

МОДЕЛИРОВАНИЕ АДСОРБЦИИ ВОДОРОДА НА НАНОЧАСТИЦЕ МЕДИ, НАНЕСЕННОЙ НА ПОДЛОЖКУ ГРАФИТА С РАЗЛИЧНЫМИ ДЕФЕКТАМИ

© 2022 г. Н. В. Дохликова^{1*}, А. К. Гатин¹, С. Ю. Сарвадий¹,
С. А. Озерин¹, Е. И. Руденко¹, М. В. Гришин¹, Б. Р. Шуб¹

¹Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова
Российской академии наук, Москва, Россия

*E-mail: dohlikovanv@gmail.com

Поступила в редакцию 02.09.2020;

после доработки 09.10.2021;

принята в печать 20.10.2021

Квантовохимическое моделирование наночастиц меди на подложках графита с различными дефектами показало более сильное снижение плотности состояний атомов меди при адсорбции водорода вблизи интерфейса по сравнению с аналогичной адсорбцией вдали от него. Также установлено, что в целом влияние подложки на атомную и электронную структуры наноразмерной системы меди менее выражено по сравнению с наноразмерной системой золота.

Ключевые слова: теория функционала плотности, наночастицы, медь, водород, графит, адсорбция, квантовохимическое моделирование, сканирующая туннельная микроскопия и спектроскопия.

DOI: 10.31857/S0207401X22070044

ВВЕДЕНИЕ

Медь давно активно используется в различных областях промышленности благодаря хорошей электро- и теплопроводности. Помимо традиционных способов применения меди ее также начали использовать для синтеза сверхпроводников [1] и в качестве катализатора полимеризации ацетилена [2].

Уникальные физико-химические свойства меди делают ее перспективной основой для разработки различных функциональных наноразмерных материалов. Достаточно распространенный тип таких материалов представляет собой пленку из наночастиц металлов, нанесенных на химически инертные подложки [3, 4]. Структурированные на наноуровне покрытия такого вида могут обладать гибкими и управляемыми свойствами [5, 6], поскольку оказывается возможным варьировать не только элементный состав наночастиц и подложек [7, 8], но и многие другие параметры [9, 10].

Многие вопросы о микроскопических механизмах гетерогенных каталитических реакций в таких многокомпонентных системах до сих пор остаются открытыми. Однако в некоторых случаях взаимодействие наночастицы с подложкой можно упростить, разделив вклады от изменения атомной структуры наночастицы и от изменения ее заряда вследствие разности энергий Ферми свободной наночастицы и подложки [11]. При этом необходи-

мо помнить, что эти процессы взаимосвязаны и вводятся лишь для более ясной интерпретации результатов, а также прогнозирования свойств новых наноразмерных систем.

В настоящей работе исследовались физико-химические свойства структурированной на наноуровне пленки меди на графите. Электронную структуру наночастиц меди, как благородного металла, удобно представлять в рамках модели центра d -зоны [12]. Преимуществом графитовой подложки является не только хорошо определенная структура и химическая инертность, но и возможность ее модификации с помощью различных дефектов как одно-, так и многоатомных, которые также оказывают влияние на атомную и электронную подсистемы нанесенной наночастицы [13].

Исследование адсорбционных свойств такой системы на примере атома Н актуально не только в прикладном, но и в фундаментальном смысле, поскольку атом Н является типичным модельным объектом при исследовании адсорбции [14]. Например, в работе [15] с помощью теории функционала плотности (ТФП) исследована адсорбция H_2 и Н на плоскости Fe(111), модифицированной атомами Cu. Показано, что адсорбционная способность такой системы может быть ослаблена благодаря перетеканию электронов с Fe на Cu, т.е. каталитическую активность реакций, связанных с во-

дородом, можно регулировать допированием Си. Подобная каталитическая реакция, а именно реформинг этанола, исследована в работе [16] с использованием ТФП. В качестве катализаторов были выбраны металлические кластеры Pt, Си и Rh. Установлено, что на кластерах Си разрыв связи С—С сопряжен с большими энергетическими затратами. В работе [17] методами ТФП исследована роль Си в коммерческом катализаторе высокотемпературного водогазового сдвига. Установлено, что между металлическими частицами Си и носителем оксида железа возникает синергический эффект, в результате которого формируются каталитически активные центры. Исследование окисления наночастиц Си [18] показало, что наночастицы меньшего размера обладают большей тенденцией к окислению, однако при этом не обнаружено монотонного перехода от меньшей степени окисления к большей.

