

原子氢在 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 薄膜上吸附的第一性原理计算^{*}

宋红州 张 平[†] 赵宪庚

(北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)
(2006 年 3 月 29 日收到, 2006 年 4 月 28 日收到修改稿)

对原子氢在 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 薄膜表面的吸附性质做了第一性原理计算研究. 根据原子面间距的不同, 可把 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 表面分为两种. 计算结果表明, 原子氢在这两种表面上的吸附性质显著不同. 为阐明和分析这些不同, 系统计算和分析了 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 薄膜的表面电子结构、电子功函数、平均静电势和局域电荷密度. 这些物理量都自洽地表明, 吸附过程中原子氢和表面铍原子间的电荷转移过程对于两种表面是完全不同的. 对于 L 型表面来说, 电荷由吸附原子氢向表面 Be 原子层转移, 而对于 S 型表面而言, 电荷转移过程恰恰相反.

关键词: 表面能, 功函数, 量子尺度效应

PACC: 7115A, 8265M, 7360, 6830

1. 引 言

铍属于 s-p 成键的简单金属, 然而它并不表现出通常的自由电子金属行为, 有很多反常特性. 比如, 与周期表中相邻的其他元素如 Mg 相比较, 六角密排结构的晶体铍其 c/a 值不理想, 为 1.57 (对于 Mg: $c/a = 1.62$), 显示了铍成键的方向性. 铍的成键能很强 (结合能: Be 为 3.32eV/atom , Mg 为 1.51eV/atom). 德拜温度也很高 (Be 为 1440K , Mg 为 400K). 因此铍在低温下有明显的量子行为^[1]. 铍体材料的电子结构与铍表面电子结构截然不同, 主要表现在晶体铍在费米能级 E_F 处其电子态密度 (DOS) 很低, 表现出共价键特性^[2,3], 而理论和实验表明 $\text{Be}(0001)$ 和 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 表现出自由电子金属行为^[4]. 铍表面态金属性增强的原因是受费米能级处表面原子局域电子态密度的影响^[5]. 这种表面金属性增强行为直接导致铍表面的许多异乎寻常的行为, 如表面芯能级位移^[6-12]、表面弗伦德尔 (Friedel) 巨振荡^[13-16]、表面原子层间距大膨胀^[17,18]、电声子耦合的增强等^[19-24].

目前基于密度泛函理论的第一性原理方法在材料表面、薄膜的电子结构性质研究中愈来愈受到重视. 这方面也做了很多工作^[25-28]. 本文通过第一性

原理电子结构计算方法仔细研究了 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 薄膜电子结构性质及原子氢的吸附行为. Feibelman 和 Stumpf 等人^[29] 通过理论研究了原子氢吸附 $\text{Be}(0001)$ 表面情况, 结果显示原子氢在 $\text{Be}(0001)$ 表面低覆盖时 hcp 吸附位置最佳; 而当高覆盖时则必须考虑长程序, 在此情况下, 实验发现氢吸附会导致 $\text{Be}(0001)$ 表面发生 $\sqrt{3} \times \sqrt{3} R30^\circ$ 重构^[30]. 据我们所知, 关于原子氢在 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 表面吸附性质还未见理论研究的报道, 考虑到清洁 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 表面也具有很多奇异的效应包括表面芯能级位移、电声子耦合的增强等, 我们认为有必要仔细研究原子氢在 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 薄膜上的吸附. 同时研究原子氢吸附在 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 表面所引起的一些具体物理效应也是很有意义的, 我们将在以后的工作中涉及到.

2. 计算方法

我们在计算中采用了基于密度泛函理论平面波赝势^[31]方法的 VASP^[32]程序, 对于自由 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 薄膜系统采用周期厚平板 (slab) 超原胞结构, 为了防止平板的上下表面由于周期性边界条件带来的人为相互作用从而使计算失真, 我们采用通常做法, 将薄膜放置在平板中央, 而平板内部两侧用真空对称加装, 真空总厚度取为 20\AA . 计算中, 表面采用 1×1 超元

^{*} 国家自然科学基金 (批准号: 10544004) 资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: zhang_ping@iapcm.ac.cn

