 表面的功函数为 4.2 eV, 与实验值 4.0 ± 0.2 eV 完全符合 [25], 与文献 [24] 计算结果 4.42 eV 基本一致. 体相 GaN 的实验带隙宽度为 3.39 eV, 碱金属原子 (如 Cs) 吸附于 GaN(0001) 表面后容易诱导负电子亲和势特性, 这对 NEA GaN 光电阴极实验研究具有重要意义.

3.4 GaN(0001) 面的能带结构及态密度

图 5 给出了弛豫后 GaN(0001) 清洁表面的能带结构图, 其中虚线代表费米能级. 与体相 GaN 能带结构相比, 发生了较大变化. 由于表面的存在, 在价带顶和导带底出现了一个新能级. 较宽的新能级说明了处于这个新能级中的电子有效质量较小, 非局域性较强, 有利于电子在表面的扩展. GaN(0001) 表面的导电能力较强, 呈现金属导电特性.

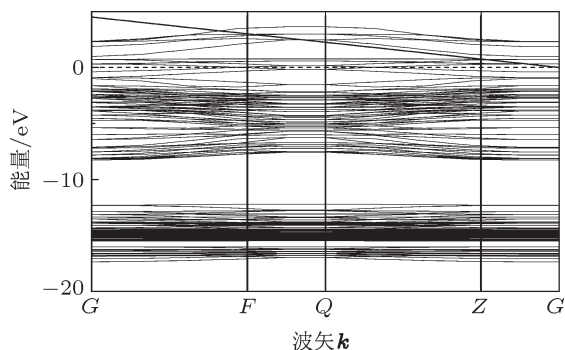


图 5 GaN(0001) 表面能带结构图

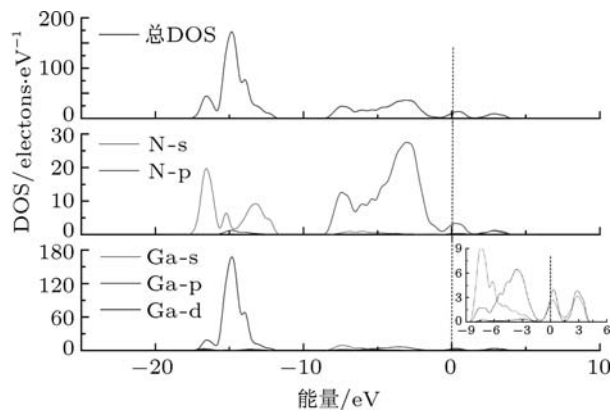


图 6 GaN(0001) 面总态密度及分波态密度图

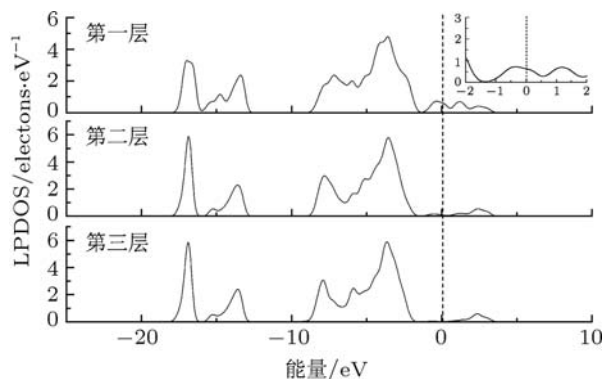


图 7 N 原子分层态密度图

图 6 给出了弛豫后 GaN(0001) 清洁表面的态密度图, 其中虚线代表费米能级. 价带顶主要 N 2p 态电子的贡献, 导带底主要由 Ga 4s 态电子贡献, 另外发现在导带底附近存在明显的表面态 (费米能级处出现了一尖峰). 图 7 和图 8 分别给出了清洁 GaN(0001) 表面第一层、第二层、第三层 GaN 双分子层中 N 原子和 Ga 原子的分层态密度图 (LPDOS). 导带底附近表面态主要由第一层 Ga-N 双分子层贡献, 第二层、第三层 Ga-N 双分子层贡献较小. 第一层 Ga-N 双分子层主要由 Ga 4s 态电子, Ga 4p 态电子和少量 N 2p 态电子贡献.