В наших предыдущих работах с помощью кластерной модели исследовалось влияние графитовой подложки на адсорбцию атомов Н на наночастицах, моделируемых кластерами Au₁₃. В работе [19] для имитации воздействия подложки графита использована наноразмерная чешуйка графена, а в работе [20] с помощью двух чешуек графена разного размера, расположенных параллельно друг другу, смоделирован обрыв графитовой плоскости. Физико-химические свойства золота и меди имеют довольно много сходств из-за похожего строения внешних электронных оболочек, однако медь, как более легкий элемент, активнее участвует в химических процессах, что также подтверждают эксперименты, проведенные с помощью сканирующей туннельной микроскопии и спектроскопии (СТМ/СТС) [21].

В настоящей работе исследовано влияние графитовой подложки, в том числе и с дефектами, на адсорбционные свойства нанесенной наночастицы Си в периодических условиях. Рассмотренные поверхностные дефекты включали в себя: одноатомную вакансию, поворот связи С—С на 90° или дефект 5/7, обрывы плоскостей графена типов “кресло” и “зигзаг”. Также было исследовано влияние подвижности атомов Си на взаимодействие с атомом Н, для чего расчеты проводились при условии фиксированного и незакрепленного положения атомов Си.

МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЙ

Моделирование системы, имитирующей наночастицу Си, нанесенную на графитовую подложку, проводили с использованием теории функционала электронной плотности (ТФП) в периодических условиях. Модель подложки представляла собой две графеновые плоскости, содержащие по шесть краевых атомов с каждой стороны. Расстояние между плоскостями графена после оптимиза-

ции атомной структуры с варьированием параметров ячейки равнялось 4.34 Å. Величина вакуумного зазора над верхней плоскостью графена составляла 14.5 Å.

В данном исследовании рассматривались следующие дефекты подложки: вакансия одиночного атома углерода, дефект 5/7, обрывы плоскости графена типов “зигзаг” и “кресло”. Во всех случаях атомная структура верхней плоскости графена была дополнительно оптимизирована без варьирования параметров ячейки для устранения напряжений в структуре при соблюдении единообразия размеров расчетной ячейки.

В качестве исходной модели наночастицы Си использовали 13-атомный икосаэдрический изомер кластера Си. Атомную структуру кластера рассчитывали при фиксированном положении всех атомов подложки. Поскольку данная работа посвящена исследованию изменений электронной структуры адсорбционного комплекса под влиянием подложки, полученная наноразмерная система Си—графит, соответствующая локальному энергетическому минимуму, удовлетворяет поставленным задачам. Ожидаемо, что кластеры в системах с обрывом плоскости графита подвергаются большему воздействию, из-за чего их атомная структура испытывает значительную трансформацию, особенно в системе с обрывом плоскости типа “кресло” (табл. 1). На кластеры Au большее влияние оказывал обрыв плоскости типа “зигзаг”. Изменения в системах с графитом без дефектов, с одноатомной вакансией и дефектом 5/7 гораздо менее выраженными. Кластеры Си обладают большей тенденцией к связи своих атомов между собой в самом кластере, чем к связи с подложкой, по сравнению с кластерами Au, поэтому их атомная структура изменяется меньше. Согласно данным СТМ/СТС-экспериментов, наночастицы и золота и меди обладают тенденцией к концентрации на границах террас графита, что соответствует полученным результатам квантовохимического моделирования [21].

Анализ заселенности по Малликену и построение распределений электронной плотности системы Си—графит показали накопление небольшого количества положительного заряда на подсистеме Си в отличие от системы Au—графит, где на золоте происходило накопление отрицательного заряда [22]. Взаимное влияние кластеров друг на друга исследовано с помощью тестовых расчетов с варьированием размеров ячейки, т.е. расстояния между кластерами. Эти расчеты показали, что взаимное влияние кластеров в условиях наших расчетов пренебрежимо мало.

Моделирование атомной и электронной структур проводили с использованием свободных программных пакетов Quantum Espresso (QE) [23] и OpenMX (OMX) [24]. Для расчета электронной

Таблица 1. Величины энергии связей 13-атомных кластеров Cu с подложками графита без дефекта (1) и с дефектами: одноатомной вакансией (2), дефектом 5/7 (3), с обрывом плоскости графена типа “кресло” (4) и обрывом плоскости графена типа “зигзаг” (5)

Подложка	Энергия связи, эВ
1	-0.17
2	-0.39
3	-0.19
4	-1.31
5	-1.01

структуры использовано приближение LDA в ультрамягком псевдопотенциале, взятом из стандартной библиотеки псевдопотенциалов программного пакета QE. Данные условия расчета были выбраны в соответствии с тестовыми вычислениями, которые показали лучшую сходимости по электронной подсистеме при выбранных параметрах. Радиусы обрезания псевдопотенциалов атомов системы выбраны с учетом рекомендованных в документации файлов псевдопотенциалов. Наборы атомно-центрированных базисных функций взяты из документации к программному пакету OMX.

