Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации
Федеральное государственное
бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тверской государственный университет»

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ
ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ,
НАНОСТРУКТУР
И НАНОМАТЕРИАЛОВ**

**PHYSICAL AND CHEMICAL ASPECTS
OF THE STUDY OF CLUSTERS,
NANOSTRUCTURES AND
NANOMATERIALS**

**FIZIKO-HIMIČESKIE ASPEKTY
IZUČENIÂ KLASTEROV,
NANOSTRUKTUR I NANOMATERIALOV**

выпуск 13

ТВЕРЬ 2021

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Ф50

Рецензирование статей осуществляется на основании Положения о рецензировании статей и материалов для опубликования в журнале «Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов».

Официальный сайт издания в сети Интернет:

<https://www.physchemaspects.ru>

Ф50 Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]. – Тверь: Издательство Тверского государственного университета, 2021. – Вып. 13. – 956 с.

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС77-47789 от 13.12.2011.

Издание составлено из оригинальных статей, кратких сообщений и обзоров теоретического и экспериментального характера, отражающих результаты исследований в области изучения физико-химических процессов с участием кластеров, наноструктур и наноматериалов физики, включая межфазные явления и нанотермодинамику. Журнал предназначен для научных и инженерно-технических работников, преподавателей ВУЗов, студентов и аспирантов. Издание подготовлено на кафедре общей физики Тверского государственного университета.

Переводное название: Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials

Транслитерация названия: Fiziko-himičeskie aspekty izučeniâ klasterov, nanostruktur i nanomaterialov

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Print ISSN 2226-4442

Online ISSN 2658-4360

© Коллектив авторов, 2021

© Тверской государственной
университет, 2021

РАСЧЕТЫ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ 2D-СЛОЕВ

ИНТЕРМЕТАЛЛИДА NaAu

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: DOI: 10.26456/pcascnn/2021.13.475

Аннотация: Проведен расчет плотности состояний различной толщины 2D-слоев интерметаллида NaAu. 2D-слоев интерметаллида NaAu моделировались суперячейки NaAu (111) $2 \times 2 \times 2$. Для монослойного 2D-слоя интерметаллида NaAu установлено наличие запрещенной зоны с шириной 1,87 эВ. Увеличение толщины 2D-слоев интерметаллида NaAu до двух монослоев показал уменьшение ширины запрещенной зоны до 0,81 эВ. Дальнейшее увеличение толщины 2D-слоев интерметаллида NaAu приводит к исчезновению запрещенной зоны, что указывает на переход полупроводник – металл для 2D-слоя интерметаллида NaAu толщиной три монослоя. Валентная зона 2D-слоя интерметаллида NaAu сформирована в основном Au 5d электронами, с незначительным вкладом Au 6s и Au 6p электронов. Зона проводимости NaAu образована в основном Au 6p электронами с незначительным вкладом электронов Na 3s.

Ключевые слова: электронная структура, интерметаллические соединения, 2D-слой, аурид натрия.

1. Введение

Интерметаллические соединения золота со щелочными металлами исследуются с середины прошлого века [1]. В этих соединениях с Au проявляют себя как аниона Au, а не как обычно в роли катиона [2]. Интерес к интерметаллидам золота вызван к различными аспектами химии Au [2], возможностью модификации наночастиц Au, которые используются в различных областях от катализа [3] и медицины [4] до создания различных датчиков и сенсоров [5].

Адсорбция атомов щелочных металлов на поверхности Au приводит к формированию интерметаллидов золото-щелочный металл [6-8]. Полученные нами ранее интерметаллиды (Na_xAu_y , K_xAu_y и Cs_xAu_y) представляют собой двумерные полупроводниковые пленки толщиной в несколько монослоев на поверхности Au. Однако расчеты методом функционала плотности показывают, что кристаллы LiAu, KAu, NaAu, [9], NaAu₂, [10], LiAu₅, NaAu₅, KAu₅ [11] являются металлами, в отличие от Cs_xAu_y , который является полупроводником.

Целью данной работы было рассчитать электронную структуру Au 2D-слоев NaAu в зависимости от толщины 2D-слоев и определить при какой толщине 2D-слоя происходит переход полупроводник-металл.