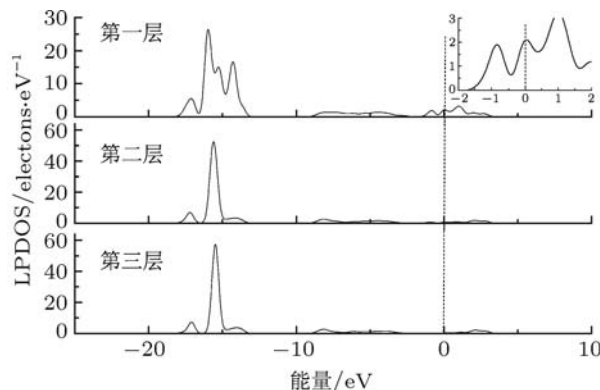


图 8 Ga 原子分层态密度图

3.5 GaN(0001) 表面电荷集居分析

由于 GaN(0001) 表面 Ga, N 原子层交替出现, 随着原子层厚度增加会出现一个偶极矩. 在偶极矩的作用下 GaN(0001) 表面变得不稳定, 负电荷由体内向表面转移, 在 Ga 端面形成表面态, 这与以上态密度分析结果一致. 通过电荷集居分析发现, Ga 端面电荷弛豫后变为原来的 $3/4(0.75|e|)$, 为正极性表面. 表面电荷转移达到消除偶极矩而稳定表面的目的, 这一结果与 Olga Dulub 报道的 ZnO 极性表面的电荷变化情况完全相似 [26], 也进一步说明了 GaN(0001) 表面是比较稳定的.

3.6 GaN(0001) 表面光学性质

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的跃迁频率, 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

$$\varepsilon_1 = n^2 - k^2, \quad (3)$$

$$\varepsilon_2 = 2nk. \quad (4)$$

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 [27-29]:

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{\pi}{\varepsilon_0} \left(\frac{e}{m\omega} \right)^2 \cdot \sum_{V,C} \left\{ \int_{BZ} \frac{2d\mathbf{K}}{(2\pi)^2} |a \cdot M_{V,C}|^2 \times \delta[E_C(\mathbf{K}) - E_V(\mathbf{K}) - \hbar\omega] \right\}, \quad (5)$$

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2e}{\varepsilon_0 m^2} \cdot \sum_{V,C} \int_{BZ} \frac{2d\mathbf{K}}{(2\pi)^2} \times \frac{|a \cdot M_{V,C}(\mathbf{K})|^2}{[E_C(\mathbf{K}) - E_V(\mathbf{K})]/\hbar} \times \frac{1}{[E_C(\mathbf{K}) - E_V(\mathbf{K})]^2/\hbar^2 - \omega^2}, \quad (6)$$

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

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 为第一布里渊区, \mathbf{K} 为电子波矢, a 为矢量势 \mathbf{A} 的单位方向矢量, $M_{V,C}$ 为跃迁矩阵元, ω 为角频率, $E_C(\mathbf{K})$ 和 $E_V(\mathbf{K})$ 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 9 给出了 GaN 体相材料 (图中实线) 和 GaN(0001) 表面 (图中虚线) 的光吸收系数随能量变化的曲线, 光吸收系数表示光波在介质中单位传播距离光强度衰减的百分比.

比较发现, GaN(0001) 表面的光吸收系数较 GaN 体材料的光吸收系数整体偏低, 带边吸收向低能方向移动, GaN 体材料光吸收系数的峰值位置为 4.4968 eV, 9.5264 eV (最大峰), 13.0121 eV, 19.8388 eV. GaN(0001) 表面光吸收系数的峰值位置为 5.4039 ($D1$ 峰), 8.1649 eV ($D2$ 峰, 最大峰), 12.0328 eV ($D3$ 峰), 17.5432 eV ($D4$ 峰), 其中, $D1$ 峰是由 N 2p 态 (上价带) 到 Ga 4s 态的跃迁, $D2$ 峰是由 N 2p 态 (下价带) 到 Ga 4s 态的跃迁, $D3$ 峰是由 G 2p 态到 N 2p 态的跃迁, $D4$ 峰是由 G 3d 态到 N 2p 态的跃迁. 与体材料相比最大峰位置向低能方向移动了 1.3615 eV, 其他峰值位置也略微向

低能方向移动, 峰值位置发生变化的主要原因是由于 GaN(0001) 表面弛豫后引起表面结构变化造成的.