Места адсорбции атомов водорода в системе (ниже для них будет использован термин “сайт”) определялись как при фиксированном, так и при незакрепленном положениях атомов Cu, что было необходимо для исследования влияния подвижности атомов меди на энергию связи с водородом. Для каждой системы проводили моделирование различных сайтов: нескольких – в окрестности границы медный кластер – графит и одного – на вершине кластера вдали от интерфейса. Для кластера Cu на бездефектной подложке графита и подложке графита с дефектом 5/7 исследованы два сайта адсорбции: s1 – на вершине кластера, s2 – на интерфейсе. Для кластера Cu на подложке графита с одноатомной вакансией исследованы три сайта адсорбции: s1 – на вершине кластера, s2, s3 – на интерфейсе вокруг кластера.

Для кластера меди на краях оборванных плоскостей графита обоих типов были исследованы по два сайта адсорбции – s1, s2. Поскольку при взаимодействии с обрывом типа “кресло” атомная структура кластера Cu претерпела значительные изменения, адсорбция была исследована для сайтов на интерфейсе. Трансформация атомной структуры кластера Cu на обрыве типа “зигзаг” меньше, поэтому для такой системы были исследованы сайты на вершине, s1, и на интерфейсе, s2. Примеры типичных сайтов приведены на рис. 1.

Расчет изменения спроектированной плотности состояний отдельных атомов вблизи сайта адсорбции атома H является важной частью исследования, поскольку позволяет провести сопоставление результатов экспериментов с использованием СТМ/СТС и моделирования. Для получения более

подробной информации отдельно изучено поведение s- и d-орбиталей атомов Cu. В предыдущих работах мы показали, что именно состояния в окрестности уровня Ферми вносят основной вклад в изменение туннельного тока при СТС-зондировании [19, 20]. При небольших значениях напряжения смещения, U , туннельный ток, I , будет определяться только плотностью состояний образца:

$$I(U) = \text{const} M \rho_{\text{tip}}(0) \int_{-eU}^0 \rho_{\text{sample}}(\epsilon) d\epsilon. \quad (1)$$

Здесь: M – усредненное значение матричного элемента перекрытия волновых функций зонда и атомов поверхности, $\rho_{\text{tip}}(0)$ – аппроксимированное значение плотности состояний зонда вблизи уровня Ферми, $\rho_{\text{sample}}(\epsilon)$ – локальная плотность состояний образца, ϵ – собственные значения энергии.

Заметим, что влияние адсорбции на распределение плотности поверхностных состояний хорошо известно [11]. В СТМ/СТС-экспериментах при адсорбции H на беспримесных наночастицах меди происходила перестройка электронного строения последних, полностью аналогичная процессам на золоте в тех же условиях [21].

КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

В табл. 2, 3, 4 приведены значения энергии и длины связи для сайтов адсорбции атома H при фиксированном и незакрепленном положениях атомов Cu в системах с подложкой без дефекта, подложкой с дефектом одноатомной вакансии и подложкой с дефектом 5/7 соответственно. Определено, что подвижность атомов Cu влияет на энергию связи Cu–H не так сильно, как подвижность атомов Au [22], причем для сайтов на интерфейсе влияние подвижности наименее заметно (табл. 2, 3, 4). Появление дефектов (одноатомной вакансии и 5/7) практически не усиливает влияния подвижности атомов меди. Моделирование адсорбции атомов H на подложке без дефектов показало, что величины энергий связи на интерфейсе и на вершине различаются значительно,