2. Методический раздел

Наши расчеты из первых принципов выполняются в рамках теории функционала плотности (DFT – density functional theory), реализованной в пакете QUANTUM ESPRESSO [12] с использованием обменно-корреляционного функционала с учетом обобщенных градиентных приближений (GGA – generalized gradient approximation) в форме Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) [13]. Влияние ионных остовов учитывалось через сохраняющий норму псевдопотенциал [14]. Суперячейки (111) $2 \times 2 \times 2$ были изготовлены с использованием графической программы с открытым исходным кодом BURAI-1.3 [15]. Ограничение кинетической энергии и ограничение плотности заряда были выбраны 55 Ry и 550 Ry. Использована гамма-центрированная сетка по k -точкам $4 \times 4 \times 4$ для всех систем в этой статье. Сходимость составила 1×10^{-6} Ry.

NaAu имеют структуру *CsCl* с постоянными решетки 3,46 ангстрем соответственно. Суперячейки содержат от одного до четырех монослоев *NaAu*. Стадия релаксации параметров ячейки суперячейки длится до достижения давления менее 0,5 кбар.

Реальная система монослой щелочного металла – интерметаллический слой – монослой золота – вольфрамовая подложка достаточно сложна для расчетов, поэтому в расчетах использовалась упрощенная модель, состоящая из изолированных 2D-слоев, которые моделировались суперячейками (см. рис. 1). Это приближение позволяет качественно оценить изменение электронной структуры интерметаллида с увеличением толщины 2D-слоя.

Рис. 1. Кристаллическая структура *NaAu*. 2D-слои *NaAu*: (б) один монослой *NaAu*, (в) два монослоя *NaAu*, (г) три монослоя *NaAu*, (д) четыре монослоя *NaAu*. Желтый шар – атом золота, фиолетовый шар – атом натрия.

3. Результаты и обсуждение

На рис. 2 показаны результаты расчетов для суперячеек,

содержащих различное количество монослоев $NaAu$.

Результаты расчета DOS (DOS – density of states) для однослойного 2D-слоя $NaAu$ показаны на рис. 2 а. Один монослой $NaAu$ можно рассматривать как полупроводник с шириной запрещенной зоны 1,87 эВ. Максимум валентной зоны находится на 1,22 эВ ниже уровня Ферми. Максимум плотности состояний расположен при –2,20 эВ, а зона образована в основном электронами атомов $Au\ 5d$. Ширина валентной зоны в основании составляет 2,08 эВ, что намного меньше, чем для кристалла $NaAu$. Небольшая зона с максимумом –1,75 эВ образована в основном $6s$ -электронами Au . Зона проводимости образована в основном $Au\ 6p$ электронами с незначительным вкладом электронов $Na\ 3s$. Вклад парциальной плотности состояний (PDOS – partial density of states) показан на рис. 3 а, б соответственно для золота и натрия.

На рис. 2 б показано увеличение толщины слоя $NaAu$ до двух монослоев, что приводит к изменению DOS. Ширина запрещенной зоны уменьшается до 0,81 эВ, и в валентной зоне появляется дополнительный пик. Максимум валентной зоны находится на 0,23 эВ ниже уровня Ферми. Ширина валентной зоны в основании увеличивается до 4,50 эВ. Валентная зона, образованная в основном электронами атомов $Au\ 5d$, имеет два максимума при –2,38 и –3,23 эВ с незначительным вкладом $Au\ 6s$ и $Au\ 6p$ в низкоэнергетической части. Небольшая зона с максимумом 0,75 эВ образована в основном электронами $Au\ 6s$ и $Au\ 6p$. Зона проводимости образована в основном $Au\ 6p$ с незначительным вкладом электронов $Na\ 3s$.

На рис. 2 в показано, что увеличение толщины слоя $NaAu$ до трех монослоев приводит к изменению величины DOS. Ширина запрещенной зоны уменьшается, что явно свидетельствует о металлизации слоя. Кроме того, появляется дополнительный пик в валентной зоне. Ширина валентной зоны в основании увеличивается до 5,38 эВ. Валентная зона, образованная в основном электронами атомов $Au\ 5d$, имеет три максимума при –2,47, –2,98 и –3,60 эВ с незначительным вкладом $Au\ 6s$ и $Au\ 6p$ в низкоэнергетической части. Валентная зона вблизи уровня Ферми образована в основном электронами $Au\ 6s$ и $Au\ 6p$. Зона проводимости образована в основном $Au\ 6p$ с незначительным вкладом электронов $Na\ 3s$.

