

Al 吸附在 Pt, Ir 和 Au 的 (111) 面的低覆盖度研究*

张建军 张 红[†]

(四川大学物理科学与技术学院, 成都 610065)

(2009 年 9 月 15 日收到; 2010 年 1 月 21 日收到修改稿)

应用密度泛函理论, 系统研究了 Al 原子在 Pt(111), Ir(111) 和 Au(111) 表面的桥位、顶位、三重面心立方 (fcc) 洞位和六角密排 (hcp) 洞位这四个典型位置的吸附情况. 主要计算了三吸附体系的几何结构、平均结合能和差分电荷密度, 并系统讨论了相关原子的密立根电荷布居数和投影态密度. 研究发现, 对于 Pt(111) 和 Ir(111) 表面, Al 原子在 hcp 洞位最稳定, 但是对于 Au(111) 表面, Al 原子在 fcc 洞位最稳定.

关键词: 吸附, 密度泛函理论, 结合能, 电子结构

PACC: 6770, 7115J, 6150L

1. 引 言

Pt/Al, Ir/Al 和 Au/Al 合金由于具有熔点高、硬度大等多种特殊的性质, 所以它们在催化技术、燃料电池、抗氧化涂层等许多方面都有很广泛的应用. 在石油工业中, Pt 是一种被广泛应用的催化剂. 在进一步的研究中, 人们还发现在 Pt 表面加入 Al 金属能够得到更好的催化效果^[1]. 另外, Pt/Al 合金涂层比起单一的 Al 涂层在抗氧化和耐腐蚀方面都有更好的效果^[2]. 由于以 Ir 为基础的合金能形成一种有效的抗氧扩散阻碍层, 所以 Ir 基础合金在发展超高温、抗氧化涂层中具有重要作用^[3,4]. 为了避免形成有毒气体 IrO_3 , Ir 经常与 Al 合成, Ir/Al 合金还能够有效保护涂层结构^[5]. 最近硼氢化合物燃料电池在发展绿色能源方面具有重要作用^[6-8], 而 Au/Al 合金是此燃料电池的一种非常重要的催化剂^[9]. 在实验上, Gall 等^[10]研究了在较大的温度范围和超真空条件下 Al 和 Ir(111) 表面原子的相互作用. 而当前用于薄膜材料的实验分析仪器, 如 X 射线光电子能谱仪、电子能量损失谱仪及扫描隧道显微镜等^[11-14], 都无法直接获得表面吸附及表面界面原子与电子的结构等精确的物理化学信息. 因此, 利用计算机建立物理模型模拟研究表面的结构和相关物理性质^[15,16], 对研究薄膜生长中的表面界面

控制, 提高薄膜器件性能具有重要的指导意义. 据我们所知, 对 Al/Pt(111), Al/Ir(111) 和 Al/Au(111) 体系进一步的实验和第一性原理研究^[17] 目前尚非常缺乏, 而为了理解 Pt/Al, Ir/Al 和 Au/Al 合金的微观性质, 研究这些吸附体系的几何和电子结构是非常必要的.

2. 计算方法

本文所有的计算都是以密度泛函理论 (DFT)^[18,19] 为基础, 在处理交换相关项时采用广义梯度近似 (GGA) 中的 Perdew-Wang1991 (PW91) 函数^[20]. 表面模型是由优化后的 Pt, Ir 和 Au 晶体切割而成, 表面层数选为 5 层. 在计算中所有的表面都采用 2×2 的超晶胞近似, 真空区域选为 1.2 nm. Al 原子吸附在表面的一侧, 吸附范围为四分之一分子层 (ML), 即 0.25 ML. 在吸附位置上, 选取了顶位、桥位、三重面心立方 (fcc) 洞位和六角密排 (hcp) 洞位这四个典型的位置. 在计算过程中, 平面波的截断能选为 300 eV, 体系总能量的收敛标准为 2×10^{-5} eV, 各原子所受力的收敛标准为 5×10^{-1} eV/nm, 各原子位移的收敛标准为 2×10^{-4} nm. 在布里渊区积分计算中, 本文选用了 $4 \times 4 \times 1$ 的 Monkhorst-Pack 网格, 其中所包含的 Monkhorst-Pack 格子足以给出吸附体系的电子结构^[21].

