Электронная структура и локализация электронной плотности на границе раздела монослой Ca/GaN(0001)

© *М.Н. Лапушкин*

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: Lapushkin@ms.ioffe.ru

Поступила в Редакцию 17 июня 2026 г.
В окончательной редакции 14 августа 2026 г.
Принята к публикации 20 августа 2026 г.

Методом функционала плотности исследована адсорбция атомов кальция на поверхности Ga-полярного GaN(0001). GaN(0001) моделировался суперъячейкой GaN(0001)2×2, содержащей 10 бислоев GaN. При монослойном покрытии кальция атомы Ca адсорбируются над поверхностными атомами N. Вблизи уровня Ферми образуется зона поверхностных состояний кальция. Взаимодействие валентных электронов кальция с электронами оборванных связей Ga приводит к локализации заряда в области связи Ca−Ga.

Ключевые слова: нитрид галлия, кальций, адсорбция, электронная структура.

DOI: 10.61011/FTP.2026.05.63877.10235

1. Введение

Гетероструктуры на основе нитрида галлия (GaN) находят широкое применение благодаря своим уникальным физическим характеристикам. GaN является полупроводником с широкой запрещенной зоной, что в сочетании с высокой теплопроводностью, термостойкостью и интенсивной светоотдачей делает его незаменимым материалом для современной электроники [1]. На сегодняшний день GaN активно используется в производстве высокомощных полупроводниковых приборов [2] и различных типов светодиодов [3]. Модификация поверхности GaN путем нанесения или имплантации атомов, в частности металлов, приводит к целенаправленному изменению ее физико-химических и электронных свойств. Это открывает перспективы для создания на основе GaN различных устройств и в том числе высокоэффективных сенсоров и катализаторов.

Адсорбция различных атомов и молекул на поверхности GaN(0001) была предметом многочисленных экспериментальных и расчетных исследований, результаты которых приведены в обзоре [4]. Для создания *p*-типа GaN чаще всего применяют легирование магнием, атомы которого замещают атомы Ga, создавая акцепторные уровни. В связи с этим актуальной задачей становится изучение воздействия иных щелочно-земельных элементов на электронные параметры нитрида галлия для их потенциального применения в роли альтернативных магнию допантов. Настоящее исследование посвящено моделированию процессов адсорбции кальция на GaN(0001) в рамках теории функционала плотности.

В области изучения адсорбционных процессов с участием щелочноземельных металлов на грани GaN(0001) ключевое внимание традиционно уделяется Mg. При этом эмпирические данные, касающиеся осаждения атомов кальция, в литературе на текущий момент отсутствуют. Стоит также указать, что адсорбция бария и магния на тринитриде галлия достаточно хорошо изучена в экспериментальных работах [4]. Адсорбция бария на поверхности Ga-полярного GaN(0001) исследована в диапазоне субмонослойных покрытий при возбуждении фотоэмиссии в видимом диапазоне и при синхротронном излучении [5,6]. Фотоэмиссионные спектры авторы связывают с возбуждением двумерного аккумуляционного слоя около уровня Ферми. Кроме того, в процессе инициирования фотоэмиссии видимым излучением (в спектральной зоне прозрачности нитрида галлия) фиксировались колебания фототока, обусловленные интерференционными явлениями внутри пленки GaN. В работе [7] исследован рост, структура и электронные свойства тонких (толщиной ≤ 20 Å) пленок Mg на GaN(0001) с помощью оже-спектроскопии, фотоэмиссии и дифракции медленных электронов. Показано, что происходит эпитаксиальный рост при комнатной температуре с формированием металлического слоя. Происходит обмен местами между Mg и Ga с внедрением Mg в GaN вблизи границы раздела. Однако в работе [8] показано, что происходит рост слоя магния по механизму Странского–Крастанова. Методом функционала плотности исследована адсорбция монослоя Mg на поверхности Ga-полярного GaN(0001) с использованием суперъячейки $2 \times 2 \times 10$. Нестандартная комбинированная позиция адсорбции атомов Mg над атомами N и в мостиковом положении между атомами N является наиболее энергетически выгодной с энергией адсорбции -1.175 эВ. Найдена минимальная реконструкция подложки и формирование широкой поверхностной зоны ниже уровня Ферми за счет взаимодействия валентных электронов магния и GaN.

Моделированию процессов адсорбции щелочно-земельных элементов на Ga-полярной грани GaN(0001) посвящено ограниченное число публикаций. Среди них можно выделить статьи, сосредоточенные на механизмах внедрения Mg вглубь полупроводниковой подложки.