На рис. 2 г показано, что увеличение толщины слоя до четырех монослоев $NaAu$ приводит к изменению DOS. Валентная зона расширяется до 5,93 эВ и начинает приближаться к форме валентной зоны кристалла $NaAu$.

Рис. 2. Рассчитанная частичная плотность состояний для одного монослоя *NaAu* (а), двух монослоев *NaAu* (б), трех монослоев *NaAu* (в), четырех монослоев *NaAu* (г), общее количество и плотность состояний для *NaAu* (д). Уровень Ферми соответствует 0 эВ. Плотность состояния *Au* показана синим, *Na* – красным, а общая DOS – черным; V_c – объем элементарной ячейки.

Валентная зона, образованная в основном электронами атомов *Au* 5*d*, имеет три максимума при $-2,39$, $-2,80$, $-3,41$ и $-3,93$ эВ с незначительным вкладом *Au* 6*s* и *Au* 6*p* в низкоэнергетической части. Валентная зона вблизи уровня Ферми образована в основном электронами *Au* 6*s* и *Au* 6*p*. Зона проводимости образована в основном *Au* 6*p* с незначительным вкладом электронов *Na* 3*s*. Следует также отметить, что вклад электронов *Na* в валентную зону незначителен для всех толщин *NaAu*.

Рис. 3. Расчетная полная и парциальная плотность состояний для одного монослоя *NaAu*. Уровень Ферми соответствует 0 эВ. а – *Au* 6*s* состояния показаны красным, *Au* 6*p* – зеленым, *Au* 5*d* – голубым, полная плотность состояний *Au* – черным; б – полная плотность состояний *Na* – черным.

Результаты расчета плотности состояний кристалла *NaAu* показаны на рис. 2 д. Результаты расчета DOS указывает на то, что *NaAu* является металлом, что совпадает с более ранними расчетами DOS *NaAu*, например [9, 16, 17]. В случае *NaAu* на уровне Ферми имеется небольшая узкая зона и основная зона с максимумом плотности состояний, расположенная при $-3,20$ эВ, и ее зона образована в основном электронами атомов *Au* 5*d*. Вклад электронов *Na* в валентную зону незначителен и указывает на перенос заряда от атомов натрия к атомам золота.

В Таблице 1 приведены суммарные сведения о изменении ширины запрещенной зоны и положения энергетического положения максимума валентной зоны относительно уровня Ферми для различных толщин 2*D*-слоев интерметаллидов *NaAu*.

Таблица 1. Расчетные свойства 2D-слоев $NaAu$, включая ширину запрещенной зоны E_g и максимум валентной зоны E_{VBM} .

Количество монослоев	E_g , эВ	E_{VBM} , эВ
1	1,87	-1,22
2	0,81	-0,23
3	-	0
4	-	0
кристалл	-	0

Следовательно, одно- и двухслойные 2D-слои $NaAu$ являются полупроводниками, в отличие от более толстых 2D-слоев $NaAu$ и кристалла $NaAu$. Это согласуется с тем, что при адсорбции атомов Na на поверхности Au после нанесения более одного монослоя атомов Na происходит формирование полупроводниковой пленки различной стехиометрии, а при напылении двух монослоев атомов Na предполагалось формирование монослоя $NaAu$ [6].

4. Заключение

Расчет DOS 2D-слоев интерметаллидов $NaAu$ показал, что они могут образовывать полупроводниковые 2D-слои, в отличие от кристалла $NaAu$. Это подтверждает экспериментальный факт, полученный при исследовании электронно-стимулированной десорбции атомов натрия в системе (Na/Na_xAu_y), что Na_xAu_y являются полупроводниками. Для однослойных пленок $NaAu$ ширина запрещенной зоны составляет 1,87 эВ. Ширина запрещенной зоны уменьшается с увеличением толщины 2D-слоев интерметаллида. Для 2D-слоя $NaAu$ переход полупроводник-металл происходит для трех монослоев $NaAu$.

