

12,13

Особенности электронной, спиновой и атомной структуры топологического изолятора $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$

© М.В. Филянина¹, И.И. Климовских¹, С.В. Еремеев^{1–3}, А.А. Рыбкина¹, А.Г. Рыбкин^{1,4},
Е.В. Жижин^{1,4}, А.Е. Петухов^{1,4}, И.П. Русинов^{1,3}, К.А. Кох^{1,3,5,6},
Е.В. Чулков^{1,3,7}, О.Е. Терещенко^{1,3,6,8}, А.М. Шикин¹

¹ Санкт-Петербургский государственный университет,
Санкт-Петербург, Россия

² Институт физики прочности и материаловедения СО РАН,
Томск, Россия

³ Томский государственный университет,
Томск, Россия

⁴ Ресурсный центр Санкт-Петербургского государственного университета
„Физические методы исследования поверхности“,
Санкт-Петербург, Россия

⁵ Институт геологии и минералогии им. В.С. Соболева СО РАН,
Новосибирск, Россия

⁶ Новосибирский государственный университет,
Новосибирск, Россия

⁷ Departamento de Física de Materiales UPV/EHU, Centro de Física de Materiales CFM–MPC,
Centro Mixto CSIC–UPV/EHU,
San Sebastián/Donostia, Basque Country, Spain

⁸ Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН,
Новосибирск, Россия

E-mail: rusinovamarie@mail.ru

(Поступила в Редакцию 2 июля 2015 г.)

В окончательной редакции 9 сентября 2015 г.)

Исследованы особенности электронной и спиновой структуры тройного топологического изолятора $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$, характеризующегося высокоэффективными термоэлектрическими свойствами, с использованием фотоэлектронной спектроскопии с угловым и спиновым разрешением, в сравнении с теоретическими расчетами, проведенными в рамках теории функционала плотности. Показано, что уровень Ферми для $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$ располагается в энергетической запрещенной зоне и пересекает топологическое поверхностное состояние (конус Дирака). Теоретические расчеты электронной структуры поверхности демонстрируют, что характер распределения атомов Se на подрешетке Te–Se фактически не влияет на вид дисперсии поверхностного топологического электронного состояния. Спиновая структура этого состояния характеризуется геликоидальной спиновой поляризацией. Исследования поверхности $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$ методом сканирующей туннельной микроскопии выявили атомарную гладкость поверхности образца, сколотого в условиях сверхвысокого вакуума, с величиной постоянной решетки ~ 4.23 Å. Показана стабильность дираковского конуса соединения $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$ к напылению монослоя Pt на поверхность.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ, грантов Санкт-Петербургского государственного университета для научных исследований (№ 11.38.271.2014 и 15.61.202.2015) и грантов Российского фонда фундаментальных исследований (РФФИ № 12-02-00226, 13-02-91327, 14-08-31110 и 13-02-12110). Исследования проводились в том числе в Ресурсном центре СПбГУ „Физические методы исследования поверхности“. Авторы также выражают благодарность сотрудникам Гельмгольц-центра в Берлине за финансовую и техническую поддержку.

1. Введение

В последнее время все больше внимания уделяется новой области науки — спинтронике, где возможность реализации бездиссипативных спиновых токов является одной из ключевых задач. В связи с этим, становятся актуальными исследования так называемых топологических изоляторов, характеризующихся уникальной спиновой электронной структурой поверхностных состояний, которые вследствие требования симметрии обращения

времени оказываются топологически защищенными от внешних немагнитных воздействий. Топологические изоляторы характеризуются запрещенной зоной в объеме и дираковским конусом проводящих состояний на поверхности с геликоидальной спиновой поляризацией. В импульсном пространстве спин-электрона для этих состояний ориентирован перпендикулярно направлению волнового вектора k_{\parallel} и оказывается антипараллельным для противоположных по знаку k_{\parallel} состояний, что обеспечивает возможность разделения тока на состав-

ляющие с различной ориентацией спина и управления ими. При этом, в силу такой спиновой ориентации, топологические поверхностные состояния являются защищенными от обратного рассеяния, что должно приводить к образованию спиновых токов с пониженной диссипацией [1,2]. Кроме того, в силу уникальности электронной структуры поверхностных состояний топологических изоляторов, становятся актуальными исследования эффектов нелинейного транспорта в этих системах, открывающих возможность их применения в области оптоэлектроники [3].

В настоящее время хорошо изучена электронная и спиновая структура поверхностных и объемных состояний широкого класса топологических изоляторов, в первую очередь бинарных соединений типа Bi_2Se_3 и Bi_2Te_3 [4–6]. Данные соединения характеризуются относительно большой величиной запрещенной зоны (~ 0.3 eV для Bi_2Se_3 и ~ 0.15 eV для Bi_2Te_3) и хорошо выраженным дираковским конусом поверхностных состояний в области точки Γ двумерной зоны Бриллюэна. Особенности электронной структуры позволяют данным соединениям демонстрировать топологические свойства при комнатной температуре, что существенно повышает потенциал их прикладного использования.

