ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

**МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Перспективные материалы с иерархической структурой
для новых технологий и надежных конструкций»**

**X МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«Химия нефти и газа»**

Томск

Издательский Дом ТГУ

2018

DOI: 10.17223/9785946217408/138

**ДИФФУЗИЯ НЕМАГНИТНЫХ АДАТОМОВ НА ПОВЕРХНОСТИ
ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ИЗОЛЯТОРОВ**

¹Рябищенкова А.Г., ¹Отроков М.М., ¹Кузнецов В.М.

¹Томский государственный университет, Томск, Россия

Топологические изоляторы (ТИ) привлекают значительное внимание в физике конденсированного состояния вещества, так как они являются новым классом материалов, обладающих уникальными свойствами. Уникальность этих материалов заключается в том, что они являются изоляторами (полупроводниками) в объеме, имеющими проводящие состояния на поверхности. Исследование топологических изоляторов является одним из направлений спинтроники, так как на их основе возможна реализация быстродействующих приборов с низким энергопотреблением. Таким образом, свойства поверхности топологических изоляторов вызывают большой интерес так же, как и их модификация при адсорбции различных атомов. Выбор адатомов немагнитных элементов, в свою очередь, связан с тем, что в отношении адсорбции и диффузии адатомов переходных *3d*-металлов (которые используются для осаждения на поверхность ТИ гораздо чаще атомов *4f*-элементов) уже достигнуто определенное понимание как с точки зрения теории, так и с точки зрения эксперимента. Заметим также, что выбор немагнитных адатомов гораздо более широк, что позволяет проведение систематического анализа не только вдоль периода, но и вдоль группы. Среди немагнитных атомов наиболее исследованными являются атомы щелочных металлов. Как было обнаружено в текущих опубликованных работах, адсорбция атомов щелочных металлов на поверхность топологического изолятора Bi_2Se_3 индуцирует возникновение двухмерного электронного газа с эффектом сильного расщепления типа Рашбы. Этот эффект открывает перспективы применения ТИ для создания спиновых полевых транзисторов. Кроме того, при осаждении атомов щелочных металлов существенно снижается химическую активность поверхности ТИ и "обнажается" точка Дирака в фотоэмиссионных экспериментах, проводимых для *p*-допированных ТИ, что также позволяет управлять электростатическим потенциалом поверхности ТИ на атомном масштабе. Отметим, что реализуемость таких эффектов зависит от покрытия адсорбата, температуры его осаждения, а также длительности и температуры отжига.

Наиболее адекватной методикой исследования адсорбции и диффузии в настоящее время являются расчеты из первых принципов, но, несмотря на это, систематическое первопринципное исследование указанной проблемы на данный момент отсутствует. В данной работе представлено систематическое *ab initio* исследование адсорбции и диффузии адатомов 2 и 13 групп на поверхности Bi_2Se_3 и Bi_2Te_3 . Расчеты проведены в рамках метода проекционных плоских волн, реализованного в пакете VASP. Для описания обменно-корреляционного потенциала использовалось обобщенно-градиентное приближение. Рассчитана адсорбционная энергия и геометрия систем адатом/ Bi_2Se_3 и адатом/ Bi_2Te_3 , а также зарядовый перенос в этих системах. Затем проведено исследование с помощью метода упругой ленты (NEB) возможного пути диффузии атомов по поверхности между найденными адсорбционными позициями и найдена энергия активации диффузии. На основе полученных активационных энергий, проведена оценка диффузионных длин как функций температуры для рассмотренных адсорбатов.

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