Библиографический список:

1. **Spicer, W.E.** Photoemission and band structure of the semiconducting compound $CsAu$ / W.E. Spicer // Physical Review. – 1962. – V. 125. – I. 4. – P. 1297-1299. DOI: 10.1103/PhysRev.125.1297.
2. **Jansen, M.** The chemistry of gold as an anion / M. Jansen // Chemical Society Reviews. – 2008. – V. 37. – I. 9. – P. 1826-1835. DOI: 10.1039/b708844m.
3. **Priecel, P.** Anisotropic gold nanoparticles: Preparation and applications in catalysis / P. Priecel, H. Adekunle Salami, S. Romen et al. // Chinese Journal of Catalysis. – 2016. – V. 37. – I. 10. – P. 1619-1650. DOI: 10.1016/S1872-2067(16)62475-0.
4. **Jamkhande, P.G.** Metal nanoparticles synthesis: An overview on methods of preparation, advantages and disadvantages, and applications / P.G. Jamkhande, N.W. Ghule, A.H. Bamer, M.G. Kalaskar // Journal of Drug Delivery Science and Technology. – 2019. – V. 53. – Art. № 101174. – 11 p. DOI: 10.1016/j.jddst.2019.101174.
5. **Korotcenkov, G.** Conductometric gas sensors based on metal oxides modified with gold nanoparticles: a review / G. Korotcenkov, V. Brinzari, B.K. Cho // Microchimica Acta. – 2016. – V. 183. – I. 3. – P. 1033-1054. DOI: 10.1007/s00604-015-1741-z.
6. **Ageev, V.N.** Electron-stimulated desorption of sodium atoms from sodium layers adsorbed on a gold film / V.N. Ageev, Yu.A. Kuznetsov // Physics of the Solid State. – 2008. – V. 50. – I. 2. – P. 379-382. DOI:

10.1134/S1063783408020261.

7. **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.

8. **Кузнецов, Ю.А.** Электронно-стимулированная десорбция атомов цезия, адсорбированных на поверхности золота / Ю.А. Кузнецов, М.Н. Лапушкин // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2015. – Вып. 7. – С. 333-340.

9. **Grosch, G.H.** Chemical trends in gold alkali alloys: A density functional theory study on stability and charge transfer Part I: Gold alkali alloys of the formula MAu / G.H. Grosch, K.-J. Range // Journal of Alloys and Compounds. – 1996. – V. 233. – I. 1-2. – P. 30-38. DOI: 10.1016/0925-8388(96)80030-2.

10. **Sarmiento-Perez, R.** Sodium-gold binaries: novel structures for ionic compounds from an ab initio structural search / R. Sarmiento-Perez, T.F.T. Cerqueira, I. Valencia-Jaime et al. // New Journal of Physics. – 2013. – V. 15. – Art. № 115007. – 9 p. DOI: 10.1088/1367-2630/15/11/115007.

11. **Grosch, G.H.** Chemical trends in gold alkali alloys – a DFT-study on stability and charge transfer Part II: Gold alkali alloys of the formula MAu_5 / G.H. Grosch, K.-J. Range // Journal of Alloys and Compounds. – 1996. – V. 233. – I. 1-2. – P. 39-43. DOI: 10.1016/0925-8388(96)80031-4.

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. – Режим доступа: www.url:https://nisiyara.wixsite.com/burai. – 16.08.2021.

16. **Koenig, C.** Electronic properties of alkali-metal – gold compounds / C. Koenig, N.E. Christensen, J. Kollar // Physical Review B. – 1984. – V. 29. – I. 12. – P. 6481-6488. DOI: 10.1103/PhysRevB.29.6481.

17. **Watson, R.E.** Charge transfer in gold–alkali-metal systems / R.E. Watson, M. Weinert // Physical Review B. – 1994. – V. 49. – I. 11. – P. 7148-7154. DOI: 10.1103/PhysRevB.49.7148.

References:

1. Spicer W.E. Photoemission and band structure of the semiconducting compound $CsAu$, *Physical Review*, 1962, vol. 125, issue 4, pp. 1297-1299. DOI: 10.1103/PhysRev.125.1297.

2. Jansen M. The chemistry of gold as an anion, *Chemical Society Reviews*, 2008, vol. 37, issue 9, pp. 1826-1835. DOI: 10.1039/b708844m.

3. Priece P., Adekunle Salami H., Romen S. et al. Anisotropic gold nanoparticles: Preparation and applications in catalysis, *Chinese Journal of Catalysis*, 2016, vol. 37, issue 10, pp. 1619-1650. DOI: 10.1016/S1872-2067(16)62475-0.

