03,08

Адсорбция атомов калия на поверхности AlN(0001)

© М.Н. Лапушкин

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

E-mail: lapushkin@ms.ioffe.ru

Поступила в Редакцию 30 апреля 2025 г.
В окончательной редакции 7 июля 2025 г.
Принята к публикации 9 июля 2025 г.

Методом функционала плотности рассчитана адсорбция атомов калия на поверхности AlN(0001). 2D-слой AlN моделировался суперъячейкой AlN(0001) $2\times2\times2$, содержащей 10 бислоев AlN. Показано, что предпочтительна адсорбция атомов K в ямочной позиции и над поверхностными атомами N при покрытии 0.25 монослоя, и энергии адсорбции атомов K равны -1.51 eV и -1.53 eV, соответственно. При монослойном покрытии адсорбция атомов K предпочтительна над поверхностными атомами N, и энергии адсорбции атомов K равна -0.93 eV. Показано, что адсорбция атомов калия приводит к формированию поверхностных состояний, электронная плотность которых локализована вблизи уровня Ферми.

Ключевые слова: AlN, калий, адсорбция, электронная структура.

DOI: 10.61011/FTT.2025.07.61171.100-25

1. Введение

В XXI веке устройства, созданные с использованием тринитридов металлов, получают все большее распространение в различных областях электроники. Лидирующую роль остается за устройствами на основе GaN. Другие тринитриды металлов также не остаются без внимания ученых и производителей электронных устройств. AlN имеет высокую термическую стабильность, хорошие высокочастотные энергетические характеристики и большую запрещенную зону [1] чем у GaN, что обеспечивает его применение при создании устройств, которые работают в ультрафиолетовой области (УФ). Устройства на основе AlN позволяет создавать УФ излучающие фотодиоды, солнечно-слепые детекторы света, оптомеханические устройства и т.д. [1–6]. Перспективным направлением является использование полых наночастиц AlN, декорированных литием для хранения водорода [7,8]. Возможно создание батарей без использования лития [9].

Адсорбция щелочных металлов на поверхности меняет электронную структуру поверхности, что изменяет ее физико-химические свойства. Однако, расчетов адсорбции атомов щелочных металлов на поверхности AlN во много раз меньше, чем расчетов адсорбции атомов щелочных металлов на поверхности GaN [10]. Расчеты адсорбции атомов щелочных металлов на поверхности AlN проведены только для Li, Na и Cs. Адсорбция до-монослойных покрытий атомов Cs на поверхности AlN(0001), допированного атомом Si, рассчитана в [11]. 2D-слой AlN(0001) состоял из 6 бислоев AlN. Показано, что энергия адсорбции (E_{ads}) атомов цезия уменьшается с ростом цезиевого покрытия от -1.5 eV до -0.5 eV при увеличении покрытия от 0.25 монослоя (ML) до 1.0 ML, соответственно. Предпочтительным местом адсорбции атомов Cs при покрытии 0.25 ML является позиция над атомом N. Адсорбция атомов цезия приводит к небольшому сдвигу электронных состояний вниз, что указывает на изгиб зон вниз. В [8] был проведен расчет адсорбции атомов и ионов лития на поверхности гексагонального монослоя и зигзаг-нанотрубки AlN. Энергия адсорбции атомов лития незначительна и равна -0.32 eV и -0.05 eV на нанотрубке и монослое AlN, соответственно. Адсорбция ионов лития оказывается энергетически выгодной по сравнении с адсорбцией атомов Li, так как E_{ads} равна -1.22 eV и -1.16 eV на нанотрубке и монослое AlN, соответственно. В [12] рассчитана адсорбция атомов Li и Na на гексагональной монослойной 3×3 суперъячейке AlN. Энергия адсорбции в ямочной позиции была равна -1.51 eV и -0.83 eV для Li и Na, соответственно. Расчеты показали, что 2D-слой AlN можно использовать в качестве анода в литий-ионных и натрий-ионных аккумуляторах с теоретической емкостью 500 и 385 $\text{mA}\cdot\text{h}\cdot\text{g}^{-1}$, соответственно. В [13] рассчитана адсорбция атомов и ионов лития на поверхности нанотрубок AlN различного диаметра в целях моделирования литий-ионных батарей. Показано, что предпочтительна адсорбция лития на поверхности нанотрубок и энергия адсорбции уменьшается с увеличение диаметра нанотрубки. Энергия адсорбции атома Li порядка ~ 0.6 eV, энергия адсорбции иона Li составляет величину -1.7 eV. В [13] рассчитана адсорбция атома натрия на поверхности монослойной гексагональной 5×5 суперъячейке AlN. Энергия адсорбции атома Na порядка -0.16 eV. Энергия адсорбции иона Na получилась -1.65 eV. В [14] выполнен расчет адсорбции атома лития на гексагональном (h) монослое AlN и GaN. Найдено, что адсорбции лития предпочтительна в ямочной позиции и анергия адсорбции Li на h-AlN достигает величины -1.241 eV, а энергия адсорбции

лития на h-GaN получилась равной -1.684 eV. Показано, что энергия адсорбции лития на h-AlN равна -0.938 eV и -0.885 eV для адсорбции над атомом Al и N, соответственно.