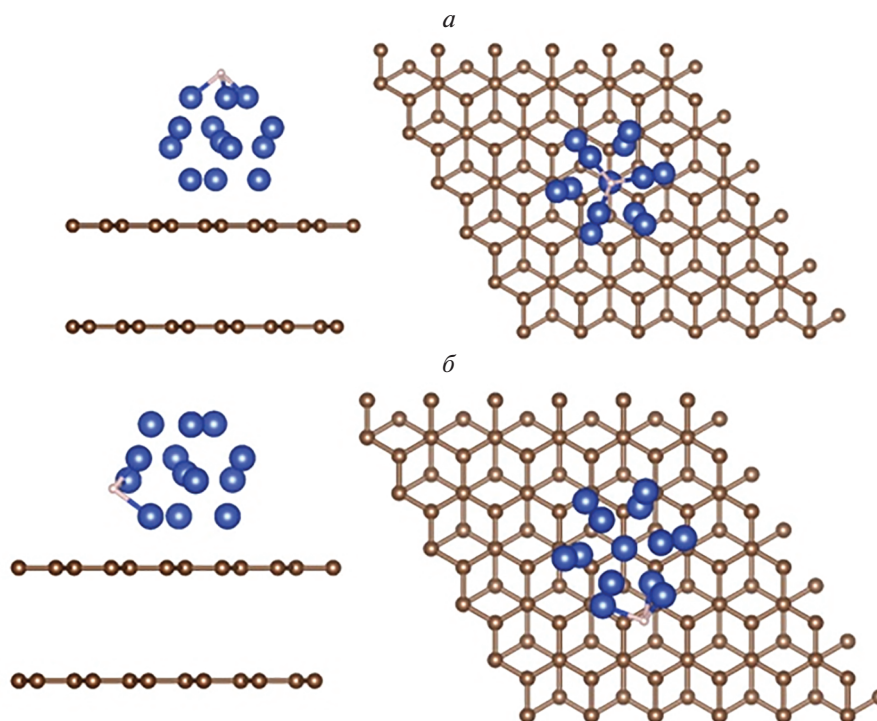


Рис. 1. Примеры выбранных сайтов адсорбции атома Н на плоскости графита: *a* – на вершине кластера Cu_{13} на подложке без дефектов, *б* – вблизи интерфейса Cu_{13} –графит на подложке без дефектов; слева – вид сбоку, справа – вид сверху.

$\sim 0.6\text{--}0.8$ эВ, причем на интерфейсе Cu –графит энергия связи больше (табл. 2). Для систем с дефектами разность между значениями энергии связей сайтов на вершине и на интерфейсе намного меньше, $\sim 0.1\text{--}0.3$ эВ (табл. 3, 4). Во всех этих системах также величина энергии связи на интерфейсе больше, чем на вершине. Можно предположить, что в данном случае это связано именно с влиянием подложки, так как поверхность кластера в целом сохраняет свою однородную структуру, как в свободном кластере.

На рис. 2 приведены кривые, иллюстрирующие рассчитанные спроектированные плотности состояний s - и d -орбиталей атомов Cu различных сайтов адсорбции атома Н в трех системах: с без-

дефектным графитом, графитом с одноатомной вакансией и графитом с дефектом 5/7. Для краткости на рисунке показаны два типа сайтов: один – на вершине и один – на интерфейсе для каждой подложки соответственно. Расчет показал, что плотность состояний во всех описанных выше системах вблизи уровня Ферми образована s -орбиталями, а “зона” d -орбиталей расположена ниже по энергии, как и в свободных 13-атомных кластерах [25] (рис. 2). Изменения плотности состояний на сайтах на вершине и сайтах на интерфейсе сильно различаются. В первом случае происходит сдвиг плотности состояний d -орбиталей вниз, а плотность состояний s -орбиталей практически не меняется. Во втором – происходят сдвиг плотности

Таблица 2. Энергия $E_{\text{св}}$ и длина связи $R_{\text{св}}$ для сайтов адсорбции атома Н на кластере Cu_{13} на бездефектной подложке при фиксированном и незакрепленном положениях атомов Cu

Сайт	Положение атомов		$\Delta E_{\text{св}}, \text{эВ}$	
	фиксированное	незакрепленное		
s1 (на вершине)	$E_{\text{св}}, \text{эВ}$	–3.25	–3.42	–0.17
	$R_{\text{св}}, \text{Å}$	1.76; 1.74; 1.75	1.76; 1.75; 1.78	
s2 (на интерфейсе)	$E_{\text{св}}, \text{эВ}$	–4.00	–4.08	–0.08
	$R_{\text{св}}, \text{Å}$	1.73; 1.81; 1.69	1.71; 1.73; 1.77	

Таблица 3. Энергия $E_{\text{св}}$ и длина связи $R_{\text{св}}$ для сайтов адсорбции атома Н на кластере Cu_{13} на подложке с одноатомной вакансией при фиксированном и незакрепленном положениях атомов Си

Сайт	Положение атомов			$\Delta E_{\text{св}}$, эВ
	фиксированное		незакрепленное	
s1 (на вершине)	$E_{\text{св}}$, эВ	–4.00	–3.83	0.17
	$R_{\text{св}}$, Å	1.65; 1.64;	1.71; 1.83; 1.73	
s2 (на интерфейсе)	$E_{\text{св}}$, эВ	–4.04	–4.13	–0.09
	$R_{\text{св}}$, Å	1.71; 1.73; 1.74	1.75; 1.73; 1.70	
s3 (на интерфейсе)	$E_{\text{св}}$, эВ	–4.01	–4.06	–0.05
	$R_{\text{св}}$, Å	1.76; 1.74; 1.75	1.75; 1.73; 1.76	

