

Адсорбция Au на W(100): расчет

Ю.А. Кузнецов, М.Н. Лапушкин

ФГБУН «Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук»
194021, Россия, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26

lapushkin@ms.ioffe.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.501

Аннотация: Методом функционала плотности проведен расчет адсорбции атомов золота на поверхности грани (100) вольфрама. В качестве подложки вольфрама была использовался 2D-слой атомов W. 2D-слой W моделировался суперъячейкой W(100) $2 \times 2 \times 2$. Расчет проводился для трех мест адсорбции атома Au на поверхности W(100): в ямочной позиции, в мостиковой позиции между поверхностными атомами W и над поверхностным атомом W. Один атом Au приходился на 8 поверхностных атомов W. Наиболее предпочтительно адсорбция атома Au в мостиковой позиции. Энергия адсорбции равна 4,18 эВ. Адсорбция атомов Au приводит к следующей реконструкции поверхности W: сдвиг атомов W в плоскости поверхности не превышает 0,18 Å, а сдвиг верхнего слоя атомов W составляет величину 0,022 Å в сторону объема W. Валентная зона 2D-слоя W(100) сформирована в основном W 5d электронами, с незначительным вкладом W 6s электронов. Адсорбция золота приводит к изменению спектра валентной зоны поверхностного слоя W.

Ключевые слова: электронная структура, адсорбция, интерфейс, золото, вольфрам.

1. Введение

Интерес к исследованиям поверхности Au вызван ростом исследований в области химии Au [1], с исследованиями свойств и применения наночастиц Au [2] и применением в микроэлектронике [3]. Известно, что Au – это недешевый материал, поэтому выгодно использовать тонкие пленки Au на поверхности различных подложек. Работа инициирована более ранними исследованиями, например, исследованиями формирования интерметаллических соединений золото-щелочной металл при напылении атомов щелочных металлов на поверхность 2D-слоя Au напыленного на W(100) [4-5].

В [6] методом термодесорбционной спектроскопии (TDS – thermal desorption spectroscopy) исследована адсорбция атомов Au на поверхности W(100) в широком диапазоне покрытий Au. Было показано, что в спектре термодесорбции наблюдается два пика: высокоэнергетический, который связан с формированием домонослойного покрытия Au и низкоэнергетический, который связан с формированием пленки Au. Энергия десорбции уменьшается с ростом покрытия золота: от 5,5 эВ для одиночной адсорбции до 3,90 эВ для монослойного (ML – monolayer) покрытия (θ). Также методом TDS исследована адсорбция атомов Au на поверхности W(100) в широком диапазоне θ и получены похожие результаты [7,8]. Энергия десорбции при дозе напыления Au 3,5 ML составляет 4,0 эВ. В [9] показано, что монослой Au соответствует

величине $1 \cdot 10^{15}$ ат./см². Адсорбция *Au* на *W*(100) происходит по механизму Фольмера – Вебера. В [10] показано, что при $\theta < 1$ ML слой *Au* растет эпитаксиально на *W*(100). При $\theta = 1$ ML *Au* регистрируется структура $p(1 \times 1)$, что сопровождается реконструкцией поверхности *W*(100). В [11] в рамках теории функционала плотности (DFT – density functional theory) проведен расчет электронной плотности для двух покрытий (0,25 и 1,0 ML) *Au* на *W*(110). Было показано, что предпочтительна адсорбция в ямочной (hcp-hollow) позиции и энергия адсорбции (E_{ads}) равна 3,48 эВ при покрытии 0,25 ML, а при покрытии 1,0 монослоя $E_{ads} = 3,54$ эВ. Нам неизвестны расчеты адсорбция атомов *Au* на поверхности *W*(100).

Целью данной работы было рассчитать электронную структуру адсорбированного *Au* на поверхности 2D-слоя *W*(100) и энергию связи атомов *Au*, что позволит определить предпочтительные места адсорбции атомов *Au* на поверхности *W*. Результаты работы позволят лучше понять процессы начальной стадии формирования 2D-слоя золота на поверхности вольфрама.

2. Методический раздел

Наши расчеты из первых принципов выполняются в DFT, реализованной в пакете QUANTUM ESPRESSO [12] с использованием обменно-корреляционного функционала с учетом обобщенных градиентных приближений (CGA – common gradient approximations) [13] в форме Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) [14]. Влияние ионных остовов учитывалось через сохраняющий норму псевдопотенциал [15]. Суперъячейка (100) $2 \times 2 \times 2$ была изготовлена с использованием графической программы с открытым исходным кодом BURAI-1.3 [16]. Вакуумный зазор между 2D-слоями был 18 Å, чтобы избежать влияния паразитных электрических полей. Ограничение кинетической энергии и ограничение плотности заряда были выбраны 50 Ry и 480 Ry. Использована гамма-центрированная сетка по *k*-точкам $4 \times 4 \times 1$ для всех 2D систем в этой статье. Сходимость составила $1 \cdot 10^{-6}$ Ry.