Модификация электронной структуры топологических изоляторов (положение точки Дирака относительно уровня Ферми и объемных валентных состояний, отсутствие на уровне Ферми состояний зоны проводимости и т.п.) может быть достигнута за счет допирования атомами различных металлов [7,8] или введения третьего компонента в топологические соединения [1,9–12,13]. Отметим, что в большинстве ранее опубликованных работ рассматривались упорядоченные тройные соединения. Так, ранее было показано, что топологические изоляторы тройного типа $\text{Bi}_2\text{Se}_2\text{Te}$ и $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$ характеризуются значительно большей величиной объемной запрещенной зоны в сравнении с бинарными соединениями [11,13]. Дальнейшие исследования тройных топологических изоляторов серии Bi–Te–Se выявили, что изменение концентрации Bi и Se в соединениях приводит к сдвигу уровня Ферми в объемную запрещенную зону, а также изменению положения точки Дирака относительно краев валентной зоны и соответственно к изменению вклада топологических поверхностных состояний в результирующую проводимость [14].

Основная цель настоящей работы заключалась в изучении электронной и спиновой структуры поверхностных состояний топологического изолятора с дробной стехиометрией на подрешетке халькогена $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$. Данное соединение интересно тем, что характеризуется наибольшей шириной запрещенной зоны среди Bi–Te–Se серии [15], а также высокоэффективными термоэлектрическими свойствами, обусловленными высоким значением коэффициента Зеебека для топологического изолятора $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$, в сравнении с известным для бинарного соединения Bi_2Te_3 , -330 $\mu\text{V}/\text{K}$ и -280 $\mu\text{V}/\text{K}$ соответственно [16]. Стояла задача по-

казать, что электронная и спиновая структура топологического изолятора с дробной стехиометрией имеет аналогичные особенности, как и у классических бинарных соединений, и $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$ может быть эффективно использован в спинтронике. Кроме того, интерес представляло исследование устойчивости особенностей электронной и спиновой структуры к напылению атомов Pt на поверхность $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$.

Исследования проводились методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым и спиновым разрешением с использованием синхротронного излучения с линейной поляризацией. Было проведено сравнение экспериментальных результатов с теоретическими расчетами. Морфология поверхности $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$ изучалась методом сканирующей туннельной микроскопии.

2. Эксперимент

Эксперименты по фотоэлектронной спектроскопии с угловым и спиновым разрешением проводились на U125/2SGM и UE112-SGM каналах вывода синхротронного излучения BESSY-II (Гельмгольц-центр, Берлин) с использованием электронного спектрометра, снабженного полусферическим энергоанализатором Scienta R4000, энергетическое разрешение которого составляло ≈ 10 meV, а разрешение по углу — 0.5° . Для получения спектров со спиновым разрешением использовался детектор Мотта с ускоряющим напряжением 26 kV. Для исследования использовался линейно поляризованный пучок. Плоскость поляризации была параллельна направлениям спинов изучаемых состояний. Таким образом, изменение полярного угла (соответствующее изменению k_{\parallel}) производилось в плоскости, параллельной щели анализатора.

Исследование методом сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) выполнено на сканирующем зондовом микроскопе Omicron VT AFM XA в ресурсном центре „Физические методы исследования поверхности“ Научного парка Санкт-Петербургского государственного университета. Измерения проводились в условиях сверхвысокого вакуума при комнатной температуре.

Исследуемые образцы $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$ были выращены из предварительно синтезированных образцов Bi_2Te_3 и Bi_2Se_3 модифицированным вертикальным методом Бриджмена [17]. Топологические изоляторы такого типа имеют слоистую структуру, где каждый слой состоит из пяти атомных слоев. Между собой пятислойные блоки взаимодействуют при помощи ван-дер-ваальсовой связи, а внутри блока реализуется сильное ковалентное взаимодействие. Перед измерениями образцы были сколоты *in situ* в условиях сверхвысокого вакуума при комнатной температуре. Причем скол топологических изоляторов происходит непосредственно по ван-дер-Ваальсову промежутку. Базовое давление в камере в процессе измерений было меньше $1-2 \cdot 10^{-10}$ mbar.

Теоретические расчеты электронной структуры проводились с помощью теории функционала плотности.