* 国家自然科学基金 (批准号: 10976019) 和催化基础国家重点实验室基金 (批准号: N-08-06) 资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: hongzhang@scu.edu.cn

各吸附体系的稳定性由每个吸附体系中 Al 原子的平均结合能 E_b 决定. 平均结合能定义为^[22]

$$E_b^{Al/X} = -\frac{1}{N_{Al}}[E^{Al/X} - (E^X + N_{Al}E^{Al})]. \quad (1)$$

这里 X 代表 Pt, Ir 和 Au 原子, N_{Al} 为表面单胞中的 Al 原子数, $E^{Al/X}$ 为吸附体系的总能量, E^X 为洁净表面的总能量, E^{Al} 为 Al 原子的能量. 若结合能为正, 则暗示吸附过程放热; 若结合能为负, 则暗示吸附过程需从外界吸收能量.

为了更好分析各吸附体系表面原子的电子结构和成键情况, 本文计算了各体系的差分电荷密度 $n^d(r)$. 差分电荷密度 $n^d(r)$ 定义为^[23]

$$n^d(r) = n^{Al/X}(r) - n^{Al}(r) - n^X(r). \quad (2)$$

这里 $n^{Al/X}(r)$ 为吸附体系的总电荷密度, $n^{Al}(r)$ 为孤立 Al 原子的电荷密度, $n^X(r)$ 为纯净表面的总电荷密度.

3. 结果及讨论

忽略零点振动后, 用 VASP 程序包计算的 Pt, Ir, Au 的晶格常数分别为 0.396, 0.389, 0.419 nm, 相应的实验值分别为 0.392, 0.384, 0.408 nm. Al 原子与距离它最近的表面原子间的键长、Al 原子到吸附表面最顶层的垂直高度和吸附体系的平均结合能列于表 1. 这里用 d_{Al-X} 表示 Al 原子与距离它最近的表面原子的键长, d_{Al-1} 表示 Al 原子到吸附表面最顶层的垂直高度.

从表 1 可以看出, 对于 Al/Pt(111) 体系, Al 原子在表面两洞位时体系的结合能要比它在桥位和顶位时体系的结合能高. 这一结果说明对于 Pt(111) 表面, Al 原子在表面两洞位要比它在桥位和顶位稳定. 另外, Al 原子在 hcp 洞位时体系的结合能为 5.635 eV, 要比它在 fcc 洞位时的结合能高 0.028 eV. 这一微小差距也可以从 Al 原子在两洞位中的 Al—Pt 键长反应出来. 从表 1 可以看出 Al 原子在 hcp 洞位时 Al—Pt 键长为 0.2358 nm, 仅仅比 Al 原子在 fcc 洞位时的 Al—Pt 键长短 0.0004 nm. 这一差异说明对于 Pt(111) 表面, Al 原子在 hcp 洞位最稳定, 但 Al 原子在 hcp 洞位的吸附情况与它在 fcc 洞位的吸附情况相比差别不是很大. 从表 1 还可以看出, Al 原子在 Ir(111) 表面的吸附情况和 Al 原子在 Pt(111) 表面的吸附情况非常类似, 也是在 hcp 洞位最稳定, 而 fcc 洞位和 hcp 洞位的吸附情况非常接近, 但是当 Al 原子吸附在 Au(111) 表面时情况

发生了变化. 由表 1 可知, 对于 Au(111) 表面, Al 原子在两洞位时体系的结合能也比它在桥位和顶位时体系的结合能高, 但不同的是, 对于 Au(111) 表面, Al 原子吸附在表面 fcc 洞位时体系的结合能要比它吸附在表面 hcp 洞位时体系的结合能高. 上述分析说明, 与 Pt(111) 和 Ir(111) 表面不同, 对于 Au(111) 表面, Al 原子是在 fcc 洞位最稳定. 对于 Au(111) 表面, Al 原子在 fcc 洞位时 Al—Au 键长要比它在 hcp 洞位时的 Al—Au 键长短, 这一现象也支持了 Al 原子在 fcc 洞位更稳定的结果. 但不管是那一个表面, Al 原子都是在两洞位比它在顶位和桥位稳定. 为了检验表面基底更深层对吸附稳定性的影响, 我们特意在计算 Al 原子在 Ir(111) 表面吸附时, 对 Al 原子和最外的三层 Ir 原子进行了优化^[24], 结果表明相对于对两层 Ir 原子的优化, 第三层的优化在结合能上的影响几乎可以忽略不计.