Таблица 4. Энергия $E_{\text{св}}$ и длина связи $R_{\text{св}}$ для сайтов адсорбции атома Н на кластере Cu_{13} на подложке графита с дефектом 5/7 при фиксированном и незакрепленном положениях атомов Си

Сайт	Положение атомов			$\Delta E_{\text{св}}$, эВ
	фиксированное		незакрепленное	
s1 (на вершине)	$E_{\text{св}}$, эВ	–3.98	–4.17	–0.19
	$R_{\text{св}}$, Å	1.64; 1.68;	1.68; 1.78; 1.80	
s2 (на интерфейсе)	$E_{\text{св}}$, эВ	–3.99	–4.06	–0.07
	$R_{\text{св}}$, Å	1.71; 1.89; 1.69	1.81; 1.72; 1.71	

Таблица 5. Энергия $E_{\text{св}}$ и длина связи $R_{\text{св}}$ для сайтов адсорбции атома Н на кластере Cu_{13} на подложке графита с обрывом плоскости типа “кресло” при фиксированном и незакрепленном положениях атомов Си

Сайт	Положение атомов			$\Delta E_{\text{св}}$, эВ
	фиксированное		незакрепленное	
s1 (на вершине)	$E_{\text{св}}$, эВ	–3.94	–4.07	–0.13
	$R_{\text{св}}$, Å	1.76; 1.76; 1.72	1.76; 1.80; 1.67	
s2 (на интерфейсе)	$E_{\text{св}}$, эВ	–3.90	–4.08	–0.18
	$R_{\text{св}}$, Å	1.84; 1.66; 1.77	1.80; 1.71; 1.80	

состояний d -орбиталей вниз и снижение плотности состояний s -орбиталей. В целом это не противоречит экспериментальным данным о трансформации вольт-амперных характеристик туннельного контакта между нанесенными на графит наночастицами меди и зондом сканирующего туннельного микроскопа при адсорбции водорода [21]. Имеется сходство с изменениями плотности состояний в наноразмерных системах с кластером Au [22]: близость подложки усиливает снижение плотности состояний, однако наличие дефектов никак не влияет на этот эффект.

В табл. 5, 6 представлены значения энергии и длины связей для сайтов адсорбции атома Н при фиксированном и незакрепленном положениях атомов Си в системах с подложками графита с об-

рывами плоскостей типов “кресло” и “зигзаг” соответственно. Тенденция влияния подвижности на энергию связи такая же, как и в ранее исследованных системах с одноатомными дефектами. Для системы с обрывом плоскости типа “зигзаг” энергия связи на интерфейсе больше, чем на вершине, ~ 0.5 – 0.6 эВ. Энергии связей сайтов на интерфейсе обрыва плоскости типа “кресло” различаются не сильно. В отличие от аналогичных систем с кластером Au атом Н при адсорбции формирует связь с атомами Си, а не “мостиковую” связь с атомом углерода и металла.

На рис. 3 приведены кривые, иллюстрирующие рассчитанные спроектированные плотности состояний s - и d -орбиталей атомов Си различных сайтов адсорбции атома Н в двух системах с обры-