В [8] выполнен так же расчет адсорбции атома лития на гексагональном монослое AlN. Найдено, что адсорбция лития на h-AlN предпочтительна в ямочной позиции и $E_{\text{ads}} = -1.27$ eV. Легированные поверхности AlN литием увеличивают энергию связи молекулы водорода с 0.14 eV до 0.20 V. Система демонстрирует высокую теоретическую молекулярную емкость хранения водорода равную 8.25 wt.%. В [15] исследована молекулярная емкость хранения водорода на поверхности полых наночастиц (nanocage) AlN, декорированных атомами лития. Показано, что энергия связи молекулы водорода уменьшается с размером наночастицы и декорирование литием поверхности полой наночастицы увеличивает энергию связи молекулы водорода, что приводит к увеличению молекулярной емкости с 4.7 wt.% до 9 wt.%. В [15] был проведен расчет диффузии атомов Li, Na и K по поверхности полой наночастицы (nanocage) $(\text{AlN})_{12}$.

Изучению адсорбции калия на AlN было уделено мало внимания. В [16,17] исследована адсорбция субмонослойных покрытий калия на поверхности AlN с помощью фотоэлектронной спектроскопии. Регистрировали изменения спектров валентной зоны и остовных уровней Al $2p$, N $1s$ и K $3p$. Для чистой поверхности AlN спектр валентной зоны представляет широкий пик без особенностей с максимумом на 4 eV ниже уровня максимума валентной зоны (E_{VBM}). Был выделен пик поверхностных состояний, расположенный на E_{VBM}. Адсорбция 0.9 ML калия приводит к подавлению пика поверхностных состояний и изменению спектра валентной зоны в области больших энергий связи с максимумом при 6.6 eV ниже E_{VBM}, что авторы статьи [16,17] объяснили образованием индуцированных поверхностных состояний.

Очевидно, что расчетам адсорбции атомов щелочных металлов на различных поверхностях AlN уделялось малое внимание и в них рассмотрена только адсорбция атомов лития, натрия и цезия на различных наноструктурах: от 2D-слоя AlN, включая монослойную гексагональную суперъячейку AlN, до нанотрубок и полых наночастиц AlN. До сих пор нет расчетов адсорбции атомов калия на поверхности AlN(0001), что позволило бы понять результаты экспериментального исследования этой адсорбционной системы. Поэтому была поставлена задача рассчитать электронную структуру 2D-слоя AlN(0001) в области валентной зоны и показать, как влияет адсорбция калия на электронную структуру 2D-слоя AlN(0001).

2. Детали расчета

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-Zunger (PZ) интерполяции [19]. 2D-слой AlN моделировался суперъячейкой (0001) $2\times2\times2$. 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 $4\times4\times1$ для всех 2D систем в этой статье.

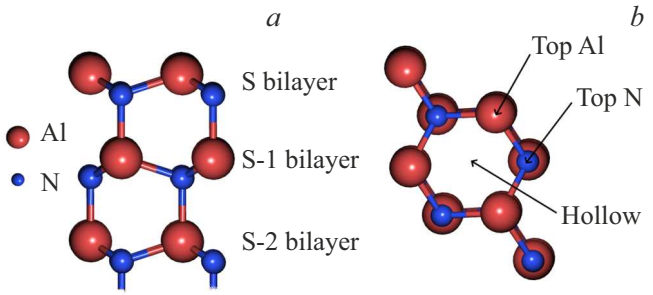

Рис. 1. *a*) 2D-слой AlN(0001): вид сбоку, показаны только три верхних бислоя AlN. Буквой S обозначен поверхностный бислой AlN. Нумерация слоев идет от поверхностного бислоя AlN. *b*) Адсорбционные места адатомов K на 2D-слое AlN: вид сверху. Красный шар — атом Al, синий шар — атом N. Стрелками показаны места адсорбции атомов K.

Энергия адсорбции атома калия и расстояние (h) между уровнем поверхностных атомов Al и плоскостью адсорбированных атомов K

Покрытие	0.25 ML		1.0 ML	
	E_{ads}, eV	h, Å	E_{ads}, eV	h, Å
hollow	-1.51	3.11	–	–
top Al	-1.42	3.08	-0.77	3.53
top N	-1.53	3.08	-0.93	3.09

AlN имеет структуру вюрцита с следующими параметрами решетки: $a = b = 3.219$ Å и $c = 5.017$ Å. Рассматривалось два случая адсорбции: в первом случае один атом K приходится на 4 поверхностных атома Al, а во втором случае 4 атома калия приходится на 4 поверхностных атома Al, что соответствует одному монослою (ML) атомов калия. Суперъячейка состоит из 10 бислоев AlN (рис. 1). Релаксации подвергались только 3 верхних бислоя AlN. Положение остальных бислоев AlN было зафиксировано, что было сделано для моделирования объема AlN. Связи атомов азота нижнего бислоя AlN были насыщены псевдоатомами водорода. Релаксация параметров суперъячейки осуществлялась до тех пор, пока модули сил не оказывались меньше 10^{-7} Ry/Bohr.