W имеет кубическую структуру с постоянной решетки 3,19 Å. Один атом *Au* приходится на 8 поверхностных атомов вольфрама. Суперъячейка состоит из трех 2D-слоев вольфрама. Релаксации подвергались все атомы суперъячейки вольфрама. В случае адсорбции атомов *Au* на релаксированной поверхности *W* релаксации подвергались только атомы поверхностного слоя (см. рис. 1, выделены синим). Положение остальных атомов *W* суперъячейки было зафиксировано, что было сделано для моделирования объема вольфрама. Стадия релаксации параметров ячейки суперъячейки длится до достижения давления менее 0,5 кбар. Перенос

заряда рассчитан по методу Бадера [16].

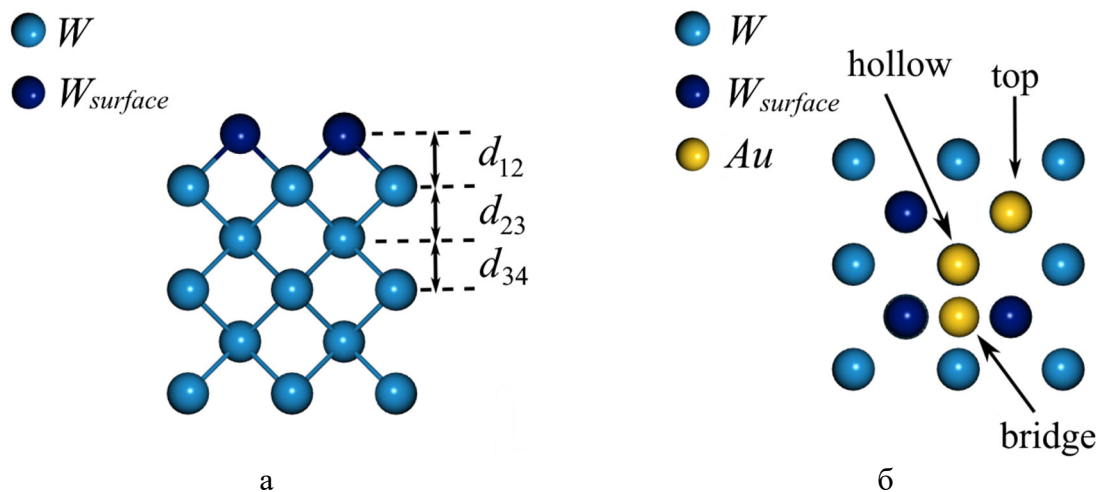


Рис. 1. 2D-слой W : вид сбоку (а). Положение адатомов Au на 2D-слое W : вид сверху (б). Синий шар – атом W , тёмно-синий шар – поверхностный атом W , желтый шар – атом Au . $W_{surface}$ – поверхностные атомы W . Поверхностный слой атомов имеет индекс – 1. d_{12} , d_{23} и d_{34} – соответственно расстояние между первым и вторым слоем, вторым и третьим слоем и третьим и четвертым слоями. Положение атомов Au на поверхности W в трех позициях: ямочной (hollow), мостиковой (bridge) и над поверхностным атомом вольфрама (top).

3. Результаты и обсуждение

Для чистой поверхности релаксированного 2D-слоя $W(100)$ была рассчитана релаксация поверхности относительно нерелаксированного 2D-слоя $W(100)$. Величину релаксации можно определить по следующей формуле:

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

где Δ_{ij} – относительное изменение расстояния между i -тым и j -тым слоями для релаксированной и нерелаксированной поверхности. d_{0ij} – расстояние между i -тым и j -тым слоем атомов для нерелаксированной поверхности и d_{ij} – расстояние между i -тым и j -тым слоем атомов для релаксированной поверхности. Знак « $\rightarrow$ » означает уменьшение расстояния. Получены следующие значения: $\Delta_{12} = -0,081$, $\Delta_{23} = -0,039$ и $\Delta_{34} = -0,024$. В работе [17] были получены близкие значения.