Также известны исследования, описывающие осаждение магния на графеноподобный монослой (g-GaN). Так, авторы работы [9] в рамках теории функционала плотности выполнили квантово-химические расчеты взаимодействия щелочно-земельных металлов (включая Ca) с поверхностью g-GaN. Модель базировалась на суперъячейке 3×3 из 18 атомов. Согласно их выводам, при степени покрытия 1/18 ов монослоя (ML) кальций предпочтительно локализуется над узлом Ga, при этом расчетная энергия адсорбции (E_{ads}) составляет -4.17 эВ. Максимум зоны поверхностных состояний Ca приходится на 3 эВ ниже уровня Ферми и в области валентной зоны g-GaN. Рассчитанный коэффициент поглощения света имеет несколько пиков поглощения в диапазоне от 1.5 до 2.9 эВ, что, по мнению авторов, может привести к использованию исследованных систем для каталитических процессов при возбуждении видимым светом. В работе [10] методом функционала плотности проведен расчет адсорбции Be и Ca на монослое g-GaN, для случая размещения одного адатома в суперъячейках: 2×2, 3×3 и 4×4. Показано, что абсолютное значение энергии адсорбции атома Ca уменьшается с ростом покрытия от значения -3.08 до -2.62 эВ. Показано, что при этих покрытиях g-GaN сохраняет полупроводниковый характер. Формируется широкая полоса электронных состояний ниже уровня Ферми в диапазоне от -3.5 до -1.5 эВ и узким пиком чуть ниже уровня Ферми. При этом происходит перенос электронной плотности от кальция к g-GaN. С увеличением покрытия кальция величина переноса заряда уменьшается от $0.85e$ до $0.75e$. В работах [11,12] исследована фотолюминесценция GaN с имплантированным Ca. Максимум фотолюминесценции приходится на 2.5 эВ, что немного больше теоретического значения на 0.27 эВ, и показано, что она связана с акцепторами Ca_{Ga}.

Отметим, что Ca является одним из кандидатов на замену Li в ионных батареях [10,13]. Ca может быть источником безызлучательной рекомбинации в GaN, что негативно влияет на эффективность светодиодов на основе нитридов III группы [11]. Адсорбированный монослой можно считать первой стадией формирования интерфейса металл–полупроводник. Как видно из обзора, практически нет расчетов монослойного покрытия атомов щелочно-земельных атомов на GaN, а имеются работы, в которых рассматривается адсорбция одного атома на поверхности суперъячейки для уменьшения временны́х затрат. В литературе также не представлены сведения о взаимосвязи между размером адсорбированного атома щелочно-земельного металла и пространственным распределением предпочтительных мест адсорбции при формировании монослоя на поверхности тринитридов. Расчет монослоя Mg на GaN(0001) [14] показал, что атомы магния адсорбируются в нестандартной конфигурации, образуя прямоугольник 3.216×2.592 Å между двумя позициями над атомом N (T_N) и двумя мостиковыми позициями между атомами N. Поэтому необходимо понять является ли данная конфигурация уникальной или же она характерна для адсорбции других щелочно-земельных элементов. Исследование адсорбции атомов позволяет определить не только места адсорбции, но энергию адсорбции, что позволит в дальнейшем исследовать процесс диффузии атомов в подложку, т. е. процесс допирования подложки.

Влияние атомов Ca на поверхность Ga-полярного GaN(0001) ранее не исследовалось. Цель данной работы — квантово-механическое моделирование адсорбции Ca на поверхности GaN(0001) для определения влияния адсорбированного Ca на электронные свойства поверхности. В задачу работы входило определение наиболее энергетически выгодного места адсорбции, энергии адсорбции, электронной структуры поверхности и нахождения локализации электронной плотности, вызванной адсорбцией монослоя кальция.

Поставленную задачу предполагается решить в рамках теории функционала плотности (DFT) с привлечением приближения локальной плотности (LDA) для учета обменно-корреляционных эффектов [15]. Выбор LDA также обусловлен доступностью в открытых базах данных псевдопотенциалов псевдоводорода, разработанных именно для этого функционала. Несмотря на длительную историю применения и известные ограничения, приближение LDA сохраняет свою актуальность и в современных исследованиях [16–18]. Его ключевым преимуществом являются сравнительно низкие вычислительные затраты и высокая скорость расчета по сравнению с гибридными функционалами. Это позволяет эффективно моделировать суперъячейки, содержащие большое число атомов. Одной из фундаментальных проблем DFT-расчетов является систематическое занижение ширины запрещенной зоны E_g полупроводников (вплоть до 50 %) [19–21]. Наиболее точные значения E_g достигаются при использовании гибридных функционалов, таких как HSE [22]. В частности, применение HSE для GaN [23] позволяет получить величину $E_g = 3.51$ эВ, что хорошо согласуется с экспериментальным значением (3.4 эВ). Однако расчеты с использованием функционалов семейства HSE требуют на порядок большего машинного времени по сравнению со стандартными обменно-корреляционными схемами. Для коррекции этой погрешности применяются различные подходы: от сдвига зоны проводимости (scissoring operator) [24], введения поправок Хаббарда (метод DFT+U) [25], использования модифицированного функционала Беке–Джонсона (mBJ) [26] до LDA1/2 [27].