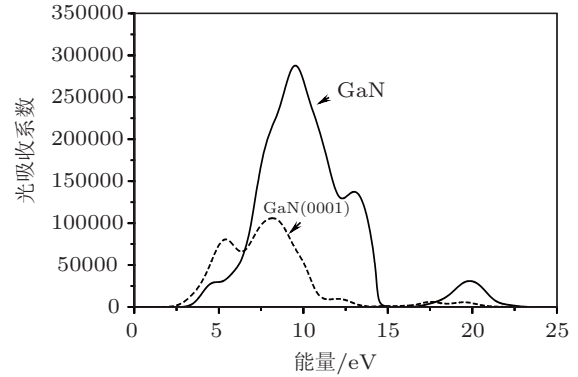


图 9 GaN 和 GaN(0001) 面光吸收系数

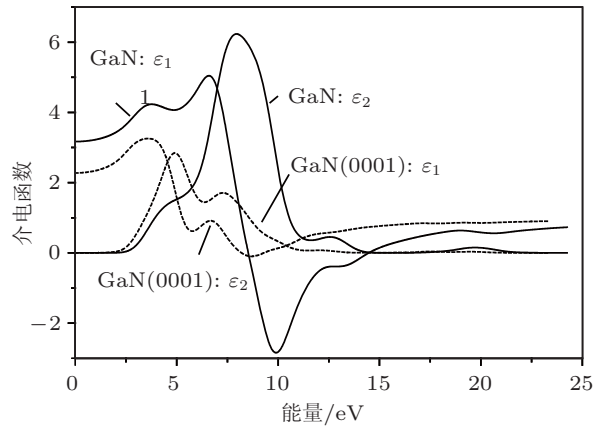


图 10 GaN 和 GaN(0001) 面介电函数

图 10 给出了 GaN 体材料 (图中实线) 和 GaN(0001) 表面 (图中虚线) 的复介电函数实部 $\varepsilon_1(\omega)$ 和虚部 $\varepsilon_2(\omega)$ 随光子能量变化的曲线图. 无论是复介电函数的实部还是虚部幅度都明显下降, 虚部 $\varepsilon_2(\omega)$ 随光子能量变化趋势及峰值位置与光吸收系数的变化趋势基本一致, GaN(0001) 表面静态介电常数与 GaN 体材料静态介电常数相比明显减小.

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 (2×2) GaN(0001) 清洁表面的能带结构、态密度、表面能、功函数和光学性质. 研究发现, GaN(0001) 表面弛豫后能带结构发生较大变化, 表面呈金属导电特性, 导带底附近存在

明显的表面态,主要来自 Ga 4s 态电子贡献. 通过电荷集居分析发现,在偶极矩作用下表面电荷发生转移达到消除偶极矩而稳定表面的目的. GaN(0001) 表面的表面能和功函数计算结果表明, GaN(0001) 表面易于吸附其他物质,表面稳定性较好,碱金属

原子吸附于 GaN(0001) 表面后容易诱导负电子亲和势特性. 比较了 GaN(0001) 表面和体相 GaN 的光学性质,发现两者存在较大差异,表面弛豫引起表面结构变化是其主要原因.