Была рассчитана энергия адсорбции (E_{ads}) атомов Au на поверхности вольфрама в трех позициях: ямочной (hollow), мостиковой (bridge) и над поверхностным атомом вольфрама (top) по следующей формуле:

$$E_{ads} = -(E_{Au/W} - E_W - E_{Au}), \quad (2)$$

где $E_{Au/W}$ и E_W – полные энергии поверхности с адсорбированным Au и без

него, E_{Au} – полная энергия атома Au . В Таблице 1 приведены расчетные значения энергии адсорбции атомов Au и расстояния между плоскостью, образованной центрами поверхностных атомов W , и положением адсорбированного атома Au приведены. Наиболее предпочтительной является адсорбция в мостиковой позиции. Отметим, что в ямочной позиции энергия адсорбции Au всего на 0,1 эВ меньше.

Таблица 1. Энергия адсорбции атома золота и расстояние между уровнем поверхностных атомов вольфрама и плоскостью адсорбированных атомов.

Позиции	E_{ads} , эВ	h , Å
bridge (мостиковая позиция)	4,18	2,04
hollow (ямочная позиция)	4,08	1,35
top (позиция над поверхностным атомом вольфрама)	2,91	2,51

В результате расчета получены большие значения E_{ads} атома Au на поверхности W . Полученное значение E_{ads} на 0,7 эВ больше значения E_{ads} , полученному в расчете для случая адсорбции Au в ямочной позиции типа hcp на $W(110)$ [11]. Проведенный расчет показывает, что адсорбция атомов Au на поверхности $W(100)$ возможна в двух позициях: мостиковой и ямочной в отличие от адсорбции атомов Au на поверхности $W(110)$, где предпочтительна ямочная позиция. Такое различие может при увеличении покрытия может приводить к различным механизмам роста золотой пленки на W : послойному росту $W(110)$ на и островковому на $W(100)$. Постоянная решетки W равна 3,19 Å, а постоянная решетки Au равна 4,17 Å, что может приводить при адсорбции к реконструкции поверхности. Наблюдается незначительная реконструкция поверхности W , вызванная адсорбцией атомов Au , в мостиковой позиции за счет взаимодействия электронных оболочек атомов адсорбата и адсорбента. Также для случая адсорбции атомов Au , в мостиковой позиции на релаксированной поверхности 2D-слоя W была рассчитана релаксация поверхности относительно релаксированного 2D-слоя $W(100)$. Получено следующее значение: $\Delta_{12} = -0,015$, что указывает на незначительность релаксации поверхности, вызванной адсорбцией атомов Au . Поверхностные атомы W , выделенные темно-синий цвет на рис. 1 б, сдвигаются вниз, и имеют сдвиг от атома Au на расстояние 0,22 Å по сравнению чистой поверхностью W , что и приводит к большому значению E_{ads} , за счет взаимодействия атома Au с двумя поверхностными атомами W .

Результаты расчета плотности состояний (DOS – density of states) чистой релаксированной поверхности 2D-слоя W на рис. 2. На рис. 2 а - 2 в представлена полная плотность состояний 2D-слоя W , а также

плотность состояний в поверхностном слое (см. рис. 1 а, выделены синими шарами) и приповерхностном слое. Валентная зона W сформирована $W 5d$ состояниями с примесью $W 6s$ состояний. В ней можно выделить 4 пика с энергий при -0,5, 2,1, 3,1 и 4,3 эВ, что совпадает с результатами, например, [18]. Для поверхностного слоя (см. рис. 2 а) имеется валентная зона также с четырьмя пиками, положение которых не сильно изменяется относительно DOS всего $2D$ -слоя W , но меняется их интенсивность. Эти состояния и являются поверхностными состояниями и поверхностными резонансами [21], которые должны принимать участие в формировании адсорбционных связей. Вид DOS валентной зоны для приповерхностного слоя близка к виду валентной зоны в объеме W . Результаты расчета совпадают с более ранними расчетами [17-19]. Поверхностные атомы W имеют избыточную электронную плотность равную 0,11 е.