2. Детали расчета

Моделирование атомно-электронного строения осуществлялось методом теории функционала плотности (DFT). Вычисления проводились в программном комплексе Quantum Espresso [28], где обменно-корреляционные эффекты учитывались посредством аппроксимации локальной плотности (LDA) [15] с использованием ультрамягких псевдопотенциалов. Использова-

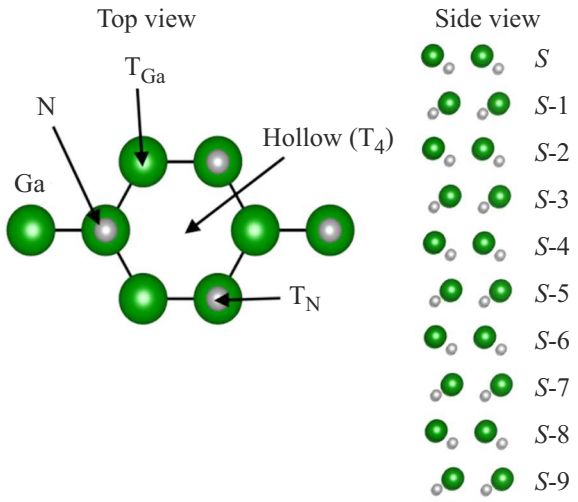


Рис. 1. Суперъячейка GaN(0001). Стрелки указывают стабильные центры адсорбции.

лось гауссово размытие с шириной 0.01 P (ридберг). Пространственная изоляция слоев для предотвращения нежелательных межслоевых электрических полей обеспечивалась созданием вакуумного слоя в 52 Å. Базис плоских волн ограничивался энергиями отсечки 45 P для волновых функций и 406 P для электронной плотности. Релаксация геометрии выполнялась с привлечением γ-центрированной сетки k-точек размером $4 \times 4 \times 1$, а финальный расчет электронной подсистемы — на более плотной сетке $8 \times 8 \times 1$.

GaN(0001) моделировался суперъячейкой $2 \times 2 \times 10$ (рис. 1). Параметры элементарной ячейки остаются фиксированными. В данном расчете использованы параметры: $a = b = 3.216$ Å и $c = 5.240$ Å, что близко к экспериментальным значениям: $a = 3.22$ Å, $c = 5.23$ Å. Количество бислоев GaN подобрано так, чтобы исключить влияние поверхностных эффектов на электронную структуру центральных бислоев и обеспечить оптимальный компромисс между точностью и вычислительными затратами. Нижний слой суперъячейки был терминирован псевдоатомами водорода с рекомендуемым зарядом $0.75e$ [29–31]. Релаксации подвергались поверхностный бислой GaN, слой адсорбата и слой псевдоатомов H (только чистой поверхности). Положение атомов в других бислоях остается зафиксированным для моделирования объема. Процедура релаксации завершалась, когда модули сил были меньше 10^{-4} P/Å.

3. Результаты расчета

Плотность электронных состояний для поверхностного бислоя (S) чистой поверхности релаксированного GaN(0001) приведена на рис. 2, *a*. Основной пик поверхностных состояний находится вблизи уровня Ферми при $E = 0.20$ эВ, что говорит о металлизации поверхности. Выше уровня Ферми (E_F) расположен еще один широкий пик с максимумом при 4.0 эВ. Данные состояния обусловлены главным образом Ga $4p$-орбиталями и существенно меньшим вкладом N $2p$-орбиталей. На рис. 3, *a* приведено пространственное распределение электронной плотности поверхностных состояний в диапазоне энергий от -1.0 эВ до E_F. Видно, что N $2p$-состояния имеют более сильную локализацию и расположены значительно дальше от плоскости поверхности, чем Ga $4p$-состояния.

В случае бислоя (S-1) наблюдается падение плотности поверхностных состояний на уровне Ферми в ~ 10 раз. Влияние поверхности на электронную структуру нижележащих слоев быстро затухает, и для бислоя (S-4) она становится близкой к объемной. Этот результат хорошо совпадает с известными расчетными данными для GaN, приведенными в обзоре [7].