表 1 Al 原子吸附在 Pt(111), Ir(111) 和 Au(111) 表面的顶位、桥位、hcp 洞位和 fcc 洞位时体系的结合能和相关几何参数

表 面	吸附位置	E_b/eV	d_{Al-X}/nm	d_{Al-1}/nm
Pt(111)	顶位	3.915	0.2137	0.2128
Pt(111)	桥位	5.409	0.2284	0.1714
Pt(111)	hcp	5.635	0.2358	0.2362
Pt(111)	fcc	5.607	0.2362	0.1692
Ir(111)	顶位	3.774	0.2145	0.2143
Ir(111)	桥位	5.045	0.2355	0.1880
Ir(111)	hcp	5.314	0.2382	0.1763
Ir(111)	fcc	5.223	0.2400	0.1794
Au(111)	顶位	3.299	0.2359	0.2358
Au(111)	桥位	3.907	0.2345	0.1670
Au(111)	hcp	4.092	0.2463	0.2451
Au(111)	fcc	4.123	0.2451	0.1737

下面考虑 Al/Pt(111), Al/Ir(111) 和 Al/Au(111) 体系的电子结构. 表 2 列出了 Al 原子吸附在 Pt(111), Ir(111) 和 Au(111) 表面两洞位时 Al 原子的密立根电荷数和净电荷数, 表中用 Al(fcc) 代表吸附在各表面 fcc 洞位的 Al 原子, Al(hcp) 代表吸附在各表面 hcp 洞位的 Al 原子. 需要指出的是, 由于这种分析具有一定局限性^[25], 所以这里电荷数只是作为一般的定性概念来看. 从表 2 可以看出, 当 Al 原子吸附在 Pt(111), Ir(111) 和 Au(111) 表面两洞位时 Al 原子的净电荷数都为正, 这说明有电荷从 Al 原子向表面 Pt, Ir, Au 原子发生了转移. 一般而

言, Ir, Pt, Au 原子的电负性从左到右逐渐增大, 因此最初我们猜想 Al 原子吸附在三表面两洞位时体系的稳定性从大到小排列依次是 Al/Au(111), Al/Pt(111) 和 Al/Ir(111). 但是, 从表 2 知道 Al 原子吸附在 Pt(111) 表面两洞位时 Al 原子的静电荷数最大, 其次为在 Ir(111) 和 Au(111) 表面. 另外, 从表 1 知道 Al 原子吸附在 Pt(111) 表面两洞位时体系的结合能最大, 其次是在 Ir(111) 表面, 吸附在 Au(111) 表面时体系的结合能最小. 上述分析说明, 实际上 Al 原子吸附在三表面两洞位时体系的稳定性从大到小排列依次是 Al/Pt(111), Al/Ir(111) 和 Al/Au(111). 从表 2 还可以看出, 对于 Al/Pt(111) 体系, Al 原子吸附在表面两洞位时 Al 原子的电荷转移数差 0.01, 相当接近. 对于 Al/Ir(111) 体系, Al 原子吸附在表面两洞位时 Al 原子的电荷转移数完全相同, 但是对于 Al/Au(111) 体系, Al 原子吸附在表面两洞位时 Al 原子的电荷转移数却差 0.03, 差别相对较大. 上述分析进一步说明, Al 原子在 Au(111) 表面两洞位的吸附情况与 Al 原子在 Pt(111) 和 Ir(111) 表面两洞位的吸附情况是不同的.

表 2 Al 原子吸附在 Pt(111), Ir(111) 和 Au(111) 表面两洞位时, Al 原子的密立根电荷数和净电荷数

表面	原子	Al 3s	Al 3p	净电荷数
Pt(111)	Al(fcc)	1.44	0.96	0.60
Pt(111)	Al(hcp)	1.43	0.97	0.60
Ir(111)	Al(fcc)	1.42	1.03	0.55
Ir(111)	Al(hcp)	1.41	1.03	0.56
Au(111)	Al(fcc)	1.60	0.98	0.42
Au(111)	Al(hcp)	1.55	1.00	0.45

Al 原子吸附在 Pt(111), Ir(111) 和 Au(111) 表

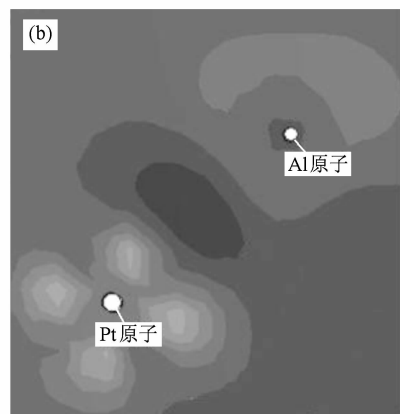
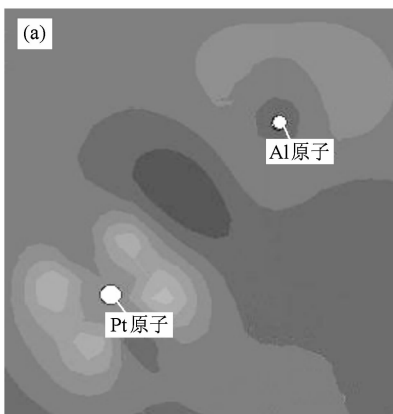