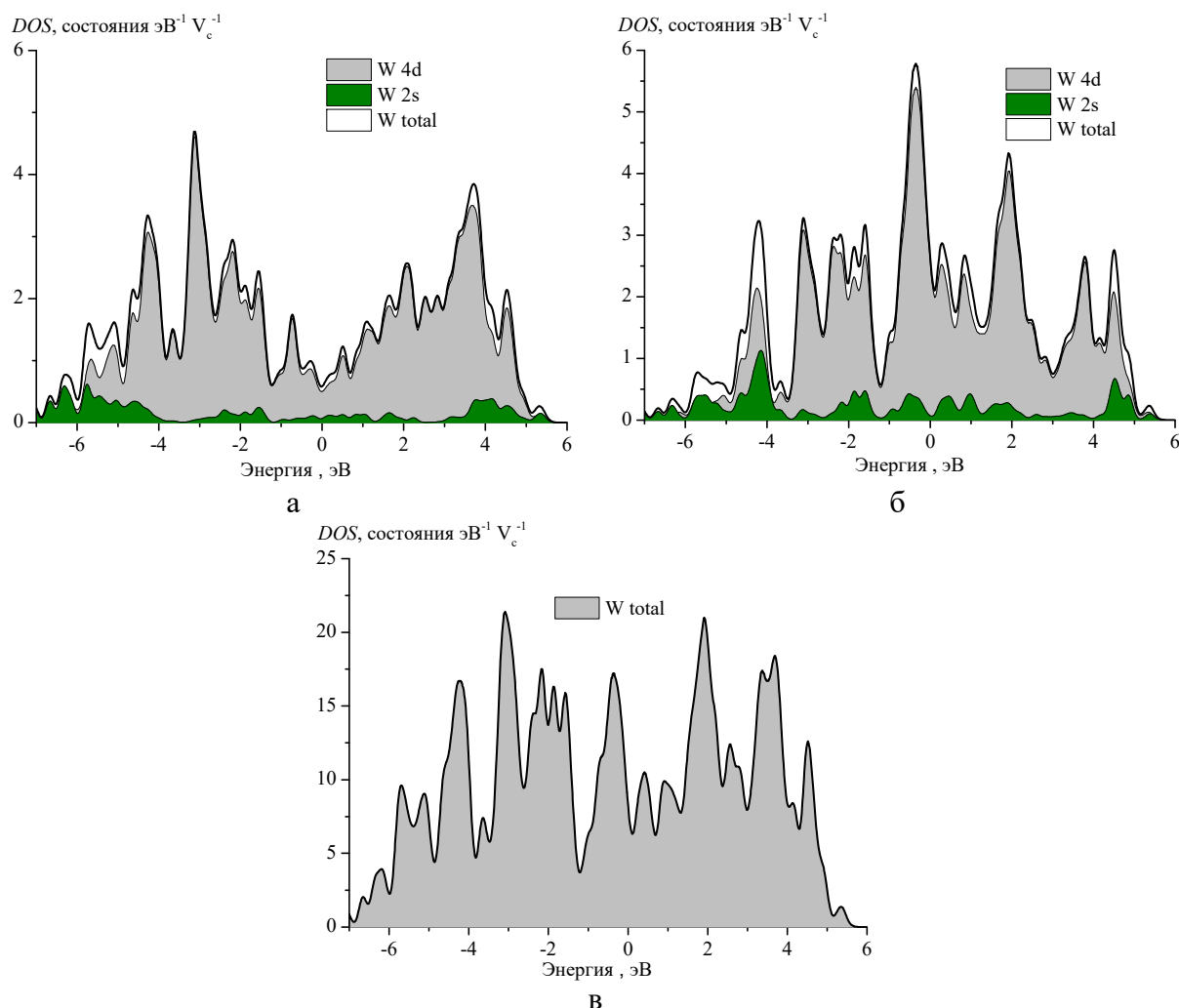


Рис. 2. Рассчитанная полная и парциальная плотность состояний $2D$ -слоя W . Полная плотность состояний (в), поверхностного слоя (а) и приповерхностного слоя (б). V_c – объем элементарной ячейки. Уровень Ферми соответствует 0 эВ.

Адсорбция *Au* приводит к существенным изменениям спектра валентной зоны поверхностного слоя *W*: ее вид становится более близким к виду приповерхностного слоя для 2*D*-слоя *W*. Наиболее ярко это проявляется в уменьшении интенсивности пика при -3,1 эВ и рост пика при 0,5 эВ. Это связано за счет взаимодействия валентных электронов золота с валентными электронами поверхностного слоя *W*. Валентная зона золотого слоя сформирована *Au 5d* и *Au 6s* электронами. Изменение общей плотности состояний системы *Au/W* незначительна, как и для системы *Au/Pt(111)* [20], что связано существенно меньшим количеством атомов *Au* по сравнению с числом атомов в 2*D*-слое *W*.