Энергия адсорбции (E_{ads}) адатома Ca рассчитана по следующей формуле:

$$E_{ads} = \left(E_{GaN_Ca} - E_{GaN} - E_{Ca}\right)/4, \qquad (1)$$

где E_{GaN_Ca} и E_{GaN} — полные энергии с адсорбированным Ca и без него, E_{Ca} — полная энергия монослоя

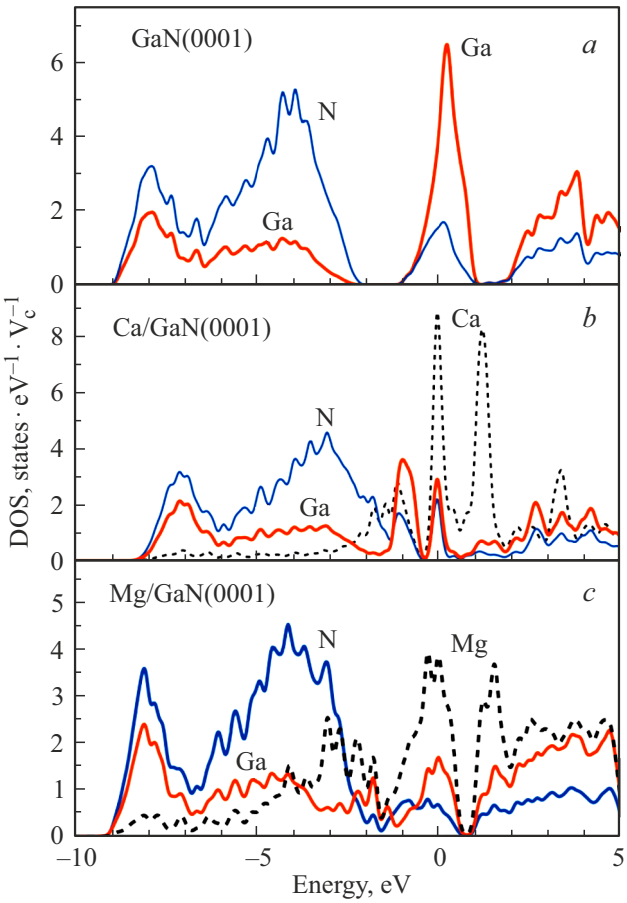


Рис. 2. Парциальная плотность состояний для поверхностного слоя: GaN(0001) (*a*), Ca/GaN(0001) (*b*) и Mg/GaN(0001) (*c*) [31]. $E_F = 0$ эВ. V_c — объем элементарной ячейки.

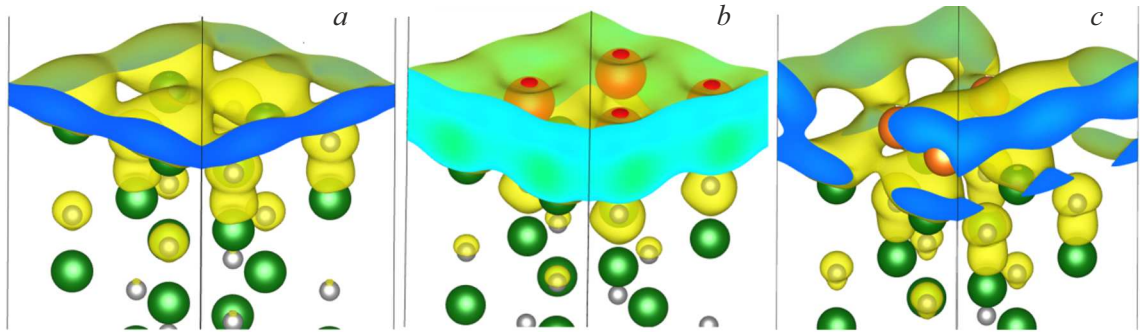


Рис. 3. Парциальная плотность заряда, соответствующая занятым поверхностным состояниям, для чистого GaN(0001) (a) и после адсорбции монослоя Ca (b) и Mg (c). Уровень насыщения установлен на $0.0022\,e/\text{Å}^3$ (a), $0.0031\,e/\text{Å}^3$ (b) и $0.0019\,e/\text{Å}^3$ (c).

Параметры адсорбции атомов Ca: значения энергии связи и межплоскостные расстояния h до поверхностных атомов галлия

	E_{ads}, эВ	h, Å
T_N	−1.698	2.32
T_{Ga}	−0.988	3.17
ямочная позиция T_4	−1.531	2.47

Ca. В таблице приведены значения энергии адсорбции атомов кальция и межплоскостное расстояние между слоем кальция и поверхностными атомами галлия для различных высокосимметричных мест адсорбции.