胞,倒空间中布里渊区积分采用流行的 Monkhorst-Pack^[33]方法, K 点网格尺寸为 $11 \times 11 \times 1$,平面波截断能取为 300eV .此外,对所有原子进行弛豫时采用 PW-91 广义梯度近似(GGA)型交换关联势.采用 0.05eV 的费米展宽描述有限温度费米能级 E_F 处费米方程并外推到 $T = 0\text{K}$,优化原子结构直到每个原子上的受力小于 $0.01\text{eV}/\text{\AA}$.上述计算参数选定后,我们首先计算了 hcp 体结构 Be 的总能,得到离散的能量-体积关系,再用状态方程拟合数据,从而得到平滑的能量-体积曲线,进而得到平衡体积对应的

晶格参数,计算值为 $a = 2.272\text{\AA}$, $c = 3.544\text{\AA}$,与实验值($a = 2.285\text{\AA}$, $c = 3.585\text{\AA}$)^[34]符合得很好.

3. 结果与讨论

我们选择 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 面作为基底,体铍原胞包括四个原子,采用的正交基矢分别为 $a_1 = (c, 0, 0)$, $a_2 = (0, a, 0)$, $a_3 = (0, 0, \sqrt{3}a)$.在此基矢下,体铍四个原子的位置为 $(0, 0, 0)$ $(0.5, 0.5, 1/6)$ $(0, 0.5, 0.5)$ 和 $(0.5, 0, 2/3)$.

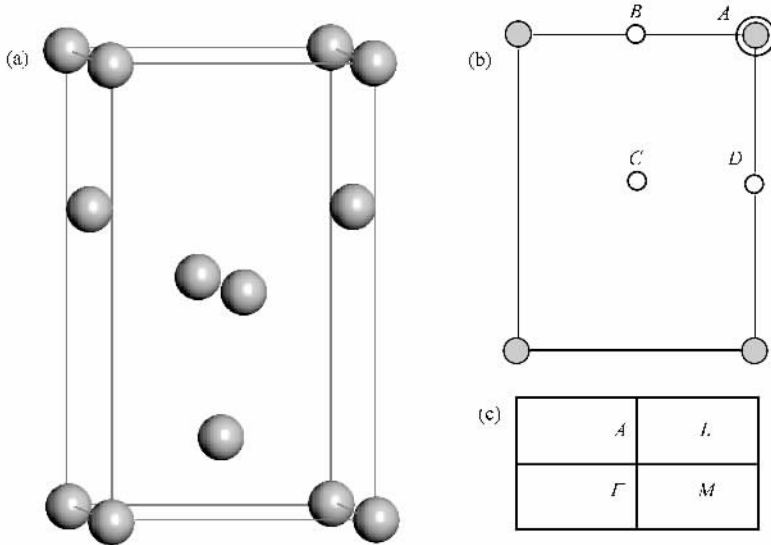


图1 (a)hcp 体结构铍以 $(10\bar{1}0)$ 面为基底的原胞 (b)氢在铍 $(10\bar{1}0)$ 表面四个可能的吸附位置(A, B, C, D),填充圆代表表面铍原子 (c)铍 $(10\bar{1}0)$ 表面的布里渊区及特殊 K 点

图1给出了晶体铍原胞的结构示意图,可以看出 Be 的 $(10\bar{1}0)$ 面的面间距为 $d_s = \sqrt{3}a/6$ 或 $d_l = \sqrt{3}a/3$,因此 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 结构有两种表面.为区分这两种表面,这里我们作出规定:如果表面和最近邻下层原子的层间距为 d_s ^[35],则称该表面为 S 型表面;如果表面和最近邻下层原子的层间距为 d_l ,则称该表面为 L 型表面.实验和理论计算都表明 S 型表面较 L 型表面稳定.

图2为计算得到的体能带结构和电子态密度,可以看到,体铍在费米能级处的电子态密度(DOS)有最小值,因此体铍具有类半导体行为,这使铍不同于周期表中相邻的其他元素,比如 Mg 的能带结构接近自由电子特性.另外,体铍能带在布里渊区的很大范围内表现为直接带隙,也与 Mg 不同, Mg 在 Γ 点能量为 1.3eV .而 Be 在费米能级 E_F 上能带几乎是平的,此带是费米能级附近低电子态密度和宽峰