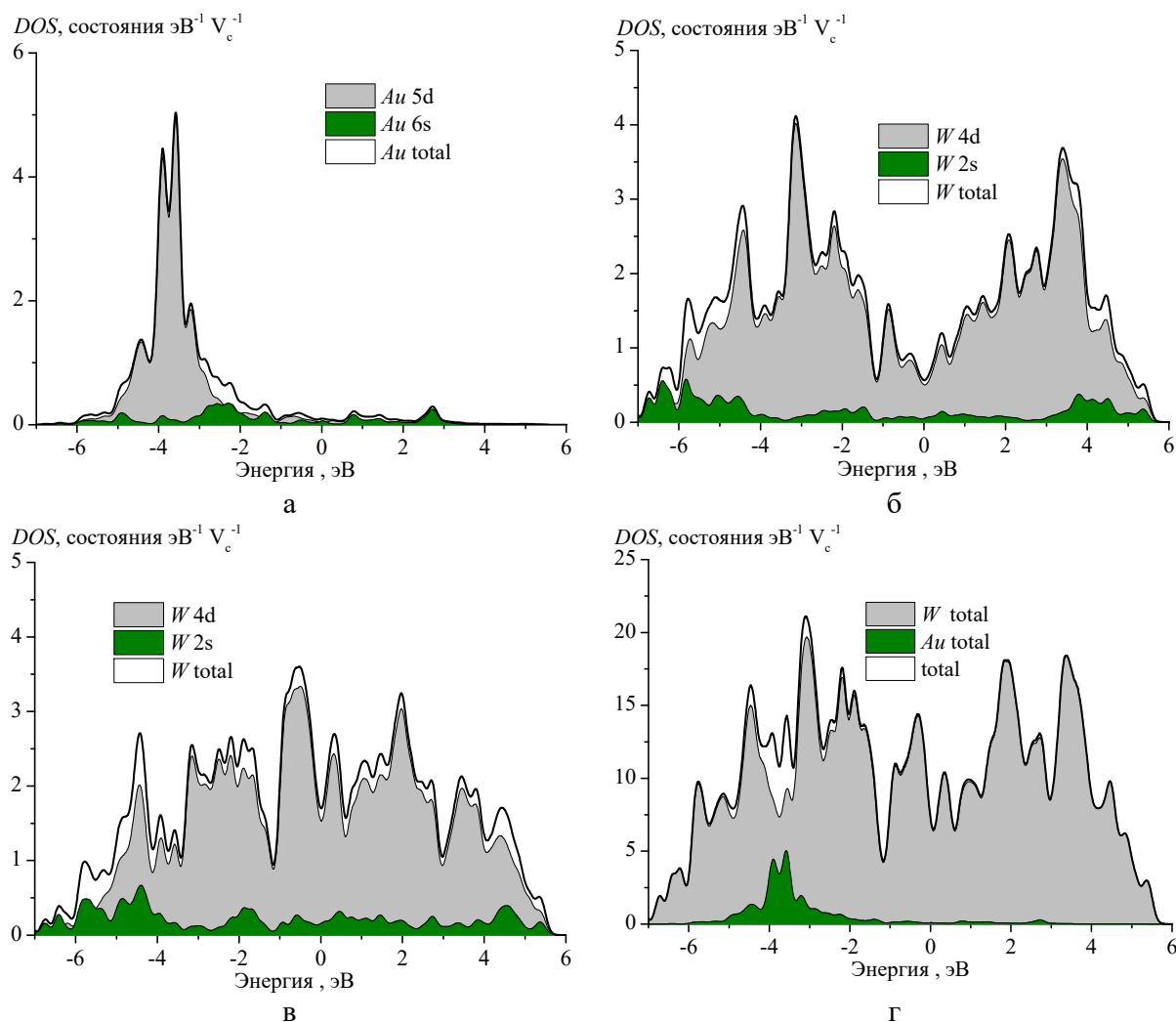


Рис. 3. Рассчитанная полная и парциальная плотность состояний 2*D*-слоя с адсорбированным слоем *Au* (а-г). Полная плотность состояний (г), слоя атомов *Au* (а) поверхностного слоя (б) и приповерхностного слоя (в). V_c – объем элементарной ячейки. Уровень Ферми соответствует 0 эВ.

Отметим, что вид *DOS* для слоя *Au/W(100)* качественно совпадает с

результатами [20] для системы $Au/Pt(111)$. Основной максимум при $-3,8$ эВ для слоя Au расположен как в системе $Au/W(100)$, так и в системе $Au/Pt(111)$. Адсорбция атомов Au приводит к перетеканию электронной плотности от поверхностных атомов W к атому Au . Заряд атома Au равен $-0,54$ е. Заряд атомов W в ряду, где адсорбирован атом Au уменьшается на $0,22$ е, атомов W в соседнем ряду на $0,07$ е.