Адсорбция в мостиковых позициях между атомами Ga и N энергетически невыгодна. Адсорбция атомов Ca предпочтительна в позиции T_N. Здесь наблюдается отличие от адсорбции монослоя Mg на GaN(0001) [14]. Атомы магния адсорбируются в нестандартной конфигурации, образуя прямоугольник 3.216×2.592 Å между двумя положениями T_N и двумя мостиковыми позициями между атомами N. В случае монослоя Ca эта стартовая позиция является неустойчивой, и атомы мигрируют к T_N. Причина такого различия может быть связана с тем, что радиусы атомов Mg и Ca различаются: 1.60 и 1.97 Å. Энергия адсорбции кальция больше для одинакового покрытия, чем у магния ($E_{ads} = -1.175$ эВ). Полученное значение меньше, чем для покрытия 0.25 монослоя Ca на g-GaN ($E_{ads} = -2.62$ эВ) [10]. Различие вызвано в основном разным типом подложки и величиной покрытия и в меньшей степени методиками расчета.

После адсорбции монослоя Ca в позиции T_N расстояние между плоскостями поверхностных атомов Ga и N увеличивается на 8 %. Этот процесс сопровождается перестройкой плотности поверхностных электронных состояний вблизи E_F. При этом формируются зоны кальциевых поверхностных состояний: узкая на уровне Ферми и широкая (~ 3 эВ) с максимумом при -1.15 эВ (рис. 2, b). Данные зоны образованы гибридизированными $4sp$-состояниями Ca. При этом пик на E_F обусловлен преимущественно Ca $4p$-состояниями, тогда как широкий пик Ca $4sp$-состояниями. Пики поверхностных состояний GaN в поверхностном слое (рис. 2, b) распадаются на два: -1.03 и -0.04 эВ. Влияние адсорбированного слоя атомов Ca на электронную структуру бислоев GaN резко уменьшается с удалением от поверхности. Для бислоя (S-1) плотность поверхностных состояний резко уменьшается на порядок. Уже для бислоя (S-3) влияние монослоя кальция на электронную структуру незаметно. По смещению края валентной зоны для поверхностного (S) и центрального (S-4) бислоев GaN установлено, что адсорбция монослоя Ca вызывает направленный вверх изгиб зоны величиной ~ 0.3 эВ. В работе [14] приведены результаты расчетов адсорбции монослоя магния на GaN(0001), которые качественно согласуются с полученными в расчете результатами для кальция. Однако есть и различия (рис. 2, c), которые связаны с меньшим размером атома Mg и его большим потенциалом ионизации, и нестандартной конфигураци-

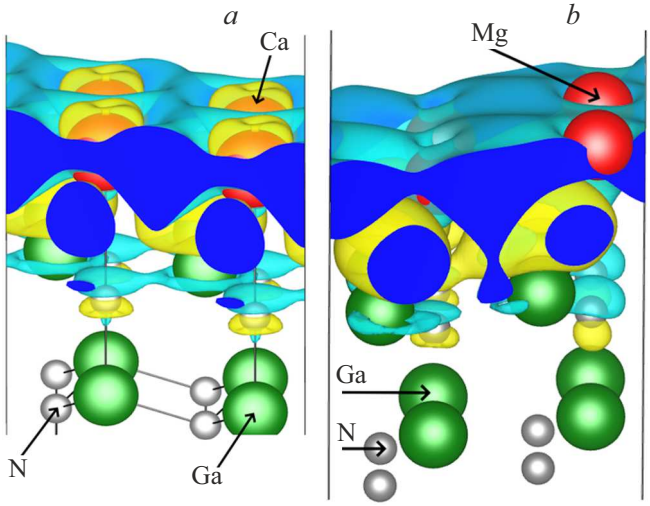


Рис. 4. Разностная электронная плотность $\Delta\rho(r)$ после адсорбции монослоя Ca (a) и Mg (b). Голубыми и желтыми контурами обозначены зоны дефицита и избытка (аккумуляции) заряда соответственно. Синей линией выделен профиль $\delta\rho(r)$ вдоль границы расчетной суперъячейки.