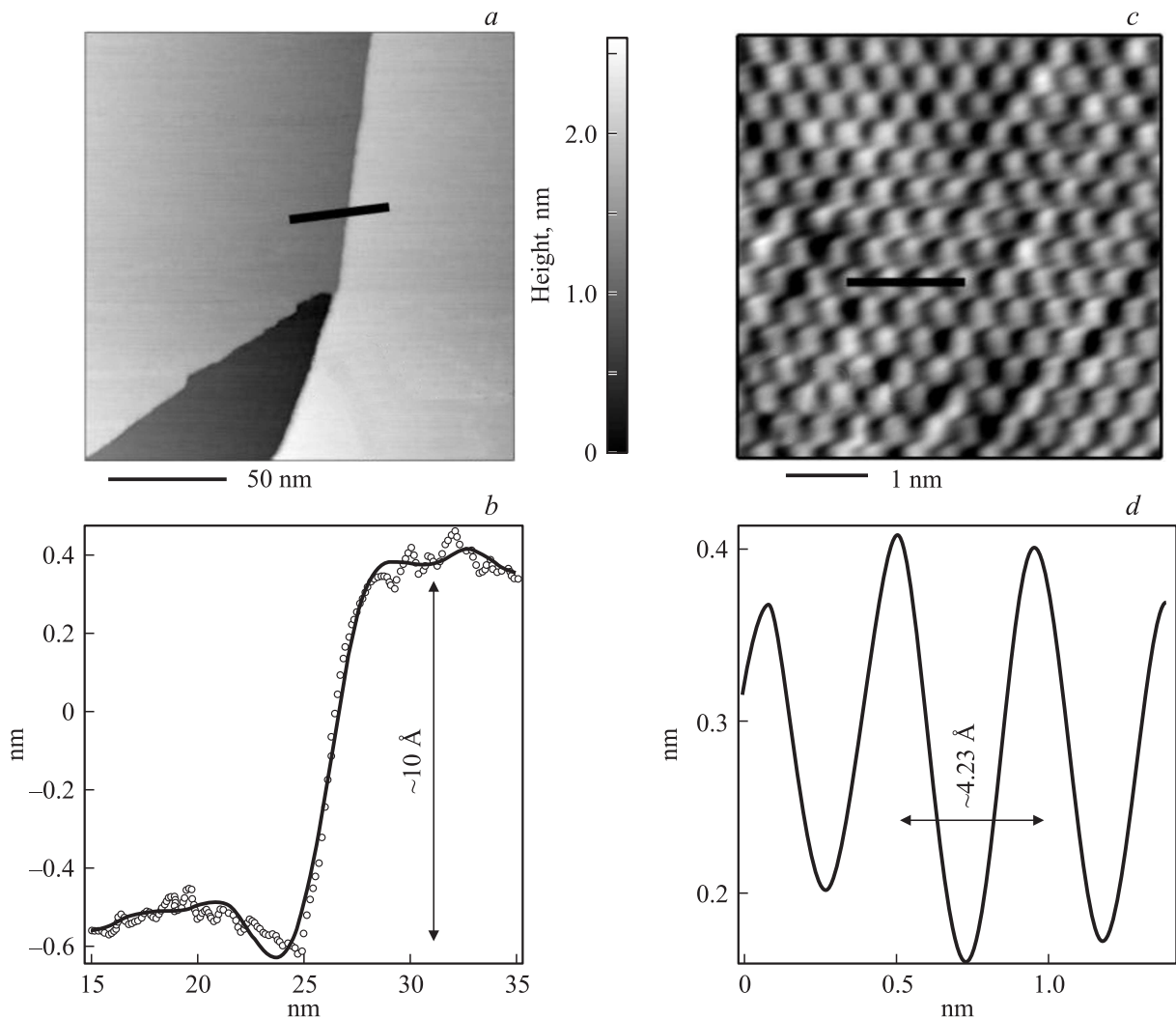


Рис. 1. Панорамное СТМ-изображение чистой поверхности $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$ (напряжение на образце $V_s = +1.32$ В, туннельный ток $I_t = 5$ пА) — *a*. Соответствующий профиль сечения поверхности вдоль черной линии для чистой поверхности $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$ — *b*. СТМ-изображение чистой поверхности $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$ с атомным разрешением ($V_s = +1.9$ В, $I_t = 20$ пА) — *c*. Соответствующий профиль сечения поверхности вдоль черной линии для чистой поверхности $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$ — *d*.

Для моделирования обменно-корреляционного функционала использовалось приближение обобщенного градиента. В расчетах применялись сохраняющие нормировку псевдопотенциалы Hartwigsen–Goedecker–Hutter (HGH) [18]. При расчете электронной структуры соединения с дробной стехиометрией использовалось приближение виртуального кристалла, реализованное в коде ABINIT [19]. Метод виртуального кристалла применяется при изучении разупорядоченных сплавов, в которых перемешаны элементы, принадлежащие одному столбцу таблицы Менделеева, что соответствует рассматриваемым в данной работе системам. Таким образом, потенциал „среднего“ атома представляет собой линейную комбинацию потенциалов Se и Te

$$V_{\text{VGA}} = \eta V_{\text{Te}} + (1 - \eta)V_{\text{Se}}, \quad (1)$$

где η — коэффициент перемешивания, $0 < \eta < 1$. Были рассмотрены два предельных случая разупорядочения

атомов Se на подрешетке Te–Se: однородное замещение атомов Te атомами Se и замещение атомов Te только в центральном слое пятислоя блока.

Расчеты поверхностной электронной структуры проводились в пленочной модели с периодическими граничными условиями. Расчетная пленка содержала шесть пятислоевых блоков и вакуумный промежуток ~ 12 Å, обеспечивающий отсутствие взаимодействия между поверхностями соседних пленок.

