Отчёт об использовании ресурсов комплекса ИВЦ НГУ

1. Тема работы

Исследование атомных процессов на поверхностях топологических изоляторов.

Основной задачей являлось первопринципное исследование адсорбции и поверхностной диффузии гостевых атомов на поверхности Bi_2Se_3(0001), включая определение предпочтительных адсорбционных положений, энергий адсорбции, минимальных энергетических путей и барьеров диффузии, а также зарядовых и электронных характеристик исследуемых систем.

2. Состав коллектива

Кузнецов Владимир Михайлович, к.ф.-м.н., доцент.

Рябищенкова Анастасия Геннадьевна, к.ф.-м.н., младший научный сотрудник ИФП СО РАН, руководитель работы.

3. Научное содержание работы

3.1. Постановка задачи

В соответствии с первоначальным планом проводилось исследование взаимодействия отдельных атомов с поверхностью тетрадимитоподобных топологических изоляторов. Основное внимание уделялось определению энергетически предпочтительных положений адатомов, энергий адсорбции, барьеров поверхностной диффузии и характеристик, определяющих температурную подвижность адатомов. В качестве основной модельной поверхности рассматривалась Bi_2Se_3(0001).

В ходе развития работы расчёты были распространены на поверхность β-In_2Se_3(0001), что позволило сопоставить адсорбцию и диффузию In и Bi на двух родственных слоистых халькогенидах. Дальнейшее развитие этого направления включало исследование адсорбции Pb на поверхностях $TlBiSe_2$ и Bi_2Se_3.

3.2. Современное состояние проблемы.

Bi_2Se_3 остаётся одним из наиболее изученных трёхмерных топологических изоляторов, при этом модификация его поверхности адсорбированными атомами может существенно влиять на поверхностную электронную структуру [1–4]. В современных экспериментальных и теоретических работах исследуются положения отдельных адатомов, характер их связи и переноса заряда, а также влияние адсорбции на электронные состояния Bi_2Se_3 [1–4]. Поэтому исследование энергетики адсорбции, поверхностной диффузии и зарядового состояния гостевых атомов на Bi_2Se_3(0001) сохраняет актуальность.

1. C. Fan, K. Sakamoto, P. Krüger, “Carrier doping of Bi_2Se_3 surface by chemical adsorption—A DFT study,” Applied Surface Science 643, 158699 (2024). DOI: 10.1016/j.apsusc.2023.158699.

2. K. Holtgrewe, C. Hogan, S. Sanna, “Evolution of Topological Surface States Following Sb Layer Adsorption on Bi_2Se_3,” Materials 14, 1763 (2021). DOI: 10.3390/ma14071763.

3. X. Wang, P. Wang, D. Huang, W. Tan, “Effects of surface modification on the properties of topological surface states in Bi_2Se_3,” Physics Letters A 376, 768–772 (2012). DOI: 10.1016/j.physleta.2011.12.022.

4. A. Weindl, C. S. Setescak, F. J. Giessibl, “Fe Adatoms on Bi_2Se_3 and $TlBiSe_2$: Adsorption Geometry and Influence on the Local Density of States,” The Journal of Physical Chemistry C 130, 9170–9179 (2026). DOI: 10.1021/acs.jpcc.6c01330.

3.3. Выполненные расчёты и методы

Первопринципные расчёты выполнялись методом теории функционала плотности в программном пакете VASP с использованием PAW-потенциалов и приближения GGA-PBE с учётом ван-дер-ваальсового и спин-орбитального взаимодействий.

Для атомов In и Bi были рассчитаны энергии адсорбции на поверхностях Bi_2Se_3(0001) и β-In_2Se_3(0001), а методом NEB определены минимальные энергетические пути и барьеры поверхностной диффузии. Дополнительно проводился анализ переноса заряда методом Бейдера. Для систем Pb/$TlBiSe_2$ и Pb/Bi_2Se_3 рассматривались одиночные адатомы Pb и различные возможные положения на поверхности, сравнивались полные энергии адсорбционных конфигураций и определялись энергетически предпочтительные положения атомов Pb. Расчёты адсорбции стали основой последующего анализа химического взаимодействия и атомной перестройки интерфейса.

4. Полученные результаты

Для атомов In и Bi определены предпочтительные адсорбционные положения на поверхностях Bi_2Se_3(0001) и β-In_2Se_3(0001), рассчитаны энергии адсорбции и барьеры диффузии. Для In барьеры миграции составили 0.158 эВ на Bi_2Se_3 и 0.153 эВ на β-In_2Se_3; для Bi — 0.156 и 0.074 эВ соответственно. Полученные значения свидетельствуют о высокой подвижности адатомов и были использованы для оценки температурных зависимостей коэффициентов и длин поверхностной диффузии.

Расчёты показали, что энергии адсорбции In и Bi на β-In_2Se_3 выше по абсолютной величине, чем на Bi_2Se_3. Сопоставление энергетических характеристик адсорбции и диффузии позволило предложить атомистическую интерпретацию различий морфологической устойчивости при ван-дер-ваальсовой эпитаксии β-In_2Se_3/Bi_2Se_3 и Bi_2Se_3/β-In_2Se_3.

Исследование Pb/$TlBiSe_2$ и Pb/Bi_2Se_3 показало, что уже на стадии адсорбции Pb существенную роль играет его химическое взаимодействие с поверхностным атомами Se. Сопоставление рассчитанных адсорбционных конфигураций и последующих атомных перестроек с данными фотоэмиссионной спектроскопии подтвердило сценарий сильного взаимодействия Pb с поверхностью.

6. Эффект от использования вычислительного комплекса

Ресурсы ИВЦ НГУ использовались для проведения первопринципных расчётов в рамках первоначально заявленного направления исследований и его последующего развития. Значительная часть вычислений была связана с систематическим рассмотрением различных адсорбционных конфигураций гостевых атомов на поверхностях топологических изоляторов:

оптимизацией геометрии, сравнением полных энергий и определением энергетически предпочтительных положений адатомов. Для In и Bi дополнительно выполнялись NEB-расчёты минимальных энергетических путей поверхностной диффузии. Для Pb выполненные расчёты позволили определить наиболее вероятные начальные конфигурации взаимодействия с поверхностью и использовать их при анализе последующих атомных перестроек. Полученные результаты вошли в опубликованные работы.

7. Публикации, содержащие результаты расчётов

1. A. G. Ryabishchenkova, D. I. Rogilo, V. M. Kuznetsov, D. V. Sheglov, A. V. Latyshev, “Adsorption and Diffusion of In and Bi Adatoms on (0001) Surfaces of β-Phase In_2Se_3 and Bi_2Se_3,” 2025 IEEE 26th International Conference of Young Professionals in Electron Devices and Materials (EDM), pp. 1870–1874 (2025). DOI: 10.1109/EDM65517.2025.11096788.

2. R. Flammini et al., “Interface effects of Pb films on $TlBiSe_2$ and Bi_2Se_3 topological insulators,” Physical Review B 114, 045101 (2026). DOI: 10.1103/nxxg-r5b2.