УДК 538.915; 544.034.2; 544.034.5

DOI: 10.17223/00213411/62/3/110

*А.Г. РЯБИЩЕНКОВА, В.М. КУЗНЕЦОВ***АДСОРБЦИЯ И ДИФФУЗИЯ АТОМОВ 1, 2 И 13-Й ГРУПП
НА ПОВЕРХНОСТИ ТелЛУРИДА СУРЬМЫ***

Представлены результаты первопринципных расчетов адсорбции и диффузии адатомов 1, 2 и 13-й групп на (0001)-поверхности топологического изолятора Sb_2Te_3 . Показано, что большинство исследованных атомов имеют минимум энергии в ГЦК-позиции. Исключения составляют бериллий, бор, индий и таллий, для которых наиболее выгодными являются узлы с ГПУ-симметрией. Диффузия адатомов по поверхности (0001) Sb_2Te_3 происходит по двухступенчатому механизму, при котором сначала осуществляется перескок из ГЦК- в ГПУ-позиции, а затем из ГПУ в ГЦК. Для атомов бериллия, бора, индия и таллия порядок прыжков сдвинут, поскольку для них наиболее выгодной с энергетической точки зрения является ГПУ-позиция. Найдены величины барьеров для прыжков по поверхности и характеристические частоты, на базе которых аналитически рассчитаны диффузионные длины. Определены температуры активации диффузии, при которых атом преодолевает одно межатомное расстояние (2.5 Å) за минуту. Показано, что самая высокая температура активации (165 К) соответствует бериллию, а самая низкая (39 К) – цезию.

Ключевые слова: топологический изолятор, метод функционала электронной плотности, адсорбция, диффузия, перенос заряда.

Введение

Исследование топологических изоляторов является актуальной задачей современной физики твердого тела. Топологические изоляторы (ТИ) – это материалы, которые, будучи изоляторами (полупроводниками) в объеме, обладают металлическими состояниями на поверхности [1]. Эти электронные состояния топологически защищены от обратного рассеяния на дефектах (примесях) и локальных искажениях кристаллической решетки. Благодаря этому ТИ имеют огромный потенциал для спинтроники и спинтронных устройств.

Соединение Sb_2Te_3 (ширина запрещенной щели составляет 0.125 эВ) является тетрадимитоподобным топологическим изолятором и принадлежит к классу наиболее исследованных и разработанных топологических изоляторов, таких, как Bi_2Se_3 и Bi_2Te_3 . В настоящее время имеется значительный прогресс в изготовлении высокого качества пленок Sb_2Te_3 , выращенных с помощью молекулярно-лучевой эпитаксии [2]. В отличие от Bi_2Se_3 и Bi_2Te_3 , соединение теллурида сурьмы является *p*-допированным ТИ. Адсорбция различных атомов позволяет управлять такими свойствами ТИ, как положение точки Дирака [3], электростатический потенциал поверхности [4] и химическая активность поверхности [5]. Было обнаружено [6], что при адсорбции монослоя Cs на поверхность Sb_2Te_3 наблюдается линейная дисперсия конуса Дирака и смещение точки Дирака вверх (65 мэВ выше уровня Ферми) на фотоэмиссионных спектрах, тогда как при адсорбции на поверхность Bi_2Se_3 конус «размывается» и точка Дирака смещается вниз (500 мэВ ниже уровня Ферми) [5]. Наличие этих эффектов позволяет управлять свойствами фермионов Дирака на контакте немагнитных атомов и ТИ Sb_2Te_3 .

Как было показано в недавних как теоретических, так и экспериментальных работах, локализация адатомов зависит от температуры [4, 5, 7, 8]. Так, в работе [4] показано, что при низких температурах (3.4 К) и низком покрытии (0.006–0.073 монослоя) атомы Rb располагаются в ямочных позициях (ГЦК или ГПУ, в рамках используемой методики точнее позицию нельзя установить) на поверхности (0001) Bi_2Se_3 . При этом точное расположение адатома в ряде случаев является принципиальным, например, для интерпретации наблюдаемых спектров, измеренных методом фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением. При увеличении температуры наблюдается исчезновение адатомов с поверхности [5, 8]. В указанных работах сделаны предположения о том, что адатомы либо диффундируют до ступеней и интеркалируют в ван-дер-ваальсовские промежутки [5], либо происходит их десорбция [8]. Для того чтобы установить локализацию адатомов, необходимо провести исследование из первых принципов.

* Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-01068 мол_а.

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>