Спиновая поляризация пленочных состояний была рассчитана, используя выражения

$$S_i = \hbar/2 \langle \psi_{nk}^* | \sigma_i | \psi_{nk} \rangle, \quad i = 1 \dots 3. \quad (2)$$

Здесь ψ_{nk} — волновая функция, зависящая от номера зоны n и квазивектора \mathbf{k} , а σ_i — матрицы Паули. Волновая функция представляет собой суперпозицию

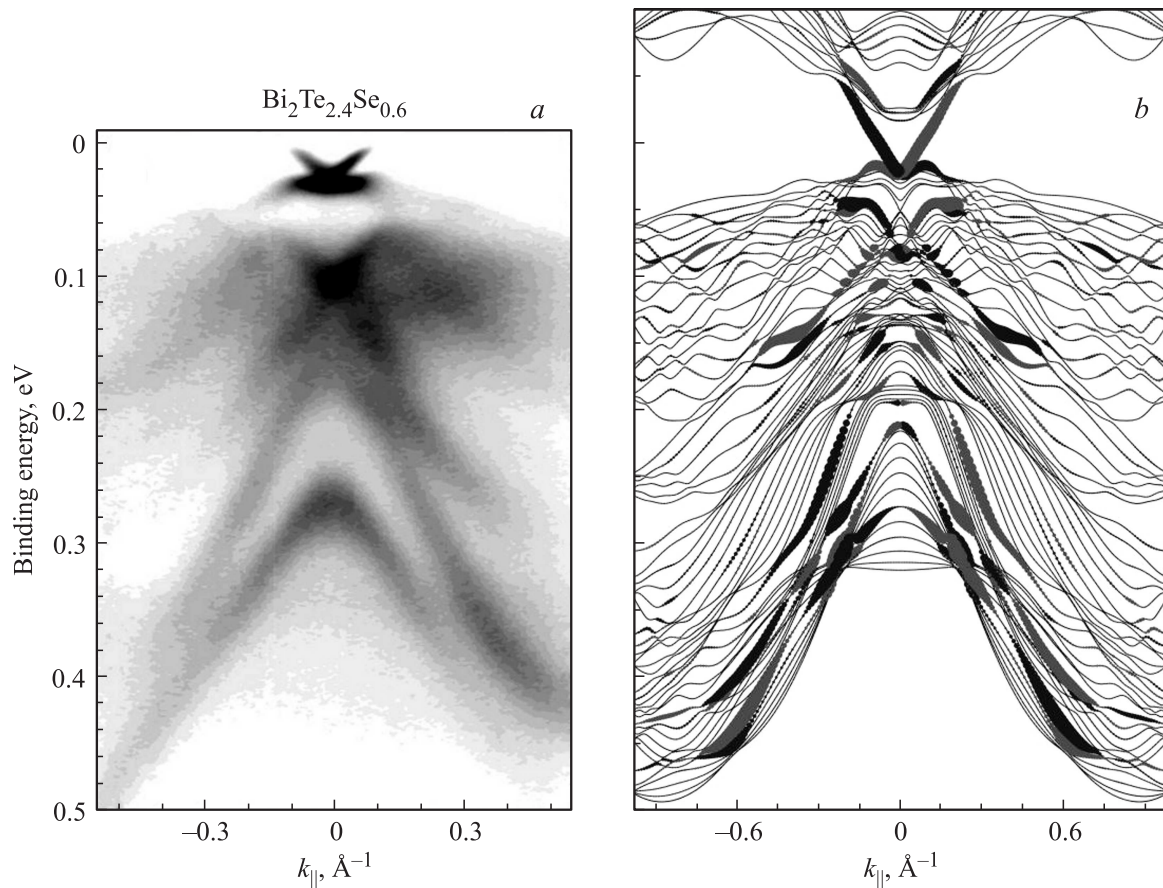


Рис. 2. Дисперсионная зависимость электронных состояний валентной зоны топологического изолятора $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$, измеренная в направлении $\bar{K}-\bar{\Gamma}-\bar{K}$ зоны Бриллюэна при энергии фотонов 62 eV — *a*. Рассчитанный электронный спектр пленки $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$; локализованные поверхностные состояния показаны толстыми линиями — *b*.

плоских волн

$$\psi_{nk} = \sum_{\mathbf{k}+\mathbf{G}<\mathbf{G}_{\max}} c_{nk} \exp(i(\mathbf{k} + \mathbf{G})\mathbf{r}), \quad (3)$$

где c_{nk} — коэффициенты разложения плосковолнового базиса в методе псевдопотенциала. Величина базиса \mathbf{G}_{\max} соответствует энергии обрезания в 14 Хартри.

3. Результаты и обсуждение

Методом сканирующей туннельной микроскопии были проведены исследования атомной структуры поверхности $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$, которая была получена путем скола в условиях сверхвысокого вакуума. Представленное на рис. 1, *a* СТМ-изображение свидетельствует об однородности и гладкости большой области поверхности, образующейся в результате скола. На рис. 1, *b* представлен профиль сечения поверхности вдоль черной сплошной линии (рис. 1, *a*), который свидетельствует о наличии ступенек на поверхности. Можно видеть, что перепад высоты на поверхности составляет $\sim 10 \text{ \AA}$, что соответствует высоте одного пятислойника [20]. Образование подобных ступенек вызвано особенностью синтеза

данного соединения с дробной стехиометрией. На СТМ-изображении с атомным разрешением, представленном на рис. 1, *c*, наблюдается хорошо упорядоченная гексагональная атомная структура поверхности $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$. Для анализа величины латеральной периодичности решетки на рис. 1, *d* приведен профиль сечения поверхности вдоль черной линии (рис. 1, *c*). Можно видеть, что период составляет $\sim 4.23 \text{ \AA}$, что соответствует промежуточному значению между известными значениями для $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$ и Bi_2TeSe_2 топологических соединений [21].