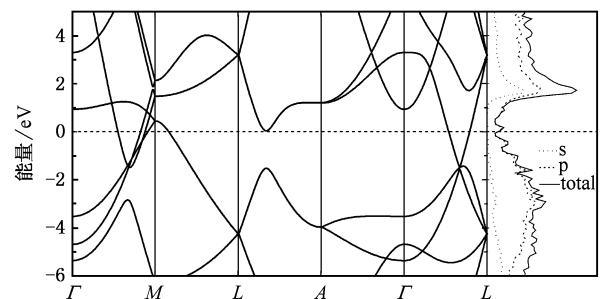


图2 GGA 计算 hcp 体 Be 的能带和态密度,虚线表示费米能级

的来源.虽然原子铍的电子组态是 $1s^2 2s^2$,但是晶体铍的 p 轨道在费米能级 E_F 附近起很重要的作用.由于电子结构的各向异性,铍晶体是六角密排材料中 c/a 最小的金属,计算得到的值为 $c/a = 1.56$,对于 Mg , $c/a = 1.62$,其平面内最近邻原子间距和平面外最近邻原子间距差别很大.另一个电子结构各向

异性的反映是 P_x, P_y 轨道对于态密度的贡献不同于 P_z 成分^[36].

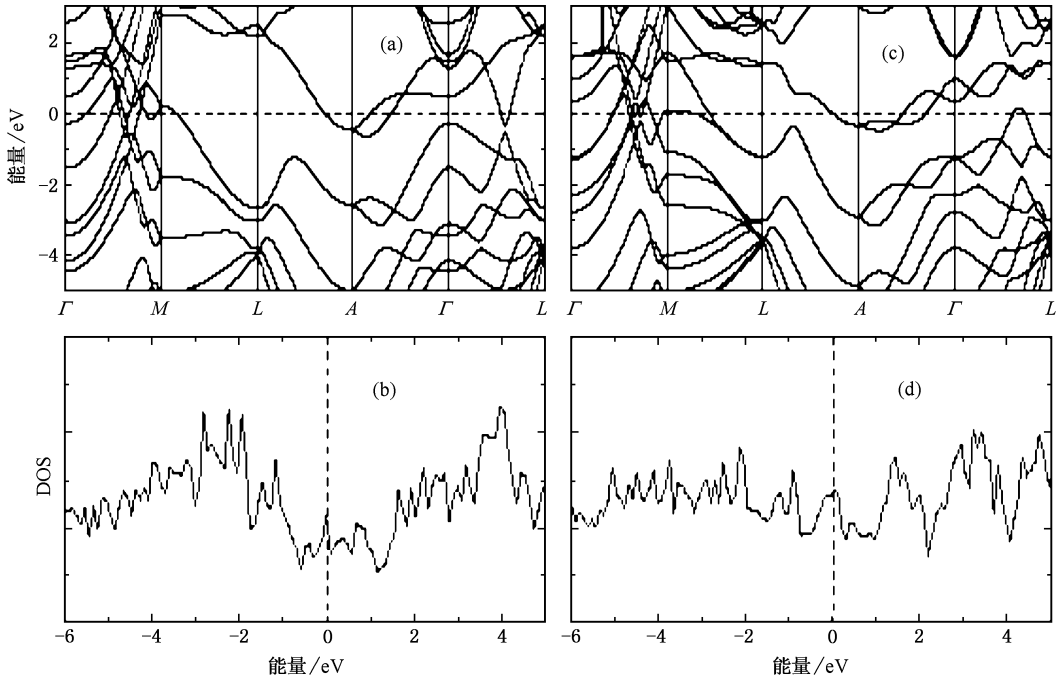


图3 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 薄膜的能带和态密度 (a)(b)分别指 L型和 S型表面的计算结果

上面提到的体 Be 的“类半导体”图像对于 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 表面完全不再适用. 图 3 给出了 10 个原子层厚的 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 薄膜的能带和电子态密度 (a)和(b)分别是 L型表面和 S型表面的计算结果. 与图 2 所示的体材料电子结构相比, 图 3 显示: 1) $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 面的费米面向宽峰移动, 导致在费米能级 E_F 附近电子态密度相对于体铍有明显的增加. $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 薄膜的这种在费米能级附近电子态密度的增强现象以前在 $\text{Be}(0001)$ 薄膜材料中曾经报道过, 也曾在其他金属薄膜如 $\text{W}(110)$ 和 $\text{Mg}(110)$ 中发现过^[37]. 2) 与 L型表面相比 S型表面在费米能级 E_F 附近态密度有明显的增加. 就是说 S型表面金属行为比 L型强. S型表面能带结构与 L型表面相比, 与体材料能带结构相差较远, 所以 S型表面在实验中更容易被观察到有更强的金属行为^[35]. 3) Γ 点附近的一系列子带可以写成 $E_n + \hbar^2(k_x^2 + k_y^2)/2m^*$ 的自由电子能量形式, 这里 m^* 是电子有效质量. 综合这些特征, 可以得出结论: 与体材料完全不同, $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 薄膜的电子结构具有准二维自由电子特征.