图 1 Al 原子吸附在 Pt(111) 表面两洞位时体系的差分电荷密度分布 (a) Al 原子吸附在 Pt(111) 表面 fcc 洞位时, (b) Al 原子吸附在 Pt(111) 表面 hcp 洞位时

面两洞位时相关原子的电荷转移情况也可以从它们的差分电荷密度分布图(图 1—图 3)看出, 图中明亮处代表电荷损耗, 黑暗处代表电荷积聚, 切面为过顶部 Al 原子和距离它最近的表面原子的(001)面. 图 1 为 Al/Pt(111) 体系的差分电荷密度分布图, 图 2 为 Al/Ir(111) 体系的差分电荷密度分布图, 图 3 为 Al/Au(111) 体系的差分电荷密度分布图. 首先考虑 Al/Pt(111) 体系. 从图 1 可以看出, 有电子从 Al 原子向距离它最近的 Pt 原子发生了转移从而形成了 Al—Pt 键. 另外, 还发现 Al 原子在 fcc 和 hcp 洞位时体系的电荷密度分布情况非常相似. 对于 Al/Ir(111) 体系, 从图 2 可以发现, 有电子从 Al 原子向距离它最近的 Ir 原子发生了转移从而形成了 Al—Ir 键, 所不同的是, 对于 Ir(111) 表面, 表面 Ir 原子有极化现象. 从图 2 还可以发现, 在两个不同的吸附位置上, Al—Ir 方向的电荷密度变化情况也有差别, 具体表现为 Al 原子在 hcp 洞位时 Al—Ir 方向的电荷密度增量要比它在 fcc 洞位时的 Al—Ir 方向的电荷密度增量. 这一差别说明, 对于 Ir(111) 表面, Al 原子吸附在 hcp 洞位时最稳定. 从图 3 可以看出, 对于 Al/Au(111) 体系, 电子从 Al 原子向距离它最近的 Au 原子也发生了转移从而形成了 Al—Au 键, 另外对于 Au(111) 表面, 表面 Au 原子也有极化现象发生, 并且 Al 原子在 fcc 洞位时表面 Au 原子的极化率要比它在 hcp 洞位时的极化率大. 正是由于表面 Au 原子的极化导致 Al 原子在 Au(111) 表面两洞位的吸附情况相对于它在 Pt(111) 和 Ir(111) 表面两洞位的吸附有了一定差别, 主要体现在对于 Au(111) 表面 Al 原子在极化率较大的 fcc 洞位最稳定.

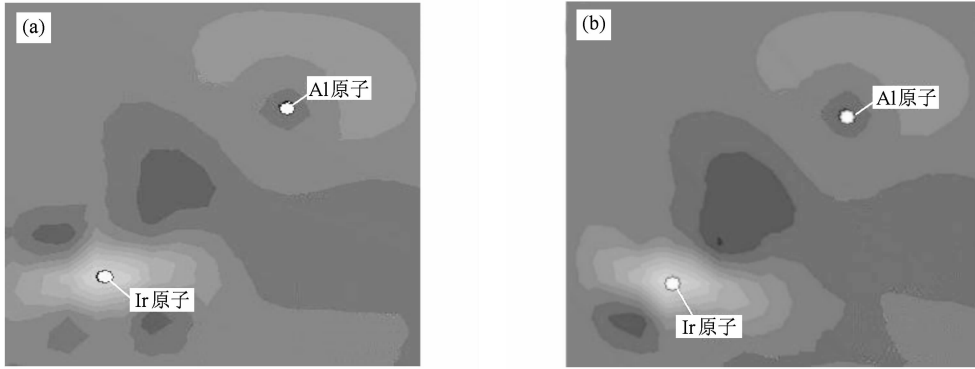


图2 Al原子吸附在Ir(111)表面两洞位时体系的差分电荷密度分布 (a) Al原子吸附在Ir(111)表面fcc洞位时, (b) Al原子吸附在Ir(111)表面hcp洞位时