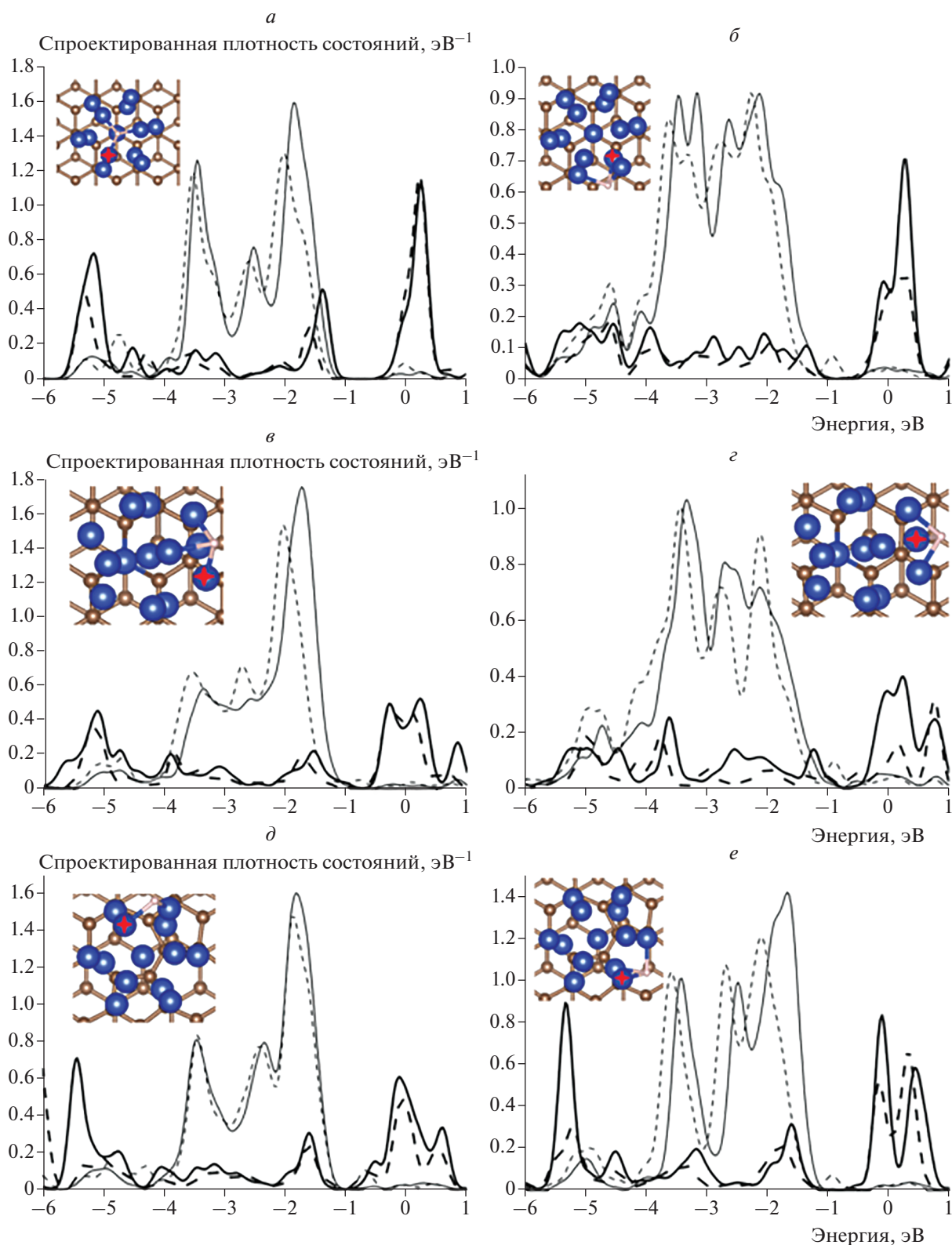


Рис. 2. Спроектированные плотности состояний d -орбиталей (тонкая линия), s -орбиталей (толстая линия) атомов Cu; сплошная линия – до адсорбции атома H, штриховая линия – после адсорбции атома H. Сайты на бездефектном графите: a – на вершине, b – на интерфейсе; сайты на графите с вакансией: v – на вершине, z – на интерфейсе; сайты на графите с дефектом 5/7: d – на вершине; e – на интерфейсе. На вставках приведены атомные структуры кластеров Cu_{13} на подложке графита (вид сверху). Атомы Cu, для которых рассчитывались спроектированные плотности состояний, отмечены крестиком.