4. Заключение

Проведен расчет адсорбции Au на поверхности $2D$ -слоя $W(100)$ методом функционала плотности. Показано, что для чистой поверхности наблюдается реконструкция поверхности $2D$ -слоя $W(100)$, что вызывает уменьшение расстояния между слоями по сравнению нерелаксированным $2D$ -слоем $W(100)$. Найдено, что предпочтительна адсорбция Au в мостиковой и ямочной позиции, энергия адсорбции в которых незначительно отличается. Энергия адсорбции атомов Au в мостиковой позиции равна $4,18$ эВ. Адсорбция атомов Au вызывает реконструкцию поверхности W . Валентная зона $2D$ -слоя $W(100)$ сформирована в основном $W 5d$ электронами, с незначительным вкладом $W 6s$ электронов. Адсорбция Au приводит к изменению спектра валентной зоны поверхностного слоя, а также перетеканию электронной плотности от поверхностных атомов W к атому Au .

Библиографический список:

1. **Herrera, R.P.** Main avenues in gold coordination chemistry / R.P. Herrera, M.C. Gimeno // *Chemical Reviews*. – 2021. – V. 121. – I. 14. – P. 8311-8363. DOI: 10.1021/acs.chemrev.0c00930.
2. **Dahan, K.A.** Recent progress of gold nanostructures and their applications / K.A. Dahan, Y. Li, J. Xu, C. Kan // *Physical Chemistry Chemical Physics*. – 2023. – V. 25. – I. 28. – P. 18545-18576. DOI: 10.1039/D3CP01549A.
3. **Ghobashy, M.** Gold nanoparticles in microelectronics advancements and biomedical applications / M.M. Ghobashy, S.A. Alkhursani, H.A. Alqahtani et al. // *Materials Science and Engineering: B*. – 2024. – V. 301. – Art. № 117191. – 37 p. DOI: 10.1016/j.mseb.2024.117191.
4. **Кузнецов, Ю.А.** Электронно-стимулированная десорбция атомов калия, адсорбированных на поверхности золота / Ю.А. Кузнецов, М.Н. Лапушкин // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. – 2020. – Вып. 12. – С. 836-844. DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.836.
5. **Dementev, P.A.** Effect of sodium atom adsorption on the electronic structure of a thin gold film / P.A. Dementev, E.V. Dementeva, M.N. Lapushkin, S.N. Timoshnev // *Thin Solid Films*. – 2024. – V. 794. – Art. № 140291. – 9 p. DOI: 10.1016/j.tsf.2024.140291.
6. **Bauer, E.** Thermal desorption of metals from tungsten single crystal surfaces / E. Bauer, F. Bonczek, H. Poppa, G. Todd // *Surface Science*. – 1975. – V. 53. – I. 1. – P. 87-109. DOI: 10.1016/0039-6028(75)90118-1.
7. **Агеев, В.Н.** Начальные стадии взаимодействия натрия и цезия с золотом / В.Н. Агеев, Е.Ю. Афанасьева // *Физика твердого тела*. – 2006. – Т. 48. – №. 12. – С. 2217-2222.
8. **Афанасьева, Е.Ю.** Адсорбция золота на окисленном вольфраме / Е.Ю. Афанасьева // *Журнал технической физики*. – 2013. – Т. 83. – №. 6. – С. 17-22.
9. **Bauer, E.** The adsorption and early stages of condensation of Ag and Au on W single-crystal surfaces / E. Bauer, F. Bonczek, H. Poppa, G. Todd // *Journal of Applied Physics*. – 1977. – V. 48. – I. 9. – P. 3773-3787.

DOI: 10.1063/1.324245.