На рис. 2 представлены дисперсии электронных состояний $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$, измеренные методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением вдоль направления $\bar{K}-\bar{\Gamma}-\bar{K}$ поверхностной зоны Бриллюэна при энергии фотонов 62 eV (*a*), в сравнении с теоретически рассчитанной электронной структурой (*b*). Наблюдается хорошее совпадение экспериментальных и теоретических данных. Вблизи уровня Ферми ярко выражен дираковский конус топологических поверхностных состояний. При этом уровень Ферми располагается в объемной запрещенной зоне. Помимо дираковского конуса топологических поверхностных состояний как в экспериментально измеренной, так и в рассчитанной

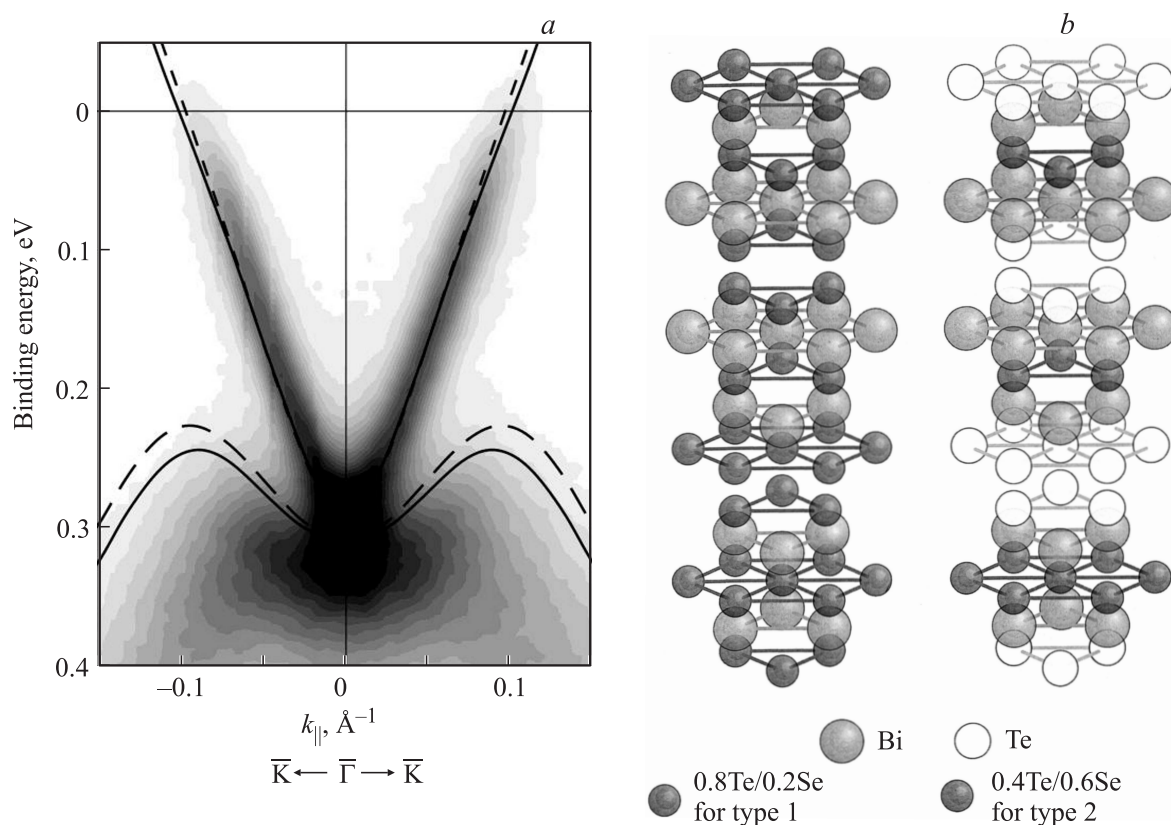


Рис. 3. Теоретически рассчитанная электронная структура соединений $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$ с различным распределением Se на подрешетке Te–Se (тип 1 — сплошная линия; тип 2 — штриховая линия), наложенная на экспериментальную дисперсию топологических поверхностных состояний $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$, измеренную в направлении $\bar{K}-\bar{\Gamma}-\bar{K}$ зоны Бриллюэна при энергии фотонов 52 eV при комнатной температуре — *a*. Атомная структура топологического изолятора $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$ с различным распределением атомов Se — *b*.

электронной структуре $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$ наблюдаются дополнительные поверхностные состояния, локализованные в области больших энергий связи.