在我们研究原子氢在 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 薄膜表面的吸附特性前, 需要首先确定能量最佳的吸附位置. 由于吸附位置与基底厚度不是很敏感, 为了寻找最佳吸附位置, 可以固定 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 薄膜厚度, 正如上面提

到的, 有两种可能的表面类型分别是 S型和 L型. 对于这两种类型的表面我们都选取由 9 个原子单层构成的超原胞结构. 我们考察了四种最可能原子吸附位置, 这些吸附位置如图 1(b)所示, 吸附能计算使用公式为

$$E_{\text{binding energy[atomic H]}} = -([E_{\text{H/Be}(10\bar{1}0)}] - E_{\text{Be}(10\bar{1}0)} - 2E_{\text{H}})/2, \quad (1)$$

这里 $E_{\text{H/Be}(10\bar{1}0)}$ 是有 9 个 Be 原子单层和两个氢吸附单层(对称置于上下两个表面)的总能量, $E_{\text{Be}(10\bar{1}0)}$ 是仅 9 个 Be 原子单层的超原胞的总能量, E_{H} 是自由氢原子的总能量(自由氢原子放在 $10\text{\AA} \times 10\text{\AA} \times 10\text{\AA}$ 的超原胞中). 计算得到在 L类型表面不同位置吸附氢的吸附能分别为 2.38 eV(A), 3.51 eV(B), 3.42 eV(C) 和 2.44 eV(D). S类型表面不同位置吸附氢的吸附能分别为 1.44 eV(A), 2.2 eV(B), 1.61 eV(C) 和 2.06 eV(D). 这表明无论吸附在 S类型表面上还是 L类型表面上(B)吸附位是原子氢在 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 表面的最佳吸附位置. 在此位置原子氢与表面 Be 原子的 p 轨道悬挂键有很强的相互作用. 需要指出的是, 本文的所有计算和讨论都是基于 1×1 超原胞构造, 构造更大的超原胞不会改变本文的所有结论, 包括原子氢的最佳吸附位置及下面讨论的电荷转移性质.

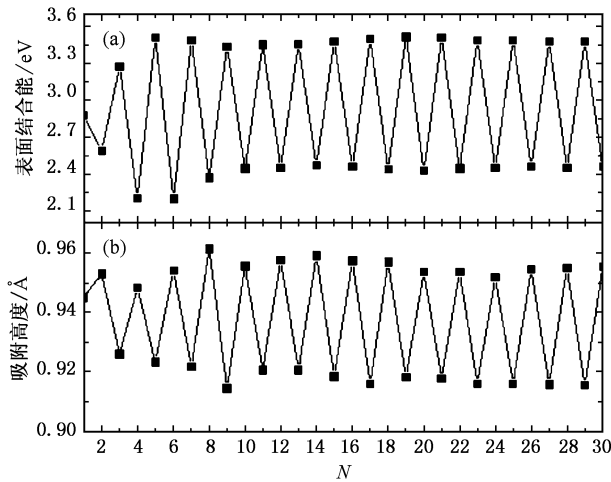


图4 原子氢在 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 表面的结合能 (a) 和吸附高度 (b) 随镀膜原子层厚的变化 (N 为铍原子层数)

找到吸附氢的最佳位置后,我们计算了氢的吸附能随 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 薄膜厚度的变化关系,结果见图 4 (a). 可以看出吸附能随原子层数的增加而振荡,振荡的峰值相应于 L 型表面的吸附,而谷值相应于 S 型表面的吸附. 这种吸附能随薄膜厚度的显著变化,实验上可通过测量吸附原子在表面的覆盖度随薄膜厚度的变化而观察到. 由于原子氢在 L 型 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 薄膜上的吸附能很强,所以由吸附氢原子和表面 Be 原子构成的界面处大多数电子参与金属成键,而少数参与 H—Be 轨道杂化成键. 而原子氢吸附于 S 型 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 薄膜时吸附能不是很强,主要是由于 H 的 S 轨道和 Be 的 P 轨道杂化起主导作用,而没有显著的离子行为. 原子氢在 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 薄膜上的吸附高度见图 4 (b),也显示了 S 或 L 振荡行为. 原子氢与 L 型和 S 型表面的吸附高度分别为 0.915\AA 和 0.955\AA . 原子氢与 L 型表面的吸附比与 S 型表面比较更低,这说明 L 型表面与原子氢的结合能比 S 型表面与原子氢的结合能更强.