10. Wertheim, G.K. Properties of epitaxial Au on W (100) / G.K. Wertheim, D.N.E. Buchanan, V. Lee // *Physical Review B*. – 1986. – V. 34. – I. 10. – P. 6869-6873. DOI: 10.1103/PhysRevB.34.6869.
11. Zhu, Q. Adsorption of precious and coinage metals on Rh (111), Ru (0001) and W (110) surfaces / Q. Zhu, S. Wang // *Applied Surface Science*. – 2017. – V. 410. – P. 282-290. DOI: 10.1016/j.apsusc.2017.03.121.
12. Giannozzi, P. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials / P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2009. – V. 21. – №. 39. – Art. № 395502. – 19 p. DOI: 10.1088/0953- 8984/21/39/395502.
13. Perdew, J.P. Generalized gradient approximation made simple / J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof // *Physical Review Letters*. – 1996. – V. 77. – I. 18. – P. 3865-3868. DOI: 10.1103/physrevlett.77.3865.
14. Troullier, N. Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations / N. Troullier, J.L. Martins // *Physical Review B*. – 1991. – V. 43. – I. 3. – P. 1993-2006. DOI: 10.1103/physrevb.43.1993.
15. Nishihara, S. BURAI 1.3 A GUI of Quantum ESPRESSO / S. Nishihara. – Режим доступа: www.url:https://nisihara.wixsite.com/burai. – 27.07.2024.
16. Bader, R.F.W. A quantum theory of molecular structure and its applications / R.F.W. Bader // *Chemical Reviews*. – 1991. – V. 91. – I. 5. – P. 893-928. DOI: 10.1021/cr00005a013.
17. Wang, H.Y. First-principles study on stability and electronic properties of W (001), W (110) and W (111) surfaces / H.Y. Wang, N. Wang, S. Zhang et al. // *Surface and Coatings Technology*. – 2013. – V. 229. – P. 55-59. DOI: 10.1016/j.surfcoat.2012.05.096.
18. Wimmer, E. All-electron local-density theory of alkali-metal bonding on transition-metal surfaces: Cs on W(001) / E. Wimmer, A.J. Freeman, J.R. Hiskes, A. M. Karo // *Physical Review B*. – 1983. – V. 28. – I. 6. – P. 3074-3091. DOI: 10.1103/PhysRevB.28.3074.
19. Yakovkin, I.N. DFT and Monte Carlo study of the W (001) surface reconstruction / I.N. Yakovkin, I.I. Yakovkin, N.V. Petrova // *The European Physical Journal B*. – 2017. – V. 90. – I. 1. – P. 1-11. DOI: 10.1140/epjb/e2017-80107-7.
20. Krupski, K. Structure determination of Au on Pt (111) surface: LEED, STM and DFT study / K. Krupski, M. Moors, P. Józwik et al. // *Materials*. – 2015. – V. 8. – I. 6. – P. 2935-2952. DOI: 10.3390/ma8062935.

References

1. Herrera R.P., Gimeno M.C. Main avenues in gold coordination chemistry, *Chemical Reviews*, 2021, vol. 121, issue 14, pp. 8311-8363. DOI: 10.1021/acs.chemrev.0c00930.
2. Dahan K.A., Li Y., Xu J., Kan C. Recent progress of gold nanostructures and their applications, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2021, vol. 25, issue 28, pp. 18545-1857. DOI: 10.1039/D3CP01549A.
3. Ghobashy M.M., Alkhursani S.A., Alqahtani H.A., El-damhougy T.K., Madani M. Gold nanoparticles in microelectronics advancements and biomedical applications, *Materials Science and Engineering: B*, 2024, vol. 301, art. no. 117191, 37 p. DOI: 10.1016/j.mseb.2024.117191.
4. Kuznetsov Yu.A., Lapushkin M.N. Elektronno-stimulirovannaya desorbtsiya atomov tseziya, adsorbirovannykh na poverkhnosti zolota [Electron-stimulated desorption of potassium atoms adsorbed on the surface of gold], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2020, issue 12, pp. 836-844. DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.836. (In Russian).
5. Dementev P.A., Dementeva E.V., Lapushkin M.N., Timoshnev S.N. Effect of sodium atom adsorption on the electronic structure of a thin gold film, *Thin Solid Films*, 2024, vol. 794, art. no. 140291, 9 p. DOI: 10.1016/j.tsf.2024.140291.
6. Bauer E., Bonczek F., Poppa H., Todd G. Thermal desorption of metals from tungsten single crystal surfaces, *Surface Science*, 1975, vol. 53, issue 1, pp. 87-109. DOI: 10.1016/0039-6028(75)90118-1.
7. Ageev V.N., Afanas'eva E.Yu. Initial stages of the interaction of sodium and cesium with gold, *Physics of the Solid State*, 2006, vol. 48, issue 12, pp. 2347-2353. DOI: 10.1134/S1063783406120171.
8. Afanas'eva E.Yu. Adsorption of gold on oxidized tungsten, *Technical Physics*, 2013, vol. 58, issue 6, pp. 793-798. DOI: 10.1134/S1063784213060029.
9. Bauer E., Poppa H., Todd G., Davis P.R. The adsorption and early stages of condensation of Ag and Au on W single-crystal surfaces, *Journal Applied Physics*, 1977, vol. 48, issue 9, pp. 3773-3787. DOI: 10.1063/1.324245.
10. Wertheim G.K., Buchanan D.N.E., Lee V. Properties of epitaxial Au on W(100), *Physical Review B*, 1986, vol. 34, issue 10, pp. 6869-6873. DOI: 10.1103/PhysRevB.34.6869.
11. Zhu Q., Wang S. Adsorption of precious and coinage metals on Rh (111), Ru (0001) and W (110) surfaces, *Applied Surface Science*, 2017, vol. 410, pp. 282-290. DOI: 10.1016/j.apsusc.2017.03.121.
12. Giannozzi, P., Baroni S., Bonini N. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for

