

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
Томский государственный университет  
Сибирское отделение Российской академии наук

# ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

**Сборник материалов  
XIV Российской научной студенческой конференции**

*13–15 мая 2014 г.  
Томск, Россия*

**ОРГАНИЗАТОРЫ:**

- Томский государственный университет
- Сибирский физико-технический институт им. В.Д. Кузнецова при ТГУ
- НОЦ «Физика и химия высокоэнергетических систем»
- Томского государственного университета
- Институт физики прочности и материаловедения СО РАН
- Институт сильноточной электроники СО РАН
- Институт физики полупроводников СО РАН

Томск  
Издательский Дом Томского государственного университета  
2014

## Адсорбция и диффузия атомов щелочных металлов на поверхности $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ : *ab initio*

*А.Г. Рябищенкова*

Томский государственный университет, Томск  
ryaange@gmail.com

## Adsorption and diffusion of an alkali-metal adatoms on the $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ surface: *ab initio*

*A.G. Ryabishchenkova*

Tomsk State University, Tomsk  
ryaange@gmail.com

Топологические изоляторы (ТИ) привлекают значительное внимание в физике конденсированного состояния веществ из-за защищенных поверхностных состояний [1]. Эффект сильного расщепления типа Рашбы поверхностных состояний может обеспечить возможность применения ТИ для создания спиновых полевых транзисторов [2]. Такой эффект возникает при адсорбции атомов щелочных металлов на поверхности ТИ [3]. В экспериментальных работах [3,4] показано, что механизмы взаимодействия отдельных атомов щелочных металлов с поверхностью  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  могут сильно различаться. Частичное исчезновение с поверхности атомов К [3] и Rb [4] в процессе отжига ( $T = 400$  К) объясняется в первом случае термодесорбцией атомов с поверхности, а во втором – интеркаляцией в ван-дер-Ваальсовы промежутки  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ . Поэтому необходимо исследование возможных позиций адсорбции и диффузии на поверхности.

В данной работе адсорбционные позиции атомов на поверхности определялись путем проведения *ab initio* расчетов в рамках метода проекционных плоских волн, реализованного в пакете VASP [5]. Для описания обменно-корреляционного потенциала использовалось обобщенно-градиентное приближение [6]. Исследование проводилось в пределе низких покрытий адсорбатов. В качестве возможных позиций адсорбции в рассмотрении принимались четыре возможные позиции: ГЦК-ямочная, ГПУ-ямочная, мостиковая и вершинная. Энергия адсорбции рассчитывалась по формуле:  $E_{ads} = E_{X, \text{Bi}_2\text{Se}_3} - (E_{\text{Bi}_2\text{Se}_3} + E_X)$ , где  $E_{X, \text{Bi}_2\text{Se}_3}$  и  $E_{\text{Bi}_2\text{Se}_3}$  – полные энергии системы с адсорбированным атомом ( $X$  – сорт адатома) и системы без адатома.  $E_X$  – энергия изолированного  $X$  атома. Поиска переходных состояний и энергетических профилей перемещений атомов

по поверхности использовался метод NEB (метод подталкивания упругой ленты) [7].

В результате проведенного исследования наиболее энергетически выгодными позициями адсорбции оказались ямочные позиции ГЦК и ГПУ типа. Вершинная позиция остается по энергии значительно более невыгодной для всех рассмотренных сортов атомов щелочных металлов.

Затем проведен расчет возможного пути миграции атомов по поверхности между найденными двумя адсорбционными позициями. Было обнаружено, что мостиковая позиция в данном случае является переходным состоянием для всех рассмотренных адсорбатов. Далее, на основе данных о переходных состояниях, были определены величины активационных барьеров. С увеличением размера атома от Li до Cs, энергия активации уменьшается от значения 322 мэВ до 110 мэВ.

Знание активационных барьеров позволяет оценить диффузионную длину атома, как функцию температуры [8]. Установлено, что при комнатной температуре, за время наблюдения равное одной минуте, рассчитанные диффузионные длины значительно превосходят величину постоянной решетки  $a$ , исследуемого материала. Так, значение диффузионной длины атома Li, которое является минимальным в указанных условиях, составляет 15 микрон. При комнатных температурах, вне зависимости от сорта адатома скорость диффузии по поверхности достаточно велика.

## Литература

1. *Hasan M., Kane C.* Colloquium: Topological insulators // *Rev. Mod. Phys.* 2010. V. 82, № 4. P. 3045–3067.
2. *Datta S., Das B.* Electronic analog of the electro-optic modulator // *Appl. Phys. Lett.* 1990. T. 56, C. 665–667.
3. *Zhu Z.-H. et al.* Rashba Spin-Splitting Control at the Surface of the Topological Insulator  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ . // *Phys. Rev. Lett.* 2011. V. 107, № 18. P. 186405.
4. *Bianchi M., Hatch R. et al.* Robust surface doping of  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  by rubidium intercalation // *ACS Nano*. 2012. V. 6, № 8. P. 7009–7015.
5. *Kresse G., Furthmuller J.* Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set // *Phys. Rev. B*. 1996. V. 54, № 16. P. 11169–11186.
6. *Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M.* Generalized Gradient Approximation Made Simple // *Phys. Rev. Lett.* 1996. V. 77. P. 3865–3868.
7. *Jonsson H. et al.* Nudged elastic band method for finding minimum energy paths of transitions // *Berne B.J., Cicotti G., Coker D.F., eds.* Classical and Quantum Dynamics in Condensed Phase Simulations. Singapore: World Scientific, 1998. P. 385–404.
8. *Miguel A. Gosalvez, Mikhail M. Otrokov, Nestor Ferrando, Anastasia G. Ryabishchenkova, Andres Ayuela, Pedro M. Echenique, Eugene V. Chulkov.* Low coverage surface diffusion in complex energy landscapes: Analytical solution and application to intercalation in topological insulators. 2014 15 c. // arXiv: 1402 5920.