- [1] 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]
- [2] Toru A, Daisuke A, Kohji N, Tomonori I 2010 *Phys. Rev. B* **81** 245317
- [3] Rafael G H, William L, César O, María G M A, Jairo A R 2010 *Appl. Surf. Sci.* **256** 6495
- [4] Li Y H, Xu P S, Pan H B, Xu F Q, Xie C K 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 317 (in Chinese) [李拥华, 徐彭寿, 潘海滨, 徐法强, 谢长坤 2005 物理学报 **54** 317]
- [5] Wu C I, Kahn A 1999 *J. Appl. Phys.* **86** 3209
- [6] Machuca F, Sun Y, Liu Z, Ioakeimidi K, Pianetta P, Pease R F W 2002 *J. Vac. Sci. Technol. B* **20** 2721
- [7] Turnbull A A, Evans G B 1968 *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* **1** 155
- [8] Tremsin A S, Siegmund O H W 2005 *Proc. SPIE* **5920** 592001-1
- [9] Maruyama T, Brachmann A, Clendenin J E, Desikan T, Garwin E L, Kirby R E, Luh D A, Turner J, Prepost R 2002 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. A* **492** 199
- [10] Siegmund O, Vallerga J, McPhate J, Malloy J, Tremsin A, Martin A, Ulmer M, Wessels B 2006 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. A* **56** 789
- [11] Liu Z, Machuca F, Pianetta P 2004 *Appl. Phys. Lett.* **85** 1541
- [12] Machuca F, Liu Z, Maldonado J R, Coyle S T, Pianetta P, Pease R F W 2004 *J. Vac. Sci. Techn. B* **22** 3565
- [13] Wang X H, Chang B K, Du Y J, Qiao J L 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 042102
- [14] Wang X H, Chang B K, Ling R, Gao P 2011 *Appl. Phys. Lett.* **98** 082109
- [15] Perlin P, Jauberthie-carillon C, Itie J P, San Miguel A, Grzegory I, Polian A 1992 *Phys. Rev. B* **45** 83
- [16] Probert M J, Pickard C J, Hasnip P J, Clark S J, Payne M C 2002 *Condens. Matter* **14** 2717
- [17] Perdew J P, Zunger A 1981 *Phys. Rev. B* **23** 5048
- [18] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [19] Monkhorst H J, Pack J D 1976 *Phys. Rev. B* **13** 5188
- [20] Ke F S, Fu X Y, Duan G Y, Wu S, Wang S Y, Chen L Y, Jia Y 2011 *J. Infrared Millim. Waves* **30** 212 (in Chinese) [柯福顺, 付相宇, 段国玉, 吴松, 王松有, 陈良尧, 贾瑜 2011 红外与毫米波学报 **30** 212]
- [21] Pickett W E, Comput W E 1989 *Phys. Rep.* **9** 115
- [22] Xu P S, Deng R, Pan H B, Xu F Q, Xie C K, Li Y H, Liu F Q, Yibulaxin K 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 1171 (in Chinese) [徐彭寿, 邓锐, 潘海斌, 徐法强, 谢长坤, 李拥华, 刘凤琴, 易布拉欣·奎热西 2004 物理学报 **53** 1171]
- [23] 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, 张建敏, 陈志高, 黄志高 2009 物理学报 **58** 1924]
- [24] Rosa A L, Neugebauer J 2006 *Phys. Rev. B* **73** 205346
- [25] Kampen T U, Eyckeler M, MÖnch W 1998 *Appl. Surf. Sci.* **123** 28
- [26] Meycr B 2004 *Phys. Rev. B* **69** 045416
- [27] 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)]
- [28] 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)]
- [29] Chen Q, Xie Q, Yan W J 2008 *Science in China Ser. G* **38** 825 (in Chinese) [陈茜, 谢泉, 闫万珺 2008 中国科学 G 辑 **38** 825]

First-principles study of the electronic structure and optical properties of GaN(0001) surface*

Du Yu-Jie^{1)2)†} Chang Ben-Kang²⁾ Zhang Jun-Ju²⁾
Li Biao²⁾ Wang Xiao-Hui²⁾

1) (*Department of Physics, Institute of Bingzhou, Bingzhou 256603, China*)

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

(Received 5 May 2011; revised manuscript received 5 December 2011)

Abstract

The band structure, the density of states, the surface energy, the work function, and the optical properties of GaN(0001)(2×2) clean surface are calculated systematically by the first-principles plane-wave ultra-soft pseudopotential method based on the density function theory. It is found that the band structure of GaN(0001) surface changes greatly after relaxation, the surface has metallic conductive properties, and there is obvious surface state near the bottom of conduction band. In the effect of dipole moment, the surface charges shift and Ga-terminated surface is positive polar surface. the surface energy and the work function of GaN (0001) surface are obtained to be $2.1 \text{ J}\cdot\text{m}^{-2}$ and 4.2 eV, respectively. The optical properties of GaN (0001) surface and bulk phase GaN are analyzed and compared. It is found that there is big difference between them.

Keywords: GaN(0001) surface, electronic structure, optical properties, work function

PACS: 71.55.Eq, 78.20.Ci

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 60871012, 61171042), the Shandong Natural Science Foundation, China (Grant No. ZR2010FL018), the Science and Technology Development of Shandong Province, China (Grant No. 2010GWZ20101), and the Shandong Province Higher Educational Science and Technology Program, China (Grant No. J10LG74).

† E-mail: dyj@bzu.edu.cn