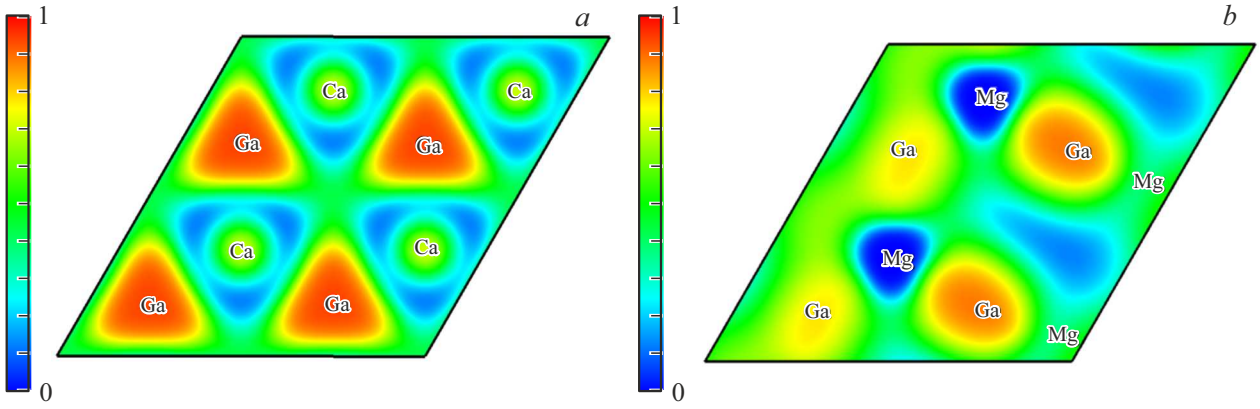


Рис. 5. Функция локализации электронов после адсорбции монослоя Ca (a) и Mg (b): вид сверху. Разрез проведен для максимального значения ELF между поверхностными атомами Ga и адсорбированными атомами Ca(Mg). Расстояние от плоскости разреза до плоскости атомов Ga составляет 1.39 Å для монослоя Ca и 1.54 Å для Mg.

ей адсорбированных мест Mg. Получен более широкий пик на E_F. Результаты, представленные для адсорбированного монослоя Mg на рис. 3–5, были рассчитаны в рамках данной работы.

На рис. 3, b приведено пространственное распределение электронной плотности поверхностных состояний в диапазоне энергий от -1.0 эВ до E_F после адсорбции монослоя Ca. Видно, что N $2p$-состояния становятся более локализованными в пространстве и не принимают участия в формировании связи с адсорбированными атомами. Ga $4p$-состояния принимают участие в формировании связи с адсорбированными атомами и локализованы в области связи. Для монослойного покрытия Mg результаты получены похожие (рис. 3, c), отличия связаны с нестандартным положением адсорбированных атомов.

Хемосорбция кальция на грани GaN(0001) обусловлена формированием химической связи за счет обобществления валентных электронов Ga и Ca. Данный процесс сопровождается перераспределением зарядов: электронная плотность локально возрастает в межузельном пространстве Ga–Ca, в то время как вблизи самого атома Ca наблюдается ее дефицит. Это хорошо видно на рис. 4, a, где представлена разность зарядовой плотности $\Delta\rho(r)$ после адсорбции Ca на поверхность GaN(0001).

В области связи Ca–N фиксируется аккумуляция электронной плотности $\rho(r)$, обусловленная взаимодействием с оборванными связями поверхностных атомов Ga. Напротив, в плоскости атомов Ca наблюдается обеднение распределения $\rho(r)$. При этом в самом поверхностном бислое GaN межатомная электронная плотность между Ga и N претерпевает лишь незначительные изменения.

Адсорбированный Ca взаимодействует с поверхностью GaN N(0001) посредством химической связи, формируемой между валентными электронами Ga и Ca. Происходит увеличение электронной плотности в области связи между атомами Ga и Ca, и, соответственно, уменьшение электронной плотности около атома Ca. Схожая картина наблюдается и для адсорбции атомов Mg (рис. 4, b).

Визуализация пространственного распределения ELF (функции локализации электронов) [32] при формировании монослоя Ca дана в виде 2D-среза на рис. 5, a. Область определения этой безразмерной величины искусственно ограничена рамками от 0 до 1. Значения ELF, близкие к верхнему пределу, указывают на высокую степень локализации электронной плотности в данной области пространства, тогда как значение ELF = 0 свидетельствует о ее практическом отсутствии. Случай ELF = 0.5 соответствует полной делокализации электронов, что характерно для однородного электронного газа. Максимальное значение ELF = 1 отвечает идеальной локализации электронных пар.

Для монослоя кальция максимальное значение ELF = 0.95 (рис. 5, a). Это свидетельствует о сильной локализации электронной плотности в области связи Ca–Ga. Результаты, представленные на рис. 4, b, подтверждают выводы, сделанные из анализа изменения электронной плотности. Нестандартная конфигурация адсорбционных мест Mg приводит к несимметричной картине ELF (рис. 5, b): немного меньшему значению ELF = 0.88 и, следовательно, немного меньшей локализации электронов. Для более низкорасположенных атомов Mg ELF = 0.85.