图 5 给出了 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 清洁表面与原子氢吸附后电子功函数随镀膜原子层厚的变化,计算中最底层 Be 选为 L 型. 可以看出清洁 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 表面功函数随镀膜原子层数振荡. 镀膜原子层数 $N < 6$ 时, S 型表面功函数远大于 L 型表面功函数,显示如图 5 所示的清洁表面功函数的振荡,为方便表达,我们称这种振荡为 SL 型振荡;当 $N > 6$ 时, L 型表面功函数远大于 S 型表面功函数,显示如图 5 所示的清洁表面功函数的振荡,类似地我们称这种振荡为 LS 型振荡,因此从我们的计算结果可见,存在一个临界薄膜

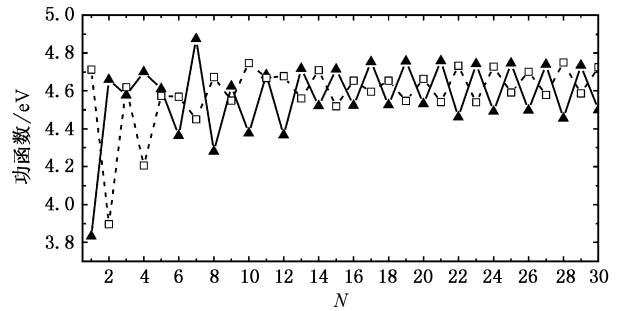


图5 清洁 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 表面功函数(实三角)与原子氢吸附后表面功函数(空方块)随镀膜原子层厚的变化(最底层 Be 为 L 型,图中数字表示超原胞中的铍原子层数)

厚度(用薄膜中原子层数 N_c 表征),对图 5 来讲 $N_c = 6$,当 $N > N_c$ 时,清洁 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 表面功函数的振荡形式是 LS 型,而当 $N < N_c$ 时,功函数的振荡形式是 SL 型.

在另外一系列计算中,最底层 Be 选为 S 型时,我们发现功函数振荡转变原子层数减小到 $N_c = 3$. 由于 Be 的 $(10\bar{1}0)$ S 型表面较 L 型表面稳定,因此显然这种功函数振荡转变原子临界层数的存在是由于表面原子的弛豫造成的,没有原子氢吸附时,清洁 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 表面的电子功函数的稳定振荡模式是 LS 型.

电子功函数的这种 LS 型振荡在考虑原子氢吸附后发生了本质的变化:由图 5 (空方块)所示, $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 表面发生原子氢吸附后,其电子功函数的稳定振荡模式变为 SL 型. 这种原子氢吸附导致的功函数振荡模式的转变显示 H—Be 具有部分离子键性质,即成键过程中,电子会在 H 和 Be 之间转移. 然而,对于两种类型的表面,电荷转移方向是截然不同的. 一般认为当负(正)电荷原子吸附在表面时会使功函数增加(减小). 对于原子氢吸附在 L 型 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 表面,由于功函数与吸附前相比减小,所以电子从氢转移到 Be,从而导致界面处的电极化效应. 而对于氢吸附在 S 型 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 表面而言,由于功函数增加,所以电子从表面 Be 原子向吸附氢原子发生转移,使吸附氢带负电荷.