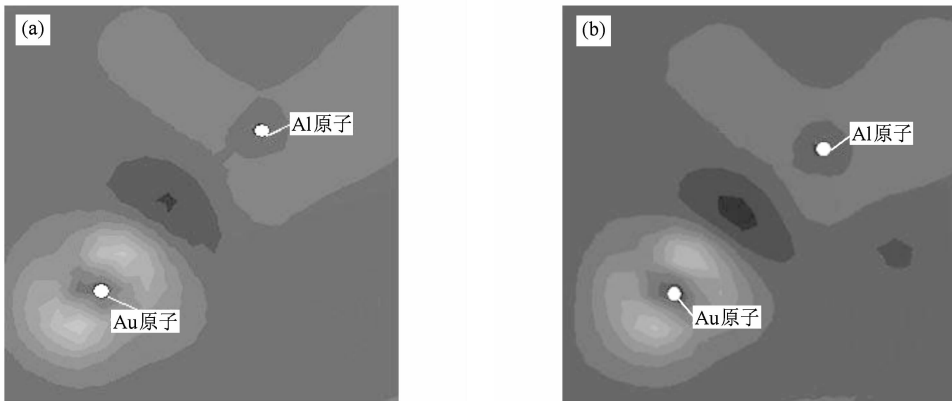


图3 Al原子吸附在Au(111)表面两洞位时体系的差分电荷密度分布 (a) Al原子吸附在Au(111)表面fcc洞位时, (b) Al原子吸附在Au(111)表面hcp洞位时

为了进一步研究 Al/Pt(111), Al/Ir(111) 和 Al/Au(111) 体系的电子结构, 我们分别对吸附在各表面两洞位的 Al 原子和距离它最近的表面原子的投影态密度 (PDOS) 进行了研究, 相应的结果示于

图4—图6中. 首先考虑 Al 原子在 Pt(111) 表面的吸附. 图4给出了 Al 原子吸附在 Pt(111) 表面 fcc 和 hcp 洞位时 Al 原子和距离它最近的 Pt 原子的 PDOS. 从图4可以看出, Al 原子吸附在表面两洞位

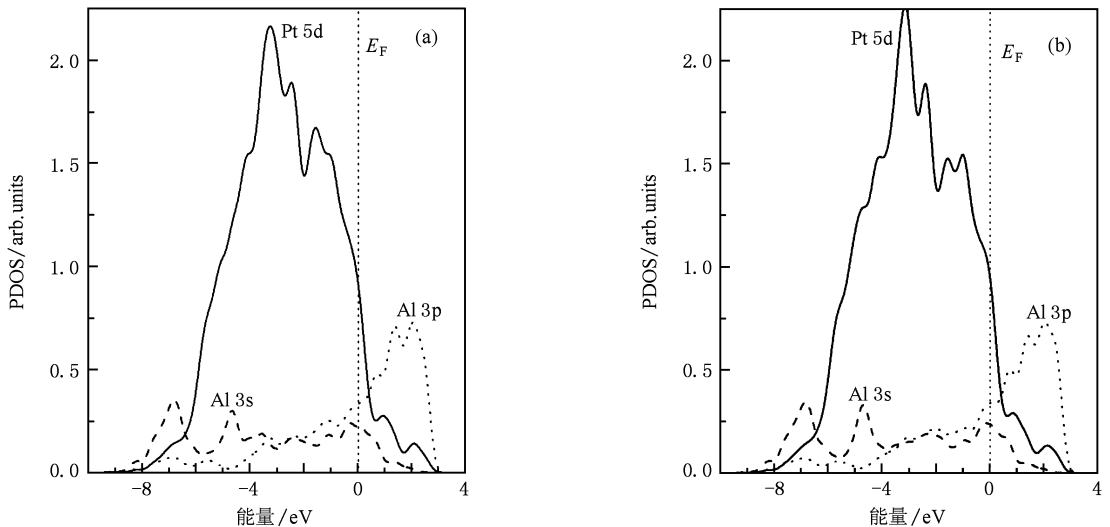


图4 Al原子吸附在Pt(111)表面两洞位时, Al原子和距离它最近的Pt原子的PDOS (a) Al原子吸附在Pt(111)表面fcc洞位时, (b) Al原子吸附在Pt(111)表面hcp洞位时