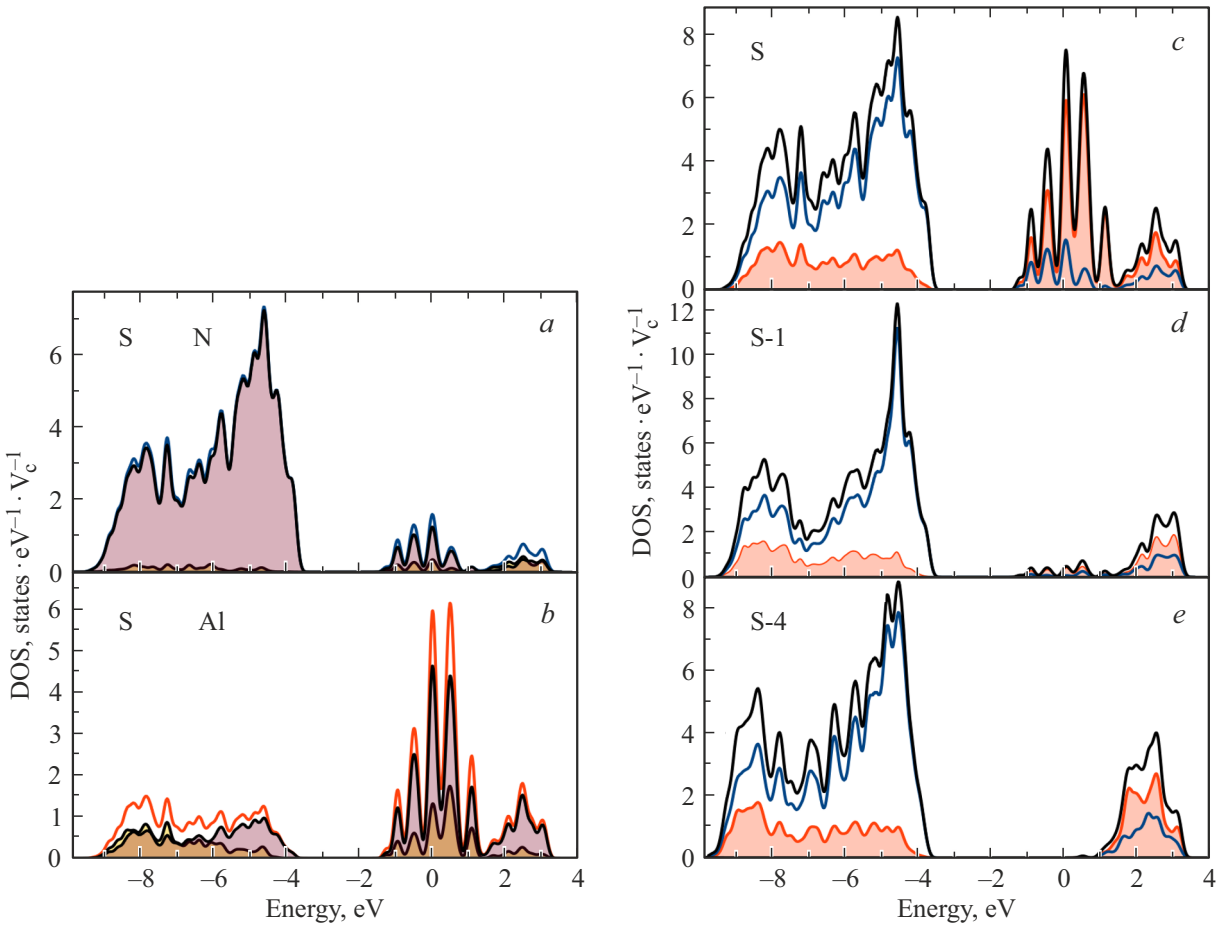

Рис. 2. Рассчитанные полные и парциальные плотности состояний 2D-слоя AlN(0001). Парциальные плотности состояний N (*a*) и Al (*b*) для поверхностного S бислоя AlN. Полная и парциальные плотности состояний для S (*c*), S-1 (*d*) и S-4 (*e*) бислоев AlN. V_c — объем элементарной ячейки. Полная плотность состояний: AlN — черный цвет, N — синий цвет. Парциальные плотности состояний: N 2*s* — желтый цвет с заливкой, N 2*p* — розовый цвет с заливкой, Al — красный цвет, Al 3*p* — розовая заливка и Al 3*s* — желтая заливка.

3. Результаты и обсуждение

Релаксация 2D-слоя AlN(0001) без адсорбата приводит к релаксации поверхностных слоёв относительно нерелаксированного 2D-слоя AlN(0001). Величину релаксации можно определить из следующего уравнения:

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

где Δ_{ij} — относительное изменение расстояния между i-тым и j-тым слоями атомов Al для релаксированного и нерелаксированного 2D-слоя. d_{0i} — расстояние между i-тым и j-тым слоем атомов Al для нерелаксированного 2D-слоя и d_{ij} — расстояние между между i-тым и j-тым слоем атомов Al для релаксированного 2D-слоя. Знак „–“ означает уменьшение расстояния. Найденная величина Δ_{12} слишком мала ($\Delta_{12} = -0.00095$), что указывает на практически те же межслоевые расстояния, как и в нерелаксированной части 2D-слоя.

Энергию адсорбции E_{ads} атомов K на поверхности AlN можно рассчитать из следующего уравнения:

$$E_{ads} = (E_{K/AlN} - E_{AlN} - n \cdot E_K)/n \qquad (2)$$

где $E_{K/AlN}$ и E_{AlN} — полные энергии поверхности с адсорбированным K и без него, E_K — полная энергия атома K, n — количество атомов K в элементарной ячейке (1 или 4).

Значения энергии адсорбции атомов K в трех позициях: ямочной (hollow), над поверхностным атомом Al (top Al) и над поверхностным атомом N (top N), а также расстояния между плоскостью, образованной центрами поверхностных атомов Al(N), и положением адсорбированного атома K, приведены в таблице. Полученные значения энергии адсорбции атомов калия близки к значениям энергии адсорбции других атомов щелочных металлов [11,12].