为了更清楚地阐明这种原子氢吸附所造成的功函数振荡从 LS 型到 SL 型的转变,我们进一步计算了薄膜中的平均静电势 $V(z)$ 在 $x-y$ 面内求平均,沿垂直于 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 面的 z 方向的变化,结果示于图 6 中,其中图 6 (a) 和图 6 (b) 分别显示了具有 L 型表面和 S 型表面的薄膜静电势,图中实线表示清

洁表面的计算结果,而点线则表示吸附原子氢以后的结果.从图 6(a)可以看出,原子氢吸附后,L型 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 表面的静电势沿表面法向向下弯曲,显示了表面处由于电荷的转移(从原子氢向 Be 转移)而造成的偶极子的存在;而从图 6(b)可以看出,对于 S

型 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 表面, $\mu(z)$ 由于原子氢的吸附沿表面法向向上弯曲,这种情况下是由于电荷从 Be 转移到原子氢而在表面处形成了偶极子,由于该偶极子指向相反的方向而增加了功函数.相应地,图 5 显示了吸附氢以后功函数由 LS 型振荡变为 SL 型振荡.

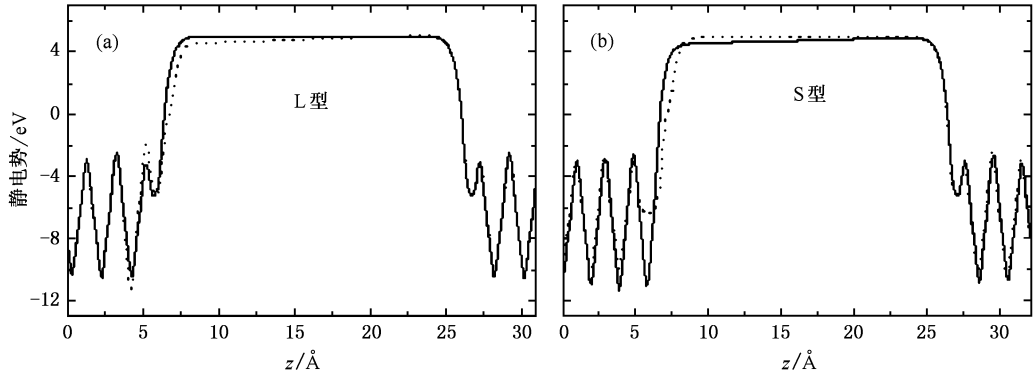


图 6 清洁表面(实线)和氢吸附(点线) $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 表面的平均静电势 (a)和(b)分别是 S 型和 L 型 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 表面结果

现在我们来研究 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 薄膜表面覆盖氢原子的表面电子结构.为此,我们系统计算了吸附氢原子单层与表面 Be 原子单层的局域电子态密度.图 7 示意了一系列超原胞的吸附氢原子层与表面铍原子

层的局域电子态密度,图中数字表示超原胞中 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 薄膜的原子层数,其中偶数(2,4,6,8,10)表示表面为 L 型表面,而奇数表示 S 型表面.可以看出氢在 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 两种表面吸附的局域电子态密度有