На рис. 3, *a* представлена более детально энергетическая область дираковского конуса топологических поверхностных состояний. Теоретически рассчитанные спектры для соединения $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$ при различных вариантах распределения атомов Se на подрешетке Te–Se (тип 1: однородное распределение; тип 2: распределение Se только в центральном слое (рис. 3, *b*)), наложены на экспериментальную дисперсию. Здесь энергии связи теоретических кривых сопоставлены с экспериментально полученными значениями и для наглядности сведены так, чтобы энергетические положения точки Дирака совпадали. Как видно, наблюдаемые поверхностные состояния характеризуются линейной дисперсией. Точка Дирака на экспериментальной дисперсии располагается при энергии связи ~ 0.3 eV, что сравнимо с положением точки Дирака для соединений $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$ и $\text{Bi}_2\text{Se}_2\text{Te}$. Видно, что дисперсия электронных состояний дираковского конуса практически не зависит от распределения Se на подрешетке Te–Se и хорошо согласуется с экспериментом. Было так же выявлено, что в случае соединения

$\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$ групповая скорость дираковского состояния слабо зависит от типа разупорядочения ($4.51 \cdot 10^5$ m/s и $4.75 \cdot 10^5$ m/s для типа разупорядочения 1 и 2 соответственно) и имеет промежуточное значение между групповыми скоростями для Bi_2Te_3 ($4.04 \cdot 10^5$ m/s) и $\text{Bi}_2\text{Te}_2\text{Se}$ ($5.88 \cdot 10^5$ m/s).

На рис. 4, *a* представлены расчеты спиновой структуры дираковского конуса топологических поверхностных состояний $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$. Электронные состояния, характеризующиеся противоположной спиновой поляризацией, изображены разнонаправленными треугольниками. Соответствующие экспериментальные спинразрешенные спектры, измеренные при различных значениях k_{\parallel} относительно нормали к поверхности, представлены на рис. 4, *b*. Направление поляризации падающего света было ориентировано параллельно направлению спинов, что позволило минимизировать влияние геометрии эксперимента на результирующие фотоэлектронные спектры, измеренные со спиновым разрешением, и спиновую структуру начальных состояний [22–24]. Видно, что каждое из состояний конуса является невырожденным и характеризуется собственным направлением спина. Так, при значении $k_{\parallel} = 0.11 \text{ \AA}^{-1}$ преобладает интен-

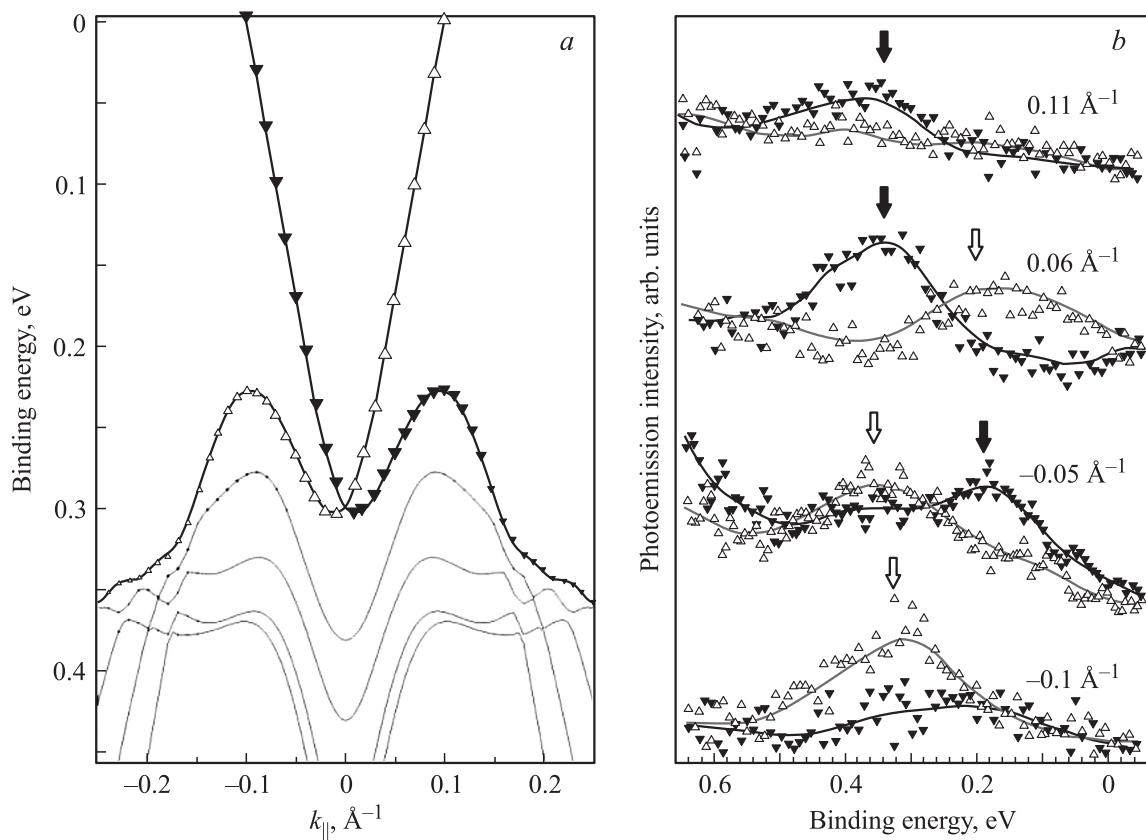


Рис. 4. Теоретически рассчитанная спиновая структура поверхностных топологических состояний — *a*. Размер треугольников пропорционален весу состояний для верхнего пятислойного блока, умноженному на проекцию спиновой поляризации на ось k_{\parallel}^x . Серия фотоэмиссионных спектров со спиновым разрешением, измеренных для нескольких значений k_{\parallel} при комнатной температуре и энергии фотонов 52 eV в направлении $\bar{K}-\bar{\Gamma}-\bar{K}$ зоны Бриллюэна для дираковского конуса топологических поверхностных состояний — *b*. Спектры, соответствующие разным направлениям спина, представлены разнонаправленными треугольниками черного и белого цветов.