时相关原子的 PDOS 非常接近,在费米能 E_F 附近, Pt 原子的 5d 态都占据主导地位,在 0.4 eV 上方 Al 原子的 3p 态都占据主导地位,另外在 0.4 eV 附近都可以看到 Pt 原子的 5d 态和 Al 原子的 3p 态的有效杂化.上述现象暗示着对于 Al 原子在 Pt(111) 表面两洞位的吸附,Al 原子与距离它最近的 Pt 原子之间发生了相互作用,且两原子间的相互作用主要源于 Pt 原子的 5d 态与 Al 原子的 3p 态的作用.从图 4 还可以看出,在 E_F 处 Al 原子在 hcp 洞位时对应 Pt 原子的 5d 态要略微高于它在 fcc 洞位时对应 Pt 原

子的 5d 态.这说明对于 Pt(111) 表面,与 fcc 洞位相比 Al 原子在 hcp 洞位要更稳定,但两者差异很小.对于 Ir(111) 表面,从图 5 可以看出与 Pt(111) 表面类似,Al 原子吸附在 Ir(111) 表面两洞位时相关原子的 PDOS 也非常接近.在 E_F 处 Al 原子在 hcp 洞位时对应 Ir 原子的 5d 态也要略微高于它在 fcc 洞位时对应 Ir 原子的 5d 态.上述分析说明,对于 Al 原子在 Ir(111) 表面的吸附,Al 原子也是在 hcp 洞位最稳定.从图 6 可以看出,Al 原子在 Au(111) 表面两洞位吸附时相关原子的 PDOS 与 Al 原子在 Ir(111)

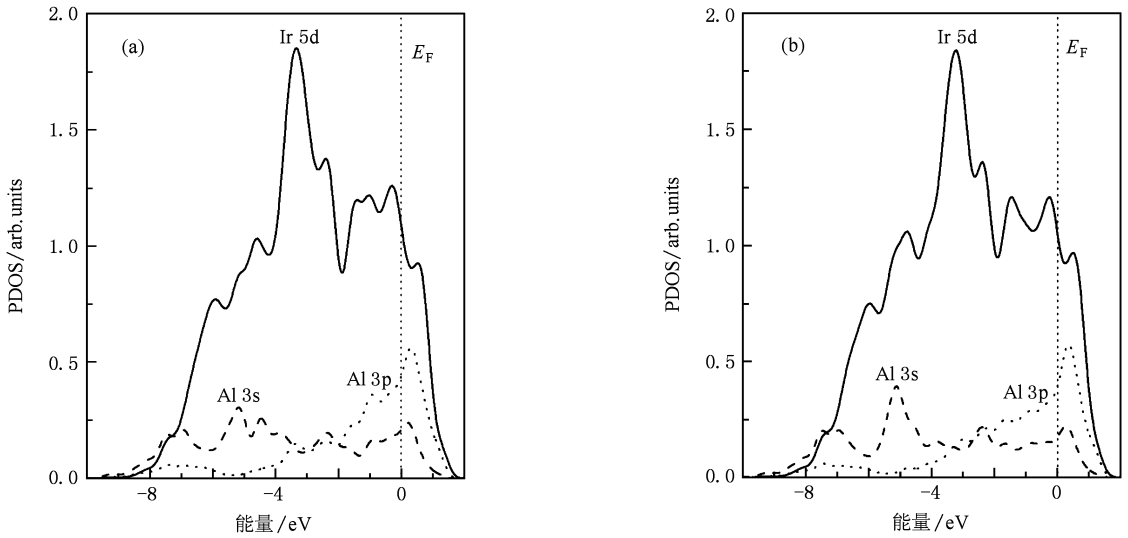


图 5 Al 原子吸附在 Ir(111) 表面两洞位时,Al 原子和距离它最近的 Ir 原子的 PDOS (a) Al 原子吸附在 Ir(111) 表面 fcc 洞位时, (b) Al 原子吸附在 Ir(111) 表面 hcp 洞位时