При адсорбции 0.25 ML атомов калия разница между энергиями адсорбции в положении hollow и top N незначительна и в обоих случаях образуется связь атома K

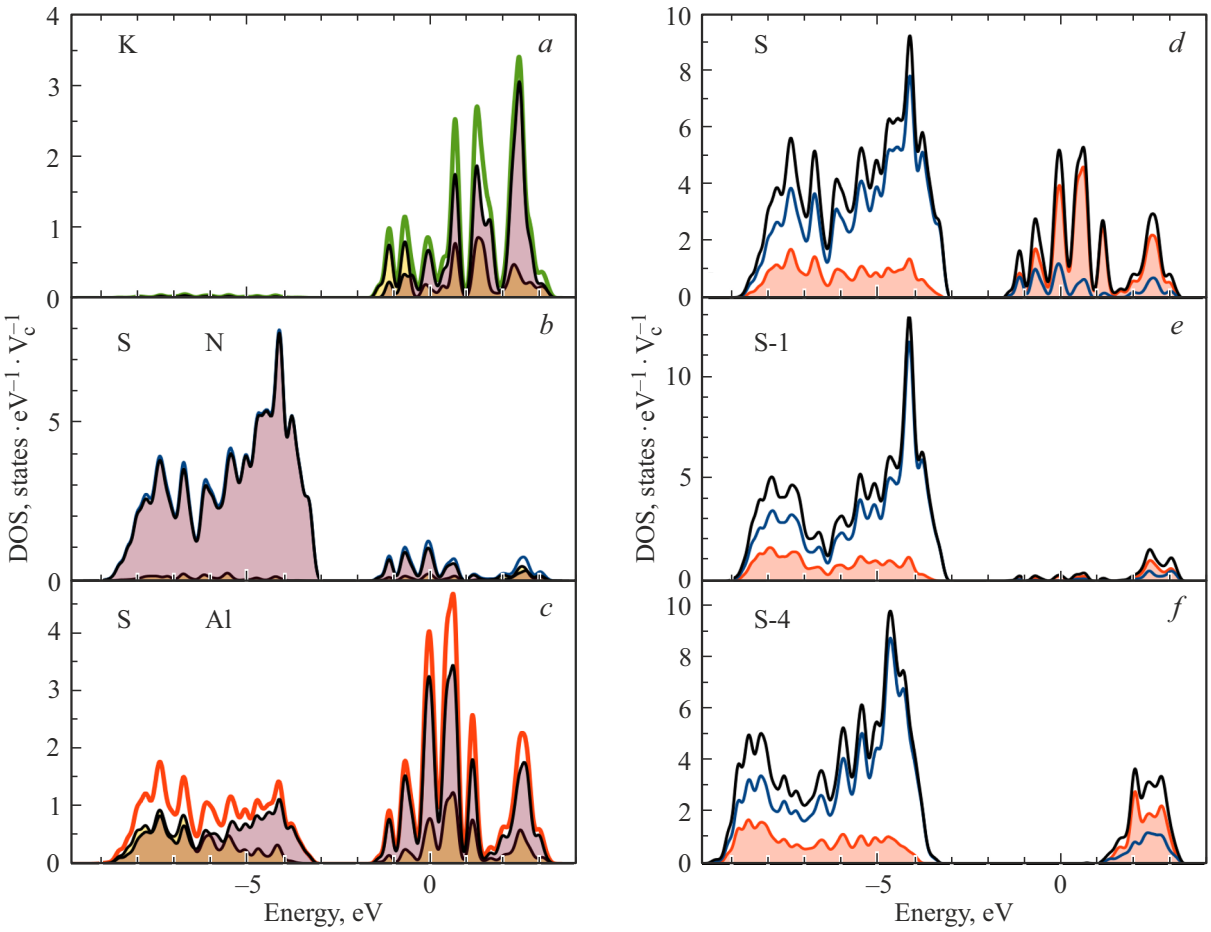

Рис. 3. Рассчитанные полные и парциальные плотности состояний 2D-слоя AlN(0001) в случае адсорбции 0.25 монослоя K над атомом N. Полная и парциальные плотности состояний K (*a*): полная плотность состояний — зеленый цвет и парциальные плотности состояний: K 4*s* — желтая заливка, K 4p — розовая заливка. Парциальные плотности состояний N (*b*) и Al (*c*) для поверхностного (S) бислоя AlN. Полная и парциальные плотности состояний для S (*d*), S-1 (*e*) и S-4 (*f*) бислоев AlN. V_c — объем элементарной ячейки. Полная плотность состояний — черный цвет, N — синий цвет, N 2*s* — желтый цвет с заливкой. Парциальные плотности состояний: N 2*p* — розовый цвет с заливкой, Al — красный цвет, Al 3*p* — розовая заливка и Al 3*s* — желтая заливка.

с тремя атомами алюминия. Адсорбция монослоя атомов калия предпочтительна над атомами N. Результаты других расчетов [11–14] показывают, что предпочтительными местами адсорбции являет top N или в ямочной позиции, что зависит от выбранного типа структуры AlN авторами работ. Уменьшение энергии адсорбции с ростом покрытия совпадает с результатами расчетов адсорбции атомов Cs на поверхности AlN(0001), допированного атомом Si [11].

Поверхность AlN не испытывает реконструкции поверхности, вызванной адсорбцией 0.25 ML атомов калия. Значение величины релаксации Δ_{12} поверхности имеет тоже значение, что и для чистой поверхности AlN.