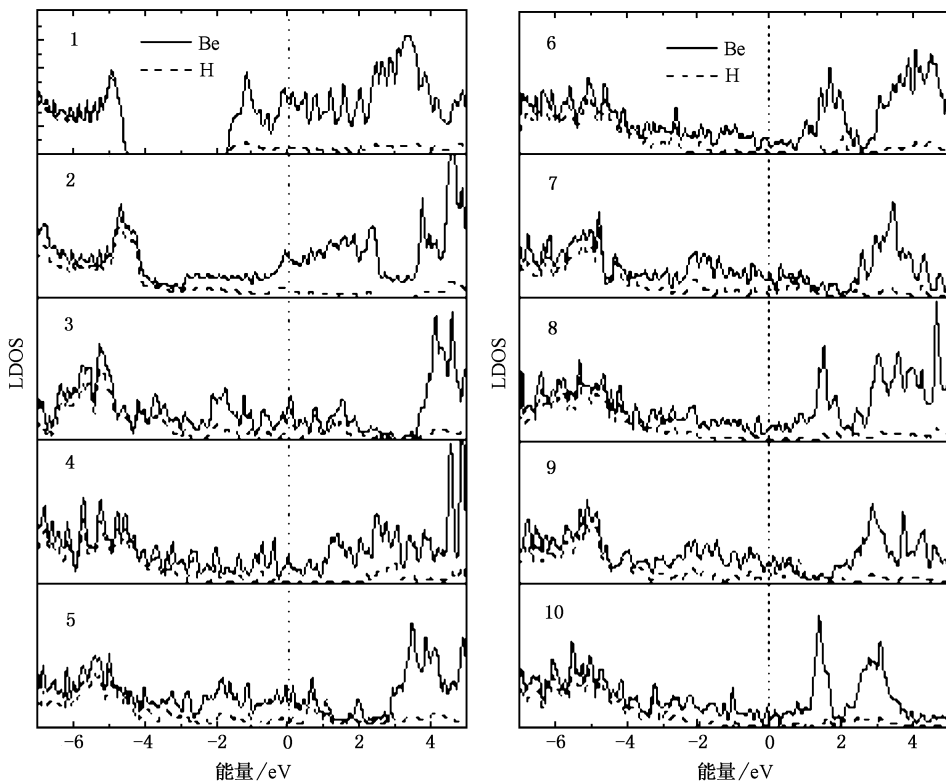


图 7 原子氢和表面 Be 原子的局域电子态密度,图中数字表示超原胞中 $\text{Be}(10\bar{1}0)$ 薄膜原子层数(其中偶数(2,4,6,8,10)表示表面 L 型表面,而奇数表示 S 型表面)

很大的差别, S 型表面费米面附近局域电子态密度比 L 型高, 表明 S 型表面原子氢和 Be 的电荷转移比 L 型活跃. 这也可以从图 7 右下角的 S 型表面和 L 型表面局域电荷密度示意图看出. 由局域电荷密度分布(这里未示意)可以看到: 与 L 型表面吸附相比, S 型表面吸附下电荷从表面 Be 原子向吸附氢原子的转移更为明显. 由此我们得到更为确切的结论: 原子氢在 S 型 Be(10 $\bar{1}0$)表面吸附会显示较强的负电性, 在 L 型表面吸附则显示明显的正电性. 这与图 6 所示的结果是完全自洽的.

4. 结 论

我们用密度泛函理论平面波赝势方法研究了氢

吸附 Be(10 $\bar{1}0$)薄膜的效应, 结果给出了电子结构, 吸附能以及功函数随薄膜厚度的变化关系. 我们发现: 1) S 型 Be(10 $\bar{1}0$)薄膜表面比 L 型金属性更强; 2) 对于两种表面, 原子氢的吸附导致的电荷转移过程非常不同, L 型表面为电荷由原子氢转移到 Be 上, 而对于 S 型表面电荷转移过程相反; 3) 没有原子氢吸附时, 功函数和 Be(10 $\bar{1}0$)薄膜厚度的变化关系呈现 LS 型振荡模式, 有原子氢吸附后, 振荡模式转为 SL 型, 即 S 型表面的功函数比 L 型高. 这种功函数振荡模式的转变与结论 2) 中电荷转移过程有关. 我们期望这种功函数与电荷转移的显著变化会在原子氢吸附 Be(10 $\bar{1}0$)薄膜的其他相关物理特性^[38]中起到重要作用.