- quantum simulations of materials, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2009, vol. 21, no. 39, art. no. 395502, 19 p. DOI: 10.1088/0953-8984/21/39/395502.
13. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple, *Physical Review Letters*, 1996, vol. 77, issue 18, pp. 3865-3868. DOI: 10.1103/physrevlett.77.3865.
14. Troullier N., Martins J.L. Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations, *Physical Review B*, 1991, vol. 43, issue 3, pp. 1993-2006. DOI: 10.1103/physrevb.43.1993.
15. Nishihara S. BURAI 1.3 A GUI of Quantum ESPRESSO. Available at: <https://nishihara.wixsite.com/burai> (accessed 27.07.2024).
16. Bader R.F. A quantum theory of molecular structure and its applications, *Chemical Reviews*, 1991, vol. 91, issue 5, pp. 893-928. DOI: 10.1021/cr00005a013.
17. Wang H.Y. Wang N. Zhang S. et al. First-principles study on stability and electronic properties of W(001), W(110) and W(111) surfaces, *Surface and Coatings Technology*, 2013, vol. 229, pp. 55-59. DOI: 10.1016/j.surfcoat.2012.05.09.
18. Wimmer E., Freeman A.J., Hiskes J.R., Karo A.M. All-electron local-density theory of alkali-metal bonding on transition-metal surfaces: Cs on W(001), *Physical Review B*, 1983, vol. 28, issue 6, pp. 3074-3091. DOI: 10.1103/PhysRevB.28.3074.
19. Yakovkin I.N., Yakovkin I.I., Petrova, N.V. DFT and Monte Carlo study of the W (001) surface reconstruction, *The European Physical Journal B*, 2017, vol. 90, issue 1, pp. 1-11. DOI: 10.1140/epjb/e2017-80107-7.
20. Krupski K., Moors M., Jóźwik P. et al. Structure determination of Au on Pt (111) surface: LEED, STM and DFT study, *Materials*, 2015, vol. 8, issue 6, pp. 2935-2952. DOI: 10.3390/ma8062935.

Original paper

Au adsorption on W(100): calculation

Yu.A. Kuznetsov, M.N. Lapushkin

Ioffe Institute, St.Petersburg, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.501

Abstract: The adsorption of gold atoms on the surface of the (100) tungsten face was calculated using the density functional method. A 2D layer of W atoms was used as a tungsten substrate. The 2D layer of W was modeled by a W(100) 2×2×2 supercell. The calculation was carried out for three sites of adsorption of the Au atom on the W(100) surface: in the hollow position, in the bridge position between the surface W atoms and on top the surface W atom. There was one Au atom per 8 surface W atoms. Adsorption of the Au atom in the bridge position is most preferable. The adsorption energy is 4,18 eV. Adsorption of Au atoms leads to the following reconstruction of the W surface: the shift of W atoms in the surface plane does not exceed 0,18 Å, and the shift of the upper layer of W atoms is 0,022 Å towards the volume of W. The valence band of the 2D W(100) layer is formed mainly W 5d electrons, with a minor contribution from W 6s electrons. Adsorption of gold leads to a change in the spectrum of the valence band of the tungsten surface layer.

Keywords: *electronic structure, adsorption, interface, gold, tungsten.*

Кузнецов Юрий Александрович – научный сотрудник ФГБУН «Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук»

Лапушкин Михаил Николаевич – к.ф.-м.н., доцент по специальности, старший научный сотрудник ФГБУН «Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук»

Yurij A. Kuznetsov – Researcher, Ioffe Institute

Mikhail N. Lapushkin – Ph. D., Docent, Senior Researcher, Ioffe Institute

Поступила в редакцию/received: 07.08.2024; после рецензирования/revised: 13.09.2024; принята/accepted: 18.09.2024.