Адсорбция 1.0 ML атомов калия приводит к небольшой реконструкции поверхности AlN, которая вызвана взаимодействием валентных электронов адсорбционной системы. Поверхностные атомы AlN (S бислое) сдвигаются вверх относительно случая адсорбции 0.25 ML атомов калия, и получено следующее значение для величины релаксации поверхности: $\Delta_{12} = -0.0037$.

На рис. 2 представлен расчет электронной плотности состояний (DOS — density of states) 2D-слоя AlN(0001. Для поверхностного бислоя (S) наблюдается зона занятых поверхностных состояний с максимумами при энергии -0.89 eV, -0.44 eV и 0.05 eV. Зона сформирована Al 3*s*, Al 3*p* и N 2*p*-состояниями с преобладанием Al состояний (рис. 2, *a*–*c*). Наличие зоны занятых поверхностных состояний указывает на металлизацию поверхности. Также имеется псевдо-щель между максимумом валентной зоны и дном зоны поверхностных состояний шириной 1.9 eV. Для бислоя S-1 происходит резкое падение электронной плотности поверхностных состояний ниже уровня Ферми, что указывает на пространственную локализацию поверхностных состояний (рис. 2, *d*). Широкая валентная зона сформирована в основном N 2*p*-состояниями со значительно меньшим

вкладом Al 3*s* и Al 3*p*-состояний, имеет два пика при -4.50 eV и -7.50 eV (рис. 2, *e*) и соответствует электронной структуре кристалла AlN с шириной запрещенной зоны 3.76 eV.

Валентная зона 2D-слоя AlN(0001) с двумя максимумами получена в [11], также два максимума в валентной зоне можно выделить и для *h*-AlN [15]. Полупроводниковый характер AlN получен в [11,15] при расчете *h*-AlN. Как показал анализ литературы, спектров валентной зоны AlN при использовании фотоэлектронной спектроскопии получено мало. В работе [20] приведены спектры валентной зоны при возбуждении гелиевой лампой. Для $h\nu = 40.8$ eV в этом спектре можно выделить максимум при -5 eV и особенность при -9 eV. В работах [16,17] при возбуждении $h\nu = 100$ eV наблюдался одиночный пик с максимумом на 4 eV ниже E_{VBM}. При данной энергии возбуждения зондируется поверхностный слой и ближайшие к нему слои. При больших энергиях возбуждения $h\nu = 1486.6$ eV и 1253.6 eV, при которых фотоэмиссия электронов происходит из глубины образца, показано наличие в валентной зоне двух пиков ниже E_{VBM} на -1.9 eV и -6.0 eV [21]. Эти значения близки к положению максимумов в валентной зоне для [S-4] бислоя (ниже E_{VBM} на -1.4 eV и -5.0 eV).

Различие между расчетом и экспериментальными данными может быть связано с тем, что реальная топография и стехиометрия поверхности AlN отличается от идеальной, для которой сделан настоящий расчет. Наличие на реальной поверхности различных дефектов поверхности может оказать влияние на полученные экспериментальные данные.

Результаты расчета электронной структуры системы K/AlN(0001) при покрытии калия 0.25 монослоя при адсорбции K над атомами N приведены на рис. 3. На рис. 3, *a* представлена зона поверхностных состояний калия, которая сформирована 4*s*- и 4*p*-состояниями. Видно три пика в области ниже уровня Ферми: -1.10 eV, -0.73 eV и -0.10 eV. Ширина псевдощели в бислое S уменьшается со значения 1.90 eV для чистой поверхности AlN до 1.22 eV после адсорбции калия.

Адсорбционная связь сформирована за счет взаимодействия валентных электронов калия с неспаренными электронами оборванных связей Al. Это взаимодействие приводит к значительному изменению электронной структуры поверхностного бислоя и меньшим изменениям в бислое S-1, что показано на рис. 3 *b*–*e*. Влияние адсорбированного калия становится незначительным уже для бислоя S-4 (рис. 3, *f*). В области поверхностных состояний AlN происходит сдвиг в сторону меньших энергий до 0.25 eV: максимумы расположены при -1.14 V, -0.70 eV и -0.05 eV. Область незанятых состояний изменяется незначительно. Претерпевает изменения и валентная зона: она сдвигается в сторону больших энергий на 0.4 eV. В S-1 бислое также происходит сдвиг поверхностных состояний ниже уровня Ферми в сторону меньших энергий до 0.40 eV. Изменение области незанятых состояний так же незначительно.

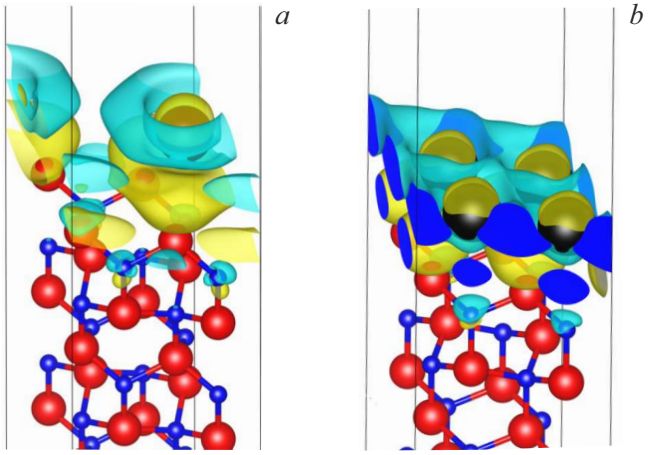

Рис. 4. Разность зарядовой плотности $\Delta\rho(r)$ после адсорбции калия в позиции над атомом азота для покрытия 0.25 монослоя калия (*a*) и монослоя калия (*b*). Области обеднения зарядовой плотности показаны голубым цветом, области аккумуляции зарядовой плотности показаны желтым цветом. Атомы азота — шары синего цвета, атомы алюминия — шары красного цвета, атомы калия — шары черного цвета. Синим цветом показан срез $\Delta\rho(r)$ на границе элементарной ячейки.