Сравнение расчетов адсорбции магния и кальция на поверхности GaN(0001) показывает, что огромное влияние играет размер атомов адсорбата. Это приводит к различию адсорбционных мест, а также к локализации электронной плотности в интерфейсе.

4. Заключение

Проведенный расчет адсорбции монослоя кальция на Ga-полярной поверхности нитрида галлия GaN(0001)

позволил определить наиболее энергетически выгодную конфигурацию системы. Атомы кальция преимущественно адсорбируются в высокосимметричных позициях над атомами азота. Адсорбция монослоя Ca индуцирует пространственное перераспределение заряда. Наблюдается выраженный перенос электронной плотности в области интерфейса Ca/GaN(0001) и ее последующая локализация в области связи Ca−Ga. Продемонстрировано формирование зоны кальциевых состояний в окрестности и ниже уровня Ферми, а также трансформация зоны поверхностных состояний GaN. Изменения в приповерхностном слое нитрида галлия вызывают сдвиг края валентной зоны в область меньших энергий, что свидетельствует об изгибе зон вверх. Сравнение адсорбции атомов кальция и магния показало, что размер атома влияет на адсорбционные места и электронную структуру интерфейса адсорбат/GaN(0001).

Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] Z. Wang, G. Wang, X. Liu, S. Wang, T. Wang, S. Zhang, J. Yu, G. Zhao, L. Zhang. J. Mater. Chem. C, **9**, 17201 (2021). DOI: 10.1039/D1TC04022G

[2] R. Sun, J. Lai, W. Chen, B. Zhang. IEEE Access, **8**, 15529 (2020). DOI: 10.1109/ACCESS.2020.2967027

[3] M. Behringer, H. König. PhotonicsViews, **17**, 60 (2020). DOI:10.1002/phvs.202000018

[4] V.M. Bermudez. Surf. Sci. Rep., **72** (4), 147 (2017). DOI: 10.1016/j.surfrep.2017.05.001

[5] G.V. Benemanskaya, M.N. Lapushkin, S.N. Timoshnev. Surf. Sci., **603** (16), 2474 (2009). DOI: 10.1016/j.susc.2009.05.022

[6] Г.В. Бенеманская, С.Н. Тимошнев, С.В. Иванов, Г.Э. Франк-Камецкая, Д.Е. Марченко, Г.Н. Илуридзе. ЖЭТФ, **145** (4), 684 (2014). DOI: 10.7868/S0044451014040119. [G.V. Benemanskaya, S.N. Timoshnev, S.V. Ivanov, G.E. Frank-Kamenetskaya, D.E. Marchenko, G.N. Iluridze. J. Exp. Theor. Phys., **118** (4), 600 (2014). DOI: 10.1134/S1063776114040098].

[7] V.M. Bermudes. Surf. Sci., **417**, 30 (1998). DOI: 10.1016/S0039-6028(98)00659-1

[8] Y. Yang, S. Mishra, F. Cerrina, S.H. Xu, H. Cruguel, G.J. Lapeyre, J.F. Schetzina. J. Vac. Sci. Technol. B, **17** (4), 1884 (1999). DOI: 10.1116/1.590840

[9] Z. Cui, X. Wang, M. Li, J. Zheng, Y. Ding, T. Liu. Solid State Commun., **296**, 26 (2019). DOI: 10.1016/j.ssc.2019.04.01

[10] K.H. Yeoh, T.L. Yoon, T.-L. Lim, Rusi, D.S. Ong. Superlat. Microstruct., **130**, 428 (2019). DOI: 10.1016/j.spmi.2019.05.011

[11] M.A. Reshchikov, D.O. Demchenko, M. Vorobiov, O. Andrieiev, B. McEwen, F. Shahedipour-Sandvik, K. Sierakowski, P. Jaroszynski, M. Bockowski. Phys. Rev. B, **106**, 035206 (2022). DOI: 10.1103/PhysRevB.106.035206

[12] M.A. Reshchikov. Phys. Status Solidi B, **260**, 2200488 (2023). DOI: 10.1002/pssb.202200488

[13] Y. Wu, Z. Zhao, X. Hao, R. Xu, L. Li, D. Lv, X. Huang, Q. Zhao, Y. Wu. Carbon Neutralization, **2**, 551 (2023). DOI: 10.1002/cnl2.85

[14] М.Н. Лапушкин. Физ.-хим. аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов, **17**, 447 (2025). [M.N. Lapushkin. Phys. and chem. aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials, **17**, 447 (2025). DOI: 10.26456/pcascnn/2025.17.447 (In Russian)].