- [1] Lazzeri M 1999 *Ph. D. Thesis* (SISSA) Trieste
- [2] Papaconstantopoulos D A 1986 *Handbook of Band Structure of Elemental Solids* (Plenum, New York)
- [3] Sklyadneva I Yu, Chulkov E V, SchÅone W D, Silkin V M, Keyling R, Echenique P M 2005 *Phys. Rev. B* **71** 174302
- [4] Chulkov E V, Silkin V M, Shirykalov E N 1987 *Surf. Sci.* **188** 287
Hofmann Ph, Stumpf R, Silkin V M, Chulkov E V, Plummer E W 1996 *Surf. Sci.* **355** L278
- [5] Balasubramanian T, Johansson L I, Glans P A *et al* 2001 *Phys. Rev. B* **64** 205401
- [6] Feibelman P J, Stumpf R 1994 *Phys. Rev. B* **50** 17480
Feibelman P J 1993 *Phys. Rev.* **48** 11270
- [7] Aldén M, Skriver H L, Johansson B 1994 *Phys. Rev. B* **50** 12118
- [8] Johansson L I, Glans P A, Balasubramanian T 1998 *Phys. Rev. B* **58** 3621
- [9] Lizzit S, Pohl K, Baraldi A *et al* 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 3271
- [10] Cho J H, Kim K S, Lee S H, Kang M H, Zhang Z 2000 *Phys. Rev. B* **61** 9975
- [11] Rundgren J 2003 *Phys. Rev. B* **68** 125405
- [12] Glans P A, Johansson L I, Balasubramanian T, Blake R J 2004 *Phys. Rev. B* **70** 033408
- [13] Johansson L I, Johansson H I P, Andersen J N, Lundgren E, Nyholm R 1993 *Phys. Rev. Lett.* **71** 2453
- [14] Sprunger P T, Petersen L, Plummer E W, Gsgaard E L, Besenbacher F 1997 *Science* **275** 1764
- [15] Hofmann Ph, Briner B G, Doering M, Rust H P, Plummer E W, Bradshaw A M 1997 *Phys. Rev. Lett.* **79** 265
- [16] Briner B G, Hofmann Ph, Doering M, Rust H P, Plummer E W, Bradshaw A M 1998 *Phys. Rev. B* **58** 13931
- [17] Lazzeri M, de Gironcoli S 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 2096
Lazzeri M, de Gironcoli S 2005 *Phys. Rev. B* **65** 245402
- [18] Vobornik I, Fujii J, Mulazzi M, Panaccione G, Hochstrasser M, Rossi G 2005 *Phys. Rev. B* **72** 165424
- [19] Hengsberger M, Purdie D, Segovia P, Garnier M, Baer Y 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 592
- [20] Balasubramanian T, Glans P A, Johansson L I 2000 *Phys. Rev. B* **61** 12709
- [21] Tang S J, Ismail, Sprunger P T, Plummer E W 2002 *Phys. Rev. B* **65** 235428
- [22] Ismail, Hofmann Ph, Baddorf A P, Plummer E W 2002 *Phys. Rev. B* **66** 245414
- [23] Eiguren A, de Gironcoli S, Chulkov E V, Echenique P M, Tosatti E 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 166803
- [24] Shi J, Tang S J, Wu B *et al* 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 186401
- [25] Ma J X, Jia Y, Liang E J, Wang X C *et al* 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 3155 (in Chinese) [马健新、贾瑜、梁二军、王晓春等 2003 物理学报 **52** 3155]
- [26] Xie C K, Xu P S, Xu F Q, Pan H B 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 2804 (in Chinese) [谢长坤、徐彭寿、徐法强、潘海斌等 2002 物理学报 **51** 2804]
- [27] Yu Y, Xu L F, Gu C Z 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 2710 (in Chinese) [于洋、徐力方、顾长志等 2004 物理学报 **53** 2710]
- [28] 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]
- [29] Stumpf R, Feibelman P J 1995 *Phys. Rev. B* **51** 13748
- [30] Pohl K, Plummer E W 1999 *Phys. Rev. B* **59** R5324
- [31] Vanderbilt D 1990 *Phys. Rev. B* **41** 7892
- [32] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11169
- [33] Monkhorst H J, Pack J D 1976 *Phys. Rev. B* **13** 5188
- [34] Amonenko V M, Ivanov V Ye, Tikhinskij G F, Finkel V A 1962 *Phys. Met. Metallogr.* **14** 47

- [35] Hofmann Ph , Slumpf R , Silkin V M *et al* 1996 *Surf. Sci.* **355** 1278
 Hofmann Ph , Pohl K , Stumpf R *et al* 1996 *Phys. Rev. B* **53** 13715
- [36] Chou M Y , Lam P K , Cohen M L 1983 *Phys. Rev. B* **28** 4179
- [37] Rotenberg E , Schaefer J , Kevan S D 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 2925
- [38] Plummer E W , Shi J , Tang S J , Rotenberg E , Kevan S D 2003 *Prog. in Surf. Sci.* **74** 251

First-principles calculation of atomic hydrogen adsorption on $\text{Be}(10\bar{1}0)$ thin films^{*}

Song Hong-Zhou Zhang Ping[†] Zhao Xian-Geng

(*Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China*)

(Received 29 March 2006 ; revised manuscript received 28 April 2006)

Abstract

We present a first-principles study of the atomic hydrogen adsorption onto the $\text{Be}(10\bar{1}0)$ thin film. There are two types of $\text{Be}(10\bar{1}0)$ surfaces according to the interlayer spacing between the surface and its nearest-neighbor layer. We show that the H adsorption features on these two kinds of surfaces are remarkably different. The work function, averaged electrostatic potential, and the local charge density consistently show that the charge is transferred from H to Be for L-type surfaces, while the transfer process is inverted for S-type surfaces.

Keywords : surface energy, work function, quantum size effects

PACC : 7115A, 8265M, 7360, 6830

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10544004).

[†] Corresponding author. E-mail: zhang_ping@iapcm.ac.cn