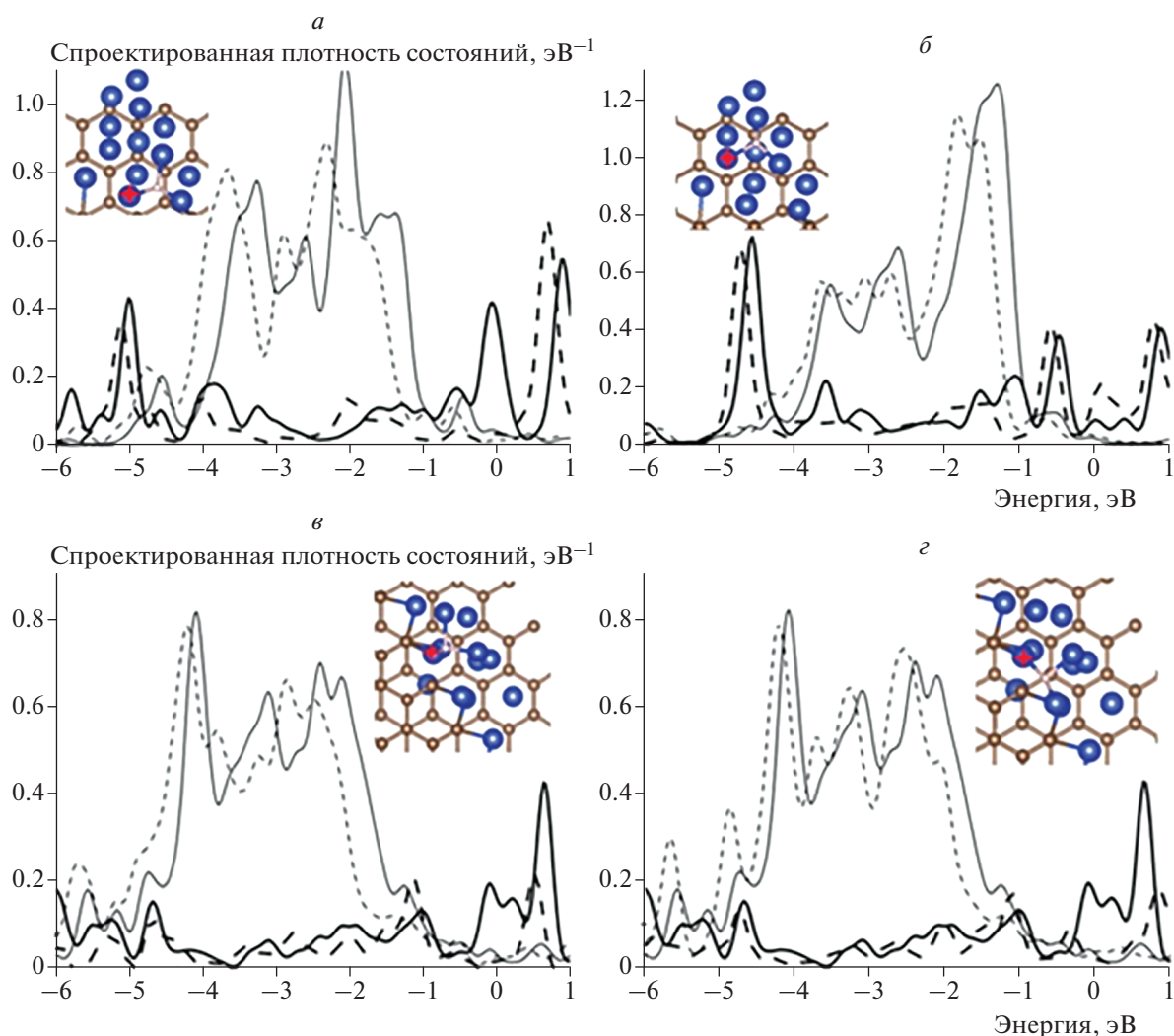


Рис. 3. Спроектированные плотности состояний d -орбиталей (тонкая линия), s -орбиталей (толстая линия) атомов Cu; сплошная линия – до адсорбции атома H, штриховая линия – после адсорбции атома H. Сайты на обрыве плоскости графена типа “зигзаг”: a – на вершине, $б$ – на интерфейсе; сайты на обрыве плоскости графена типа “кресло”: $в$ – на вершине, $г$ – на интерфейсе. На вставках приведены атомные структуры кластеров Cu_{13} на подложке графита (вид сверху). Атомы Cu, для которых рассчитывались спроектированные плотности состояний, отмечены крестиком.

вами плоскостей графена типов “кресло” и “зигзаг”. Для краткости представлены четыре сайта: по одному – на вершине и на интерфейсе для подложек с обрывами плоскостей обоих типов.

Распределение плотностей состояний атомов Cu на обрывах плоскостей графита обоих типов меняется намного меньше, чем у Au. По-прежнему можно выделить “зону” d -орбиталей ниже уровня Фер-

Таблица 6. Энергия $E_{св}$ и длина связи $R_{св}$ для сайтов адсорбции атома H на кластере Cu_{13} на подложке графита с обрывом плоскости типа “зигзаг” при фиксированном и незакрепленном положениях атомов Cu

Сайт	Положение атомов		$\Delta E_{св}$, эВ	
	фиксированное	незакрепленное		
s1 (на вершине)	$E_{св}$, эВ	–3.59	–3.67	–0.08
	$R_{св}$, Å	1.62; 1.71; 1.77	1.61; 1.72; 1.79	
s2 (на интерфейсе)	$E_{св}$, эВ	–4.16	–4.31	–0.15
	$R_{св}$, Å	1.92; 1.71; 1.64	1.83; 1.73; 1.64	

ми и плотность состояний s -орбиталей вблизи уровня Ферми. Изменения плотности состояний при адсорбции H происходят для всех сайтов практически одинаково: плотность состояний s -орбиталей снижается, а d -орбиталей сдвигается ниже по энергии. В этом можно отметить сходство с аналогичными системами золото—графит с кластером Au, исследованными в нашей предыдущей работе [22].

Как видно для системы Cu—графит характерно менее выраженное воздействие подложки графита на кластер меди по сравнению с системой Au—графит, что приводит к меньшему влиянию дефектов подложки на параметры адсорбции атомов водорода.