[15] J.P. Perdew, A. Zunger. Phys. Rev. B, **23**, (10), 5048 (1981). DOI: 10.1103/PhysRevB.23.5048

[16] L. Lymperakis, K. Lymperakis, E. Iliopoulos. J. Appl. Phys., **136** (21), 215701 (2024). DOI:10.1063/5.0240751

[17] G. Shukla, H.M. Abdullah, U. Schwingenschlögl. Nanoscale, **15** (37), 15161 (2023). DOI: 10.1039/d3nr04143c

[18] H. Jiang, T. Wang, Z. Zhang, F. Liu, R. Shi, B. Sheng, S. Sheng, W. Ge, P. Wang, B. Shen, B. Sun, P. Gao, L. Lindsay, X. Wang. Nature Commun., **15** (1), 9052 (2024). DOI:10.1038/s41467-024-53394-z

[19] J.M. Crowley J. Tahir-Kheli, W.A. Goddard. Phys. Chem. Lett., **7** (7), 1198 (2016).

[20] Á. Morales-García, R. Valero, F. Illas. J. Phys. Chem. C, **121** (34), 18862 (2017). DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b07421

[21] A.L. Rosa, J. Neugebauer. Phys. Rev. B, **73** (20), 205346 (20026). DOI: 10.1103/PhysRevB.73.205346

[22] J. Heyd, G.E. Scuseria, M. Ernzerhof. J. Chem. Phys., **118** (18), 8207 (2003). DOI: 10.1063/1.1564060

[23] J.L. Lyons, C.G. Van de Walle. NPJ Comput. Mater., **3** (1), 12 (2017). DOI: 10.1038/s41524-017-0014-2

[24] D.O. Nielsen, C.G. Van de Walle, S.T. Pantelides, R.D. Schrimpf, D.M. Fleetwood, M.V. Fischetti. Phys. Rev. B, **108** (15), 155203 (2023). DOI: 10.1103/PhysRevB.108.155203

[25] J. Hubbard. Proc. Royal Soc. (London) A, **276** (1365), 238 (1963). DOI:10.1098/rspa.1963.0204

[26] F. Tran, P. Blaha. Phys. Rev. Lett., **102** (22), 226401 (2009). DOI: 10.1103/PhysRevLett.102.226401

[27] L.G. Ferreira, M. Marques, L.K. Teles. Phys. Rev. B, **78** (12), 125116 (2008). DOI: 10.1103/PhysRevB.78.125116

[28] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, G.L. Chiarotti, M. Cococcioni, I. Dabo, A.D. Corso, S. de Gironcoli, S. Fabris, G. Fratesi, R. Gebauer, U. Gerstmann, C. Gougoussis, A. Kokalj, M. Lazzeri, L. Martin-Samos, N. Marzari, F. Mauri, R. Mazzarello, S. Paolini, A. Pasquarello, L. Paulatto, C. Sbraccia, S. Scandolo, G. Sclauzero, A.P. Seitsonen, A. Smogunov, P. Umari, R.M. Wentzcovitch. J. Phys.: Condens. Matter, **21** (39), 395502 (2009). DOI: 10.1088/0953-8984/21/39/395502

[29] K. Shiraishi. J. Phys. Soc. Jpn., **59** (10), 3455 (1990). DOI:10.1143/JPSJ.59.3455

[30] C. Bungaro, K. Rapcewicz, J. Bernholc. Phys. Rev. B, **59** (15), 9771 (1999). DOI: 10.1103/PhysRevB.59.9771

[31] P. Kempisty, S. Krukowski, P. Strak, P.K. Sakowski. J. Appl. Phys., **106** (5), 054901 (2009). DOI: 10.1063/1.3204965

[32] B. Silvi, A. Savin. Nature, **371**, 683 (1994). DOI:10.1038/371683a0

Редактор Г.А. Оганесян

Electronic structure and localization of electron density at the Ca/GaN(0001) monolayer interface

M.N. Lapushkin

Ioffe Institute,
194021 St. Petersburg, Russia

Abstract The adsorption of calcium atoms on the GaN(0001) surface was studied using the density functional method. GaN(0001) was modeled as a 2×2GaN(0001) supercell containing 10 GaN bilayers. With a monolayer coverage of calcium, Ca atoms are adsorbed above the surface N atoms. A zone of surface states of calcium is formed near the Fermi level. The interaction of calcium valence electrons with electrons of Ga dangling bonds leads to charge localization in the region of the Ca–Ga bond.