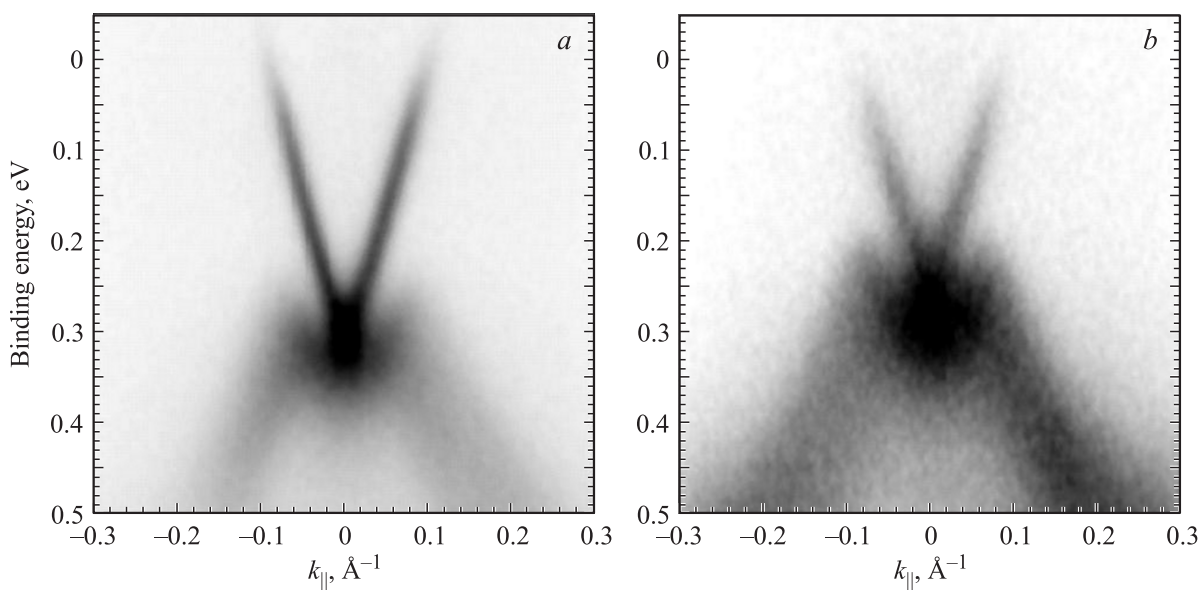


Рис. 5. Экспериментальные спектры, измеренные в направлении $\bar{K}-\bar{\Gamma}-\bar{K}$ зоны Бриллюэна при энергии фотонов 52 eV при комнатной температуре непосредственно после скола образца в условиях сверхвысокого вакуума — *a*, и после длительной экспозиции в сверхвысоком вакууме — *b*.

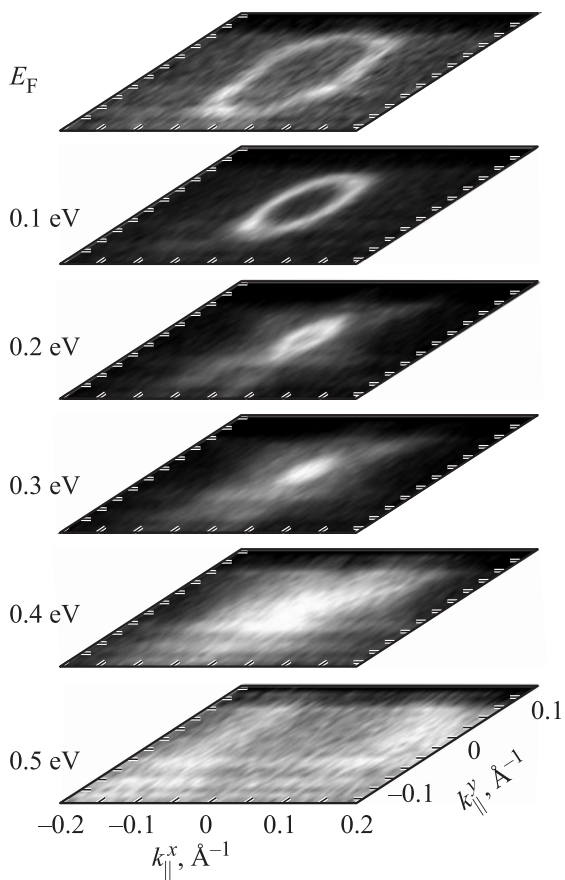


Рис. 6. Экспериментально полученные срезы дираковского конуса при различных энергиях связи в k -пространстве при энергии фотонов 21.2 eV.