Валентная зона сдвигается в сторону больших энергий на 0.4 eV. Соответственно псевдо-щель уменьшается до значения 1.27 eV. Изменения электронной структуры S-4 бислоя малы: наблюдается сдвиг валентной зоны в сторону больших энергий на 0.18 eV и ширина запрещенной зоны становиться равной 3.64 eV.

Даже адсорбция в 4 раза меньшего количества атомов лития [15], чем в настоящем расчете, приводит к изменению валентной зоны h-AlN: в ней появляется много максимумов. В настоящей работе проводится расчет 2D-слоя, состоящего из 10 бислоев AlN, а в [15] всего один гексагональный монослой AlN, что приводит к отличающимся результатам. Очевидно, что для более тонких подложек влияние адсорбата на подложку больше, чем для толстых подложек. Как и в настоящей работе, в [15] найден пик адсорбата состояний лития на уровне Ферми. В [11] показано, что адсорбция атомов Li и Na на поверхности AlN приводит к формированию поверхностной зоны адсорбата на уровне Ферми. В настоящем расчете зона поверхностных состояний расположена на уровне Ферми, что указывает на металлизацию поверхности и эта зона находится при энергии большей, чем E_{VBM}, что отличается от результатов работы [16,17].

На рис. 4, *a* представлены разность зарядовой плотности $\Delta\rho(r)$ после адсорбции калия в позиции над атомом азота, которая вычислена из уравнения:

$$\Delta\rho(r) = (\rho_{\mathrm{K/AlN}}(r) - \rho_{\mathrm{AlN}}(r) - \rho_{\mathrm{K}}(r)) \qquad (3),$$

где зарядовая плотность $\rho_{\mathrm{K/AlN}}(r)$ — для слоя K/AlN(0001), $\rho_{\mathrm{AlN}}(r)$ — для слоя AlN(0001) и $\rho_{\mathrm{K}}(r)$ — для слоя K. Происходит аккумуляции заряда под атомом