ВЫВОДЫ

1. Во всех наноразмерных системах с одноатомными дефектами наблюдалось снижение плотности состояний при адсорбции как на интерфейсе, так и на вершине сайтов.

2. Изменения плотности состояний для сайтов на интерфейсе больше, как и энергия связи. Разность энергии связей на интерфейсе и вершине кластера находится в интервале 0.01–0.75 эВ для различных подложек.

3. Подвижность атомов меди оказывает незначительное влияние на величину энергии связи в отличие от атомов золота. Изменения величины энергии связи не превышают 0.26 эВ.

4. В наноразмерных системах с обрывами плоскости графита атомы углерода не принимают значительного участия во взаимодействии с адсорбирующимся атомом водорода.

Все расчеты выполнены с использованием вычислительных ресурсов Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН (МСЦ РАН).

Работа выполнена в рамках государственного задания (номер государственной регистрации темы АААА-А20-120013190076-0), а также при финансовой поддержке Российским фондом фундаментальных исследований (гранты № 18-03-00060, 20-03-00419).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Knizhnik A., Shter G.E., Grader G.S. et al. // Physica C. 2003. V. 400. № 1–2. P. 25–35.*
2. *Kijima M., Ohmura K., Shirakawa H. // Synth. Met. 1999. V. 101. № 1–3. P. 58.*
3. *Востриков А.А., Федяева А.Н., Фадеева О.Н. и др. // Сверхкритич. флюиды. 2010. Т. 5. № 1. С. 12.*
4. *Николаев А.Ю., Сизов В.Е., Абрамчук С.С. и др. // Там же. 2019. Т. 14. № 2. С. 105.*
5. *Хохлов С.С., Ходос И.И., Дьячкова Л.Г. и др. // Хим. физика. 2019. Т. 38. № 11. С. 34.*
6. *Чернышова К.Ф., Ревина А.А. // Хим. физика. 2019. Т. 38. № 5. С. 17.*
7. *Molodtsova O.V., Aristova I.M., Potorochin D.V. et al. // Appl. Surf. Sci. 2020. V. 506. P. 144980.*
8. *Magnin Y., Villermaux E., Amara H. et al. // Carbon. 2020. V. 159. P. 504.*
9. *Choi H., Nguyen P.T., Tran P.V. et al. // Appl. Surf. Sci. 2020. V. 510. P. 145432.*
10. *Чуканов Н.В., Ларикова Т.С., Дремова Н.Н. и др. // Хим. физика. 2020. Т. 39. № 3. С. 71.*
11. *Никитенков Н.Н. Технология конструкционных материалов. Анализ поверхности методами атомной физики. Москва: “Юрайт”, 2018.*
12. *Hammer B., Norskov J.K. // Surf. Sci. 1996. V. 359. № 1–3. P. 306.*
13. *Backes C., Abdelkader A.M., Alonso C. et al. // 2D Mater. 2020. V. 7. № 2. P. 282.*
14. *Kulkarni A., Siahrostami S., Patel A. et al. // Chem. Rev. 2018. V. 118. № 5. P. 2302.*
15. *Meng Y., Liu X.Y., Bai M.M. et al. // Appl. Surf. Sci. 2020. V. 505. P. 144526.*
16. *Tormena M.M.L., Pontes R.M. // Mol. Catal. 2020. V. 482. Article 110694.*
17. *Zhu M.H., Tian P.F., Kurtz R. et al. // Angew. Chem. Intern. Ed. 2019. V. 58. № 27. P. 9083.*
18. *Mammen N., Spanu L., Tyo E.C. et al. // J. Phys.: Condens. Matter. 2019. V. 31. № 14. P. 144002.*
19. *Дохликова Н.В., Колченко Н.Н., Гришин М.В. и др. // Рос. нанотехнол. 2016. Т. 11. № 11–12. С. 54.*
20. *Gatin A.K., Grishin M.V., Dokhlikova N.V. et al. // Crystals. 2019. V. 9. № 7. P. 350.*
21. *Гатин А.А., Гришин М.В., Дохликова Н.В. и др. // Рос. нанотехнол. 2018. Т. 13. № 9–10. С. 3.*
22. *Дохликова Н. В., Гатин А.К., Сарвадий С.Ю. и др. // Хим. физика. 2021. Т. 40. № 7. С. 67.*
23. *Giannozzi P., Andreussi O., Brumme T. et al. // J. Phys.: Condens. Matter. 2017. V. 29. № 46. P. 465901.*
24. *Ozaki T., Kino H. // Phys. Rev. B. 2004. V. 69. № 19. Article 195113.*
25. *Дохликова Н.В., Гатин А.К., Сарвадий С.Ю. и др. // Хим. Безоп. 2019. Т. 3. № 5. С. 18.*