**POLIMORFICZNE NANOSTRUKTURY ZŁOTA: CZY METODY AB INITIO MOGĄ WYJAŚNIĆ ICH STABILNOŚĆ?**

Olga Sikora1,\*, Małgorzata Sternik2,Benedykt R. Jany3, Franciszek Krok3,

Andrzej M. Oleś4, Przemysław Piekarz2

# 1Katedra Fizyki, Politechnika Krakowska, ul. Podchorążych 1, 30-084 Kraków

#  2Instytut Fizyki Jądrowej im. Henryka Niewodniczańskiego, Polska Akademia Nauk,

# W. E. Radzikowskiego 152, 31-342 Kraków

# 3Instytut Fizyki im. M. Smoluchowskiego, Uniwersytet Jagielloński,

#  Prof. Stanisława Łojasiewicza 11, 30-348 Kraków

#  4Instytut Fizyki Teoretycznej, Uniwersytet Jagielloński,

# Prof. Stanisława Łojasiewicza 11, 30-348 Kraków

\*autor korespondencyjny: olga.sikora@pk.edu.pl

 W procesie termicznie indukowanej samoorganizacji cienkiej warstwy złota, naniesionej na powierzchnię Ge(001), dochodzi do wzrostu nanostruktur metalicznych zbudowanych ze złota o nietypowym dla niego uporządkowaniu heksagonalnym [1]. Możliwość kontrolowanej syntezy takich faz otwiera nowe perspektywy zastosowań, np. w katalizie.

Metody obliczeniowe takie jak teoria funkcjonału gęstości (DFT), pozwalające na wyjaśnienie mechanizmów prowadzących do powstania nowych struktur, są ważnym uzupełnieniem obserwacji eksperymentalnych. Ze względu na rolę efektów powierzchniowych w syntezie i stabilizowaniu wzrastających nanostruktur, głównym celem prowadzonych obliczeń było uzyskanie (1) energii powierzchniowej dla różnych płaszczyzn krystalicznych złota i germanu oraz (2) energii związanej z utworzeniem interfejsu złoto-german. Ta ostatnia wielkość może mieć istotne znaczenie dla wyjaśnienia procesu wzrostu heksagonalnych nanostruktur na podłożu krystalicznym.

Zaprezentowane zostaną wyniki obliczeń DFT przeprowadzonych dla kilku heterostruktur złoto-german, zarówno o uporządkowaniu typu *fcc* jak i *hcp* atomów złota. W szczególności zostanie przedyskutowana struktura interfejsów zaobserwowanych w procesie syntezy nanowysp f*cc/hcp* złota na podłożu germanu.

[1] B.R. Jany, N. Goquelin, T. Willhammar, M. Nikiel, K.H.W. van den Bos, A. Janas, K. Szajna, J. Verbeeck, S. van Aert, G. van Fendoloo, and F. Krok, *Controlled growth of hexagonal gold nanostructures during thermally induced self-assembling on Ge(001) surface.* Sci.Rep. **7**, 42420 (2017).