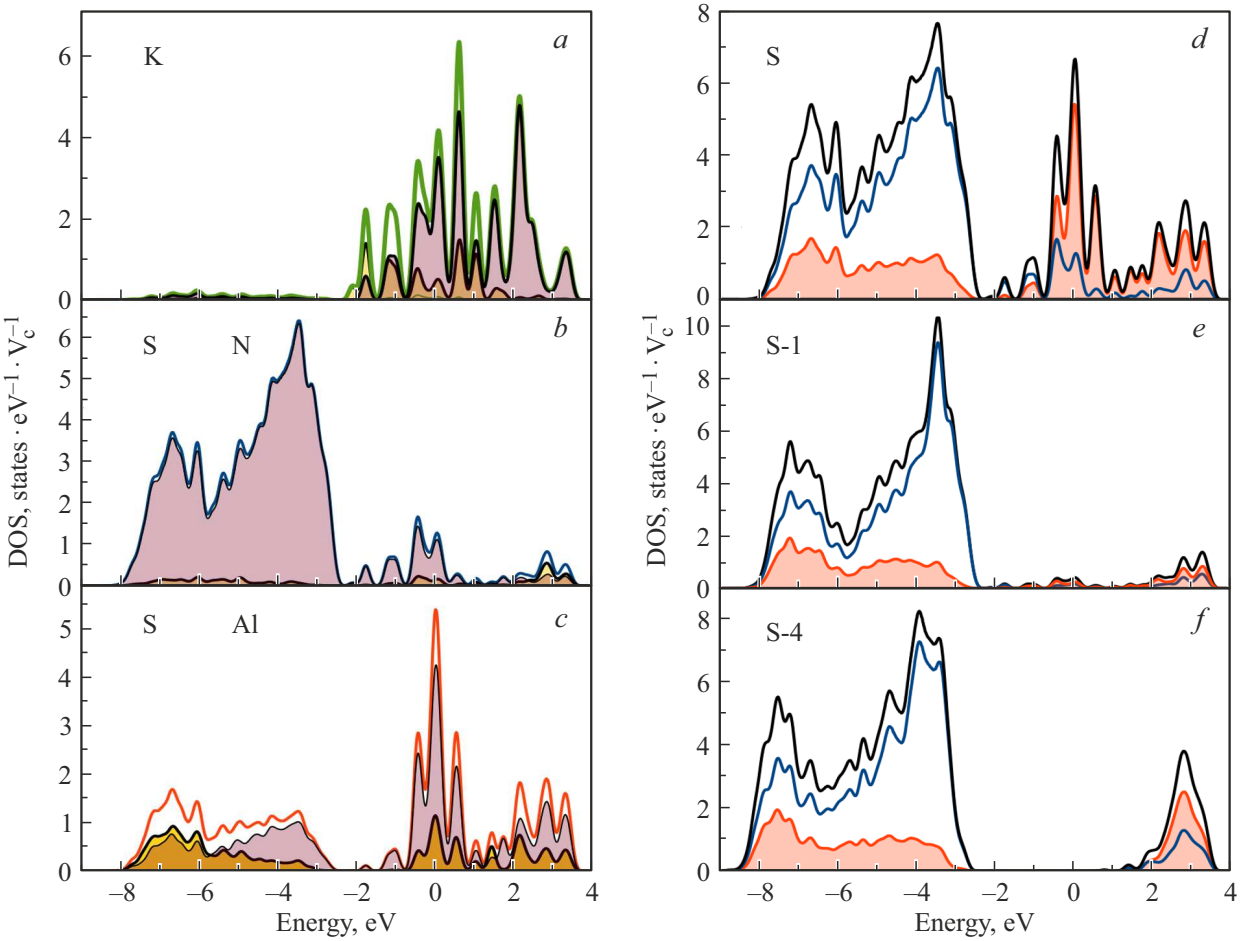

Рис. 5. Рассчитанные полные и парциальные плотности состояний 2D-слоя AlN(0001) в случае адсорбции монослоя K над атомом N. Полная и парциальные плотности состояний K (*a*): полная плотность состояний — зленый цвет, парциальные плотности состояний: K 4*s* — желтая заливка и K 4*p* — розовая заливка. Парциальные плотности состояний N (*b*) и Al (*c*) для поверхностного (S) бислоя AlN. Полная и парциальные плотности состояний для S (*d*), S-1 (*e*) и S-4 (*f*) бислоев AlN. V_c — объем элементарной ячейки. Полная плотность состояний — черный цвет и парциальные плотности состояний: N — синий цвет, N 2*s* — желтый цвет с заливкой, N 2*p* — розовый цвет с заливкой, Al — красный цвет, Al 3*p* — розовая заливка и Al 3*s* — желтая заливка.

калия и уход заряда из области атома калия, что указывает на образование связи между атомом калия и четырьмя атомами алюминия. Также наблюдается небольшие изменения $\Delta\rho(r)$ около атомов азота в поверхностном бислое. Похожий результат был получен при расчете адсорбции Li на h-AlN [15].

Результаты расчета электронной структуры системы K/AlN(0001) при покрытии одного монослоя калия при адсорбции K над атомами N приведены на рис. 5. На рис. 5, *a* представлена зона поверхностных состояний калия, которая сформирована 4*s*- и 4*p*-состояниями. Увеличивается электронная плотность в слое адсорбированного калия, а также происходит сдвиг электронной плотности в сторону меньших энергий, что приводит к увеличению электронной плотности ниже E_F. Пики поверхностных состояний сдвигаются в сторону меньших энергий: −1.76 eV, −1.16 eV и −0.52 eV. Адсорбционная связь сформирована за счет взаимодействия валентных электронов натрия с неспаренными электронами оборванных связей Al. Это взаимодействие приводит к значительному изменению электронной структуры поверхностного бислоя S и в бислое S-1, что показано на рис. 5, *b, e*.

Влияние адсорбированного монослоя калия становится значительным и для бислоя S-4 (рис. 5, *f*). В области поверхностных состояний подложки происходит сдвиг в сторону меньших энергий до 0.65 eV: максимумы расположены при −1.77 eV, 1.13 eV и −0.42 eV. Область незанятых состояний изменяется незначительно. Валентная зона сдвигается в сторону больших энергий на 0.65 eV. Ширина псевдо-щели в бислое S уменьшается до нуля после адсорбции монослоя атомов калия.

В S-1 бислое также происходит сдвиг поверхностных состояний ниже уровня Ферми и пики расположены практически при тех же значениях, что и в бислое S. Область незанятых состояний изменяется незначитель-

но. Валентная зона сдвигается в сторону больших энергий на 0.65 eV. Соответственно, псевдо-щель на поверхности уменьшается почти до нулевых значений. Также претерпевает изменения электронная структура S-4 бислоя: наблюдается сдвиг валентной зоны в сторону больших энергий на 0.65 eV и величина запрещенной зоны становиться равной 2.0 eV. Следовательно, адсорбция монослоя атомов калия приводит к значительным изменениям в электронной структуре 2D-слоя AlN на относительно большую глубину от поверхности.

Как видно из рис. 4, *b* происходит аккумуляции заряда под атомом калия и уход заряда из области атома калия, что указывает на образование связи между атомами калия и четырьмя атомами алюминия. Также наблюдается небольшие изменения $\Delta\rho(r)$ около атомов азота в поверхностном бислое AlN.

Нанесение монослоя атомов калия сильно изменяет электронную структуру между уровнем Ферми и максимумом валентной зоны в приповерхностных слоях AlN(0001), что дает возможность изменять электронные свойства поверхности AlN.

В настоящем расчете зона поверхностных состояний AlN на уровне Ферми при адсорбции монослоя калия мало меняется в отличие от результатов по выделению зоны поверхностных состояний в [16,17]. В [16,17] выделена зона индуцированных поверхностных состояний калия с максимумом на 6.6 eV ниже E_{VBM}. Отметим, что вклад в области валентных состояний в калиевом слое в случае расчета незначителен (рис. 5, *a*). Различия между расчётами и экспериментальными данными может быть связано с тем, что реальная топография и стехиометрия поверхности AlN отличается от идеальной, для которой сделан настоящий расчет. Наличие на реальной поверхности различных дефектов поверхности может оказать влияние на полученные экспериментальные данные. Также на экспериментальные результаты может оказывать влияние методика очистки поверхности.