4. Jamkhande P.G., Ghule N.W., Bamer A.H., Kalaskar M.G. Metal nanoparticles synthesis: An overview on methods of preparation, advantages and disadvantages, and applications, *Journal of Drug Delivery Science and Technology*, 2019, vol. 53, art. no. 101174, 11 p. DOI: 10.1016/j.jddst.2019.101174.

5. Korotcenkov G., Brinzari V., Cho B.K. Conductometric gas sensors based on metal oxides modified with gold nanoparticles: a review, *Microchimica Acta*, 2016, vol. 183, issue 3, pp. 1033-1054. DOI: 10.1007/s00604-015-1741-z.

6. Ageev V.N., Kuznetsov Yu.A. Electron-stimulated desorption of sodium atoms from sodium layers adsorbed on a gold film, *Physics of the Solid State*, 2008, vol. 50, issue 2, pp. 379-382. DOI: 10.1134/S1063783408020261.

7. Kuznetsov Yu.A., Lapushkin M.N. Elektronno-stimulirovannaya desorbtsiya atomov kaliya, 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).

8. 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], 2015, issue 7, pp. 333-340. (In Russian).

9. Grosch G.H., Range K.-J. Chemical trends in gold alkali alloys: A density functional theory study on stability and charge transfer Part I: Gold alkali alloys of the formula MAu , *Journal of Alloys and Compounds*, 1996, vol. 233, issue 1-2, pp. 30-38. DOI: 10.1016/0925-8388(96)80030-2.

10. Sarmiento-Perez R., Cerqueira T.F.T., Valencia-Jaime I., et al. Sodium-gold binaries: novel structures for ionic compounds from an ab initio structural search, *New Journal of Physics*, 2013, vol. 15, art. no 115007, 9 p. DOI: 10.1088/1367-2630/15/11/115007.

11. Grosch G.H., Range K.-J. Chemical trends in gold alkali alloys – a DFT-study on stability and charge transfer Part II: Gold alkali alloys of the formula MAu_5 , *Journal of Alloys and Compounds*, 1996, vol. 233, issue 1-2, pp. 39-43. DOI: 10.1016/0925-8388(96)80031-4.

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://nisiyara.wixsite.com/burai> (accessed 16.08.2021).

16. Koenig C., Christensen N.E., Kollar J. Electronic properties of alkali-metal – gold compounds, *Physical Review B*, 1984, vol. 29, issue 12, pp. 6481-6488. DOI: 10.1103/PhysRevB.29.6481.

17. Watson R.E., Weinert M. Charge transfer in gold-alkali-metal systems, *Physical Review B*, 1994, vol. 49, issue 11, pp. 7148-7154. DOI: 10.1103/PhysRevB.49.7148.

Original paper

CALCULATION OF ELECTRONIC STRUCTURE OF 2D NaAu INTERMETALLIC LAYERS

Yu.A. Kuznetsov, M.N. Lapushkin
Ioffe Institute, Saint Petersburg, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2021.13.475

Abstract: The calculation of the density of states of various thicknesses of the 2D-layers of the intermetallic compound has been carried out. 2D-layers of intermetallic compound $NaAu$ are simulated by supercells $NaAu$ (111) $2 \times 2 \times 2$. For a monolayer 2D-layer of an intermetallic compound $NaAu$ the presence of a bandgap with a width of 1,87 eV has been established. An increase in the thickness of the 2D-layers of the intermetallic compound $NaAu$ to two monolayers showed a decrease in the bandgap to 0,81 eV. A further increase in the thickness of the 2D-layers of the intermetallic compound $NaAu$ leads to the disappearance of the band gap, which indicates a semiconductor-metal transition for the 2D-layer of the intermetallic compound $NaAu$ with a thickness of three monolayers. The valence band of the 2D-layer of the intermetallic compound $NaAu$ is formed mainly by Au 5d electrons, with an insignificant contribution from Au 6s and Au 6p electrons. The conduction band of $NaAu$ is formed mainly by Au 6p electrons with an insignificant contribution of electrons Na 3s.

Keywords: *electronic structure, intermetallic compounds, 2D-layer, sodium auride*

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: 15.07.2021; после рецензирования/revised: 16.08.2021; принята/accepted 21.08.2021.