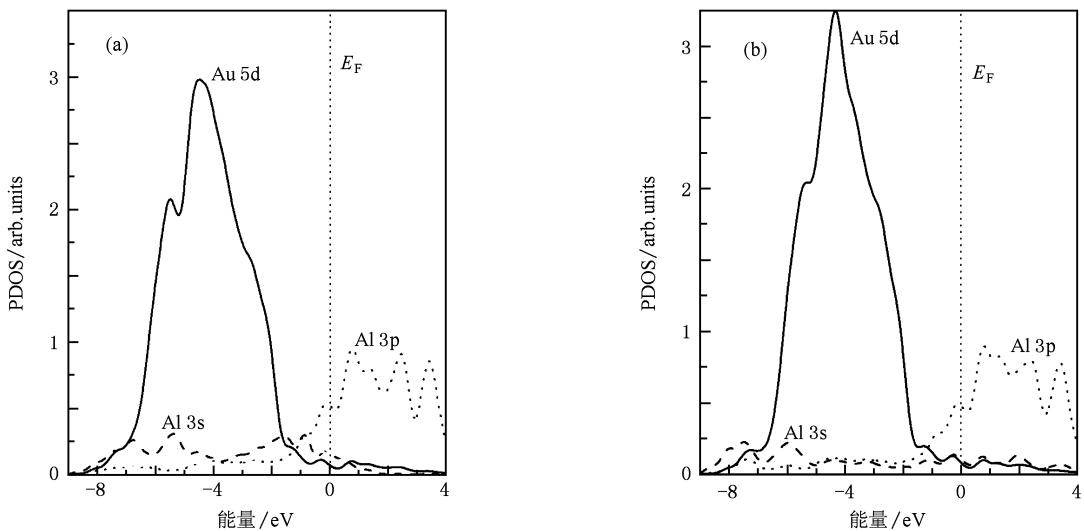


图 6 Al 原子吸附在 Au(111) 表面两洞位时 Al 原子和距离它最近的 Au 原子的 PDOS (a) Al 原子吸附在 Au(111) 表面 fcc 洞位时, (b) Al 原子吸附在 Au(111) 表面 hcp 洞位时

表面和 Pt(111) 表面两洞位吸附时相关原子的 PDOS 相比有很大差异. 首先与 Ir(111) 表面和 Pt(111) 表面不同, Al 原子吸附在 Au(111) 表面两洞位时, 在 E_F 附近占据主导地位的是 Al 的 3p 态, 在 E_F 处 Al 原子在 hcp 洞位时 Al 的 3p 态要略微低于它在 fcc 洞位时 Al 的 3p 态. 这说明 Al 原子在 Au(111) 表面两洞位的吸附与它在 Ir(111) 表面和 Pt(111) 表面两洞位的吸附不同, 它在 Au(111) 表面的 fcc 洞位最稳定.

从上述分析可以发现, 对于 0.25 ML 的吸附, Al 原子吸附在 Pt(111), Ir(111) 和 Au(111) 表面两洞位要比它吸附在各表面桥位和顶位稳定. 不同的是对于 Pt(111) 和 Ir(111) 表面, Al 原子是在表面 hcp 洞位最稳定, 但对于 Au(111) 表面, Al 原子是在表面 fcc 洞位最稳定.

4. 结 论

本文以 DFT 理论为基础, 在 0.25 ML 吸附范围内, 系统研究了 Al 吸附在 Pt(111)、Ir(111) 和 Au

(111) 表面的顶位、桥位和两洞位这四个典型位置时体系的几何和电子性质. 研究发现: Al 原子在这三种金属表面的两个洞位都要比它在顶位和桥位稳定, 但 Al 原子在 Au(111) 表面两洞位的吸附与它在 Pt(111) 和 Ir(111) 表面两洞位的吸附相比有一定差异. 对于 Pt(111) 和 Ir(111) 表面, Al 原子在 hcp 洞位最稳定, 而对于 Au(111) 表面, Al 原子却在 fcc 洞位最稳定. 进一步对 Al 原子和距离它最近的表面原子的 PDOS 进行分析后发现, Al 原子和相应表面原子的相互作用主要源于表面原子的 5d 态与 Al 的 3p 态的作用. 对于 Al/Pt(111) 和 Al/Ir(111) 体系, 在 E_F 附近占据主导地位的分别是 Pt 的 5d 和 Ir 的 5d 态, 在 E_F 处 Al 原子位于表面 hcp 洞位时相应表面原子的 5d 态要略微高于位于 fcc 洞位时相应表面的 5d 态. 对于 Al/Au(111) 体系, 在 E_F 附近占据主导地位的却是 Al 原子的 3p 态, 并且位于 hcp 洞位的 Al 原子的 3p 态要低于位于 fcc 洞位的相应态. 上述分析进一步证明, 与 Al 原子在 Pt(111) 和 Ir(111) 表面的吸附不同, 对于 Al 原子在 Au(111) 表面的吸附, Al 原子是在 fcc 洞位最稳定.

- [1] Rodriguez J A, Goodman D W 1991 *Surf. Sci. Rep.* **14** 1
- [2] Lehnert G, Meinhardt H W 1972 *Electrodepos. Surf. Treat.* **189** 71
- [3] Lee K N, Worrell W L 1989 *Oxid. Met.* **32** 357
- [4] Lee K N, Worrell W L 1994 *Oxid. Met.* **41** 37
- [5] Hosoda H, Miyazaki S, Hanada S 2000 *Intermetallics* **8** 1081
- [6] Li Z P, Liu B H, Arai K, Asaba K, Suda S 2004 *J. Power Sour.* **126** 28
- [7] Liu B H, Li Z P, Arai K, Suda S 2005 *Electrochim. Acta* **50** 3719
- [8] Choudhry N A, Raman R K, Sampath S, Shukla A K 2005 *J. Power Sour.* **143** 1
- [9] Atwan M H, MacDonald C L B, Northwood D O, Gyenge E L 2006 *J. Power Sour.* **158** 36
- [10] Gall N R, Rut'kov E V, Tontegode A Y 2006 *Phys. Solid State* **48** 369
- [11] Watanabe H, Kato K, Uda T, Fujita K, Ichikawa M, Kawamura T, Terakura K 1998 *Phys. Rev. Lett.* **88** 345
- [12] Fan S H, Fan Z X, He H B, Shao J D, Zhao Y A 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 5774 (in Chinese) [范树海、范正修、贺洪波、邵建达、赵元安 2005 物理学报 **54** 5774]
- [13] Ding X, Li Z, Xu J J, Yu X Y, Zhang G Y 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1307 (in Chinese) [丁欣、李卓、许京军、禹宣伊、张光寅 2002 物理学报 **51** 1307]
- [14] Fan S H, Fan Z X, He H B, Shao J D, Zhao Y A 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 758 (in Chinese) [范树海、范正修、贺洪波、邵建达、赵元安 2006 物理学报 **55** 758]
- [15] Yang C, Li Y R, Yan Q L, Liu Y H 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 2364 (in Chinese) [杨春、李言荣、颜其礼、刘永华 2005 物理学报 **54** 2364]
- [16] Shu Y, Xu K W, Zhang J M 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 4103 (in Chinese) [舒瑜、徐可为、张建民 2006 物理学报 **55** 4103]
- [17] Ni J G, Liu N, Yang G L, Zang X 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 4434 (in Chinese) [倪建刚、刘诺、杨果来、张曦 2008 物理学报 **57** 4434]
- [18] Hohenberg P, Kohn W 1964 *Phys. Rev.* **136** 864
- [19] Kohn W, Sham L J 1965 *Phys. Rev.* **140** 1133
- [20] Perdew J P, Chevary J A, Vosko S H, Jackson K A, Pederson M R, Singh D J, Fiolhais C 1992 *Phys. Rev. B* **46** 6671
- [21] Monkhorst H J, Pack J D 1976 *Phys. Rev. B* **13** 5188
- [22] Horn K, Scheffler M 2000 *Handbook of Surface Science* (Amsterdam: North-Holland) p286
- [23] Liu M, Wang S Q, Ye H Q 2003 *J. Phys.: Condens. Matter* **15** 8103
- [24] Zhang H, Soon A, Delley B, Stampfl C 2008 *Appl. Surf. Sci.* **254** 7655
- [25] Szabo A, Ostlund N S 1989 *Modern Quantum Chemistry* (New York: McGraw-Hill) p135

A low coverage investigation on Al adsorption on the (111) surface of Pt, Ir and Au^{*}

Zhang Jian-Jun Zhang Hong[†]

(School of Physical Science and Technology, Sichuan University, Chengdu 610065, China)

(Received 15 September 2009; revised manuscript received 21 January 2010)

Abstract

Aluminium adsorptions on Pt(111), Ir(111) and Au(111) surface are studied systematically by using the density function theory. Four highly symmetric sites, namely face-centered cubic (fcc)-hollow, hexagonal close-packed (hcp)-hollow, top and bridge sites, are adopted. We calculate atomic geometry, average binding energy and differences in electron density among the three systems. The Mulliken charge population analyses and the projected densities of states of the three systems are also discussed. It is found that the hcp-hollow site is the energetically favorable site for Pt(111) and Ir(111) surfaces, but the energetically favorable site is the fcc-hollow site for Au(111) surface.

Keywords: adsorption, density functional theory, binding energy, electronic structure

PACC: 6770, 7115J, 6150L

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10976019) and the Foundation of State Key Laboratory of Catalysis, China (Grant No. N-08-06).

† Corresponding author. E-mail: hongzhang@scu.edu.cn