4. Выводы

Впервые проведен расчет адсорбции атомов калия при двух покрытиях: 0.25 ML и 1.0 ML на поверхности 2D-слоя AlN(0001) методом функционала плотности. Показано, что при покрытии калия 0.25 ML энергия адсорбции практически одинакова для разных мест адсорбции: в ямочной позиции и над поверхностным атомом Al или N. Энергия адсорбции находится в диапазоне от -1.42 eV до -1.53 eV. Расстояние между атомом калия и слоем атомов Al равно 3.08 Å. Адсорбция атомов калия приводит к сдвигу зоны поверхностных состояний к меньшим энергиям. Также формируется зона поверхностных состояний калия ниже уровня Ферми. При монослойном покрытии атомы калия адсорбируются над атомами азота в поверхностном бислое AlN. Энергия адсорбции атомов K равна -0.93 eV. Адсорбция атомов калия приводит к дальнейшему уменьшению энергии поверхностных состояний AlN и калия. Адсорбция атомов калия приводит к аккумуляции зарядовой плотности над поверхностными атомами Al, что свидетельствует о формировании связи за счет взаимодействия валентных электронов калия с неспаренными электронами Al. Реальная топография и стехиометрия поверхности AlN отличается от идеальной поверхности, для которой сделан настоящий расчет, что привело к расхождению экспериментальных данных и расчётом.

Конфликт интересов

Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.

Список литературы

[1] H. Yang, J. Sun, H. Wang, H. Li, B. Yang. J. Alloys and Compounds, **989**, 174330 (2024). DOI: 10.1016/j.jallcom.2024.17433.

[2] R. Yu, G. Liu, G. Wang, C. Chen, M. Xu, H. Zhou, T. Wang, J. Yu, G. Zhaof, L. Zhang. J. Mater. Chem. C **9**, *6*, 1852 (2021). DOI: 10.1039/d0tc04182c

[3] N. Li, C.P. Ho, S. Zhu, Y.H. Fu, Y. Zhu, L. Yao, T. Lee. Nanophotonics **10**, *9*, 2347 (2021). DOI: 10.1515/nanoph-2021-0130

[4] S.D.T. Haider, M.A. Shah,, D.-G. Lee, S. Hur. IEEE Acess **11**, 58779 (2023). DOI: 10.1109/ACCESS.2023.3276716

[5] W. Fang, Q. Li, J. Li, Y. Li, Q. Zhang, R. Chen, M. Wang, F. Yun, T. Wang. Crystals, **13**, *6*, 915 (2023). DOI: 10.3390/cryst13060915

[6] S. Hagedorn, S. Walde, A. Knauer, N. Susilo, D. Pacak, L. Cancellara, C. Netzel, A. Mogilatenko, C. Hartmann, T. Wernicke, M. Kneissl, M. Weyers. Phys. Status Solidi A **217**, 1901022 (2020). DOI: 10.1002/pssa.201901022

[7] G. Wang, H. Yuan, A. Kuang, W. Hu, G. Zhang, H. Chen. Int. J. hydrogen energy **39**, *8*, 3780 (2014). DOI: 10.1016/j.ijhydene.2013.12.13

[8] Y.S. Wang, P.F. Yuan, M. Li, Q. Sun, Y. Jia. Chin. Phys. Lett. **28**, *11*, 116801 (2011) DOI: 10.1088/0256-307X/28/11/116801

[9] P. Weichi, L. Haiyang, Z. Xuejing, Z. Wenming, S. Ebrahimi. Phys. Lett. A **384**, *18*, 126396 (2020). DOI: 10.1016/j.physleta.2020.126396

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

[11] L. Liu, Y. Diao. Mater. Sci. Semicond. Processing **132**, 105899 (2021). DOI: doi.org/10.1016/j.mssp.2021.105899

[12] A. Sengupta. Appl. Surf. Sci. **451**. 141 (2018). DOI: 10.1016/j.apsusc.2018.04.264

[13] H. Anaraki-Ardakani. Phys. Lett. A. **381**, *11*, 1041 (2017). DOI: 10.1016/j.physleta.2017.01.010

[14] S. Sarikurt. Eskişehir Techn. Univer. J. Sci. Technol. A — Appl. Sci. Eng. 2019, **20**, *4*, 436 (2019). DOI: 10.18038/estubtda.513854

[15] S. Munsif, K. Ayub. J. Molec. Liq. **259**, 249 (2018). DOI: 10.1016/j.molliq.2018.03.009

[16] S.N. Timoshnev, G.V. Benemanskaya. Phys. Complex Syst. **3**, *1*, 21 (2022). DOI: 10.21883/SC.2022.06.53534.9821a

[17] G.V. Benemanskaya, S.N. Timoshnev, G.N. Iluridze, T.A. Minashvili. Semicond. **56**, *6*, 387 (2022). DOI: 10.33910/2687-153X-2022-3-1-21-24
[18] 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
[19] J.P. Perdew, A. Zunger. Phys. Rev. B **23**, *10*, 5048 (1981). DOI: 10.1103/PhysRevB.23.5048.
[20] V.M. Bermudez, T.M. Jung, K. Doverspike, A.E. Wickenden. J. Appl. Phys. **79**, *1*, 110 (1996). DOI: 10.1063/1.360917.
[21] G. Matin, S. Strite, A. Botchkarev, A. Agarwal, A. Rockett, H. Morkoç. Appl. Phys. Let. **65**, *5*, 610 (1994). DOI: 10.1063/1.112247

Редактор Т.Н. Василевская