сивность фотоэлектронного спектра, соответствующего направлению спина вниз, тогда как при $k_{\parallel} = -0.10 \text{ \AA}^{-1}$ преобладает интенсивность спектра с направлением спина вверх. Таким образом, спиновая поляризация состояний дираковского конуса меняет свой знак при переходе через $\bar{\Gamma}$ -точку поверхностной зоны Бриллюэна, что характерно для топологических изоляторов серии Bi_2Te_3 –(Bi–Te–Se)– Bi_2Se_3 . Кроме того, для состояний дираковского конуса, расположенных по энергии ниже точки Дирака, также наблюдается антисимметричная спиновая поляризация. Можно отметить хорошее согласие экспериментальных данных с теоретическими расчетами, демонстрирующими геликоидальную спиновую поляризацию состояний дираковского конуса, лежащую в плоскости поверхности.

На рис. 5 представлены экспериментальные дисперсионные зависимости топологических поверхностных состояний, измеренные непосредственно после скола образца в сверхвысоких вакуумных условиях (а) и по истечении нескольких часов (б). Измерения проводились при комнатной температуре, с использованием энергии фотонов 52 eV. Известно, что в соединениях типа Bi–Te–Se, как правило, наблюдается сдвиг точки Дирака в сторону больших энергий связи и появление заполненных состояний зоны проводимости на уровне Ферми [25–27]. Было предположено, что данные состояния возникают на поверхности в результате изгиба зон, вызванного допированием n -типа после адсорбции остаточных газов [12] или интеркаляции примесей [28–30]. В противоположность этому нами наблюдался сдвиг точки Дирака для соединения $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$ на 50 meV

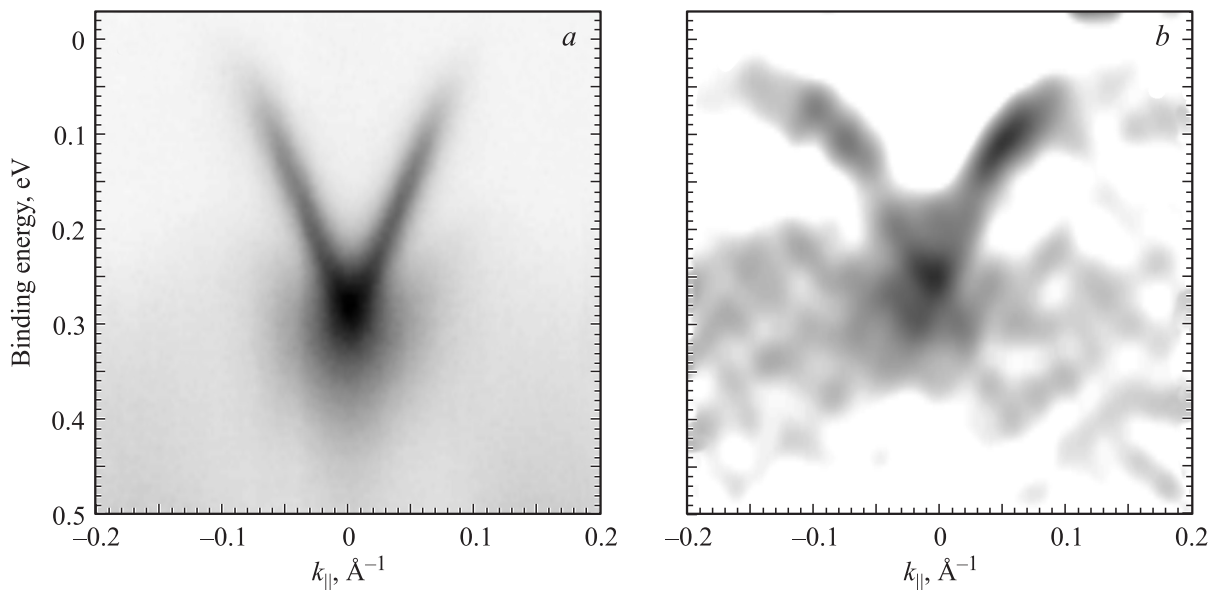


Рис. 7. Экспериментальные спектры дираковского конуса топологических поверхностных состояний для чистой поверхности $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$ при комнатной температуре — а, и после напыления монослойного покрытия Pt на поверхность — б. Для наглядности спектр (б) представлен в виде второй производной интенсивности по энергии d^2N/dE^2 . Измерения проводились в направлении \bar{K} – $\bar{\Gamma}$ – \bar{K} зоны Бриллюэна при энергии фотонов 62 eV.

в область меньших энергий связи, что, по-видимому, связано с адсорбцией CO [27].

Было также выявлено, что для идеально сколотого образца положение уровня Ферми остается постоянным на протяжении продолжительного времени, что свидетельствует об инертности поверхности к адсорбатам [31]. Подобная стабильность поверхности может быть объяснена низкой концентрацией дефектов в исследуемых образцах. Таким образом, в данном эксперименте уровень Ферми всегда оставался локализованным в объемной запрещенной зоне, даже после длительной экспозиции поверхности в сверхвысоких вакуумных условиях.

Для более подробного изучения особенностей топологических поверхностных состояний $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$ были проанализированы срезы дираковского конуса в k -пространстве при различных энергиях связи от уровня Ферми до 0.5 eV, представленные на рис. 6. Как и в большинстве известных топологических изоляторов, вблизи точки Дирака сечение представляет собой окружность, а при удалении от нее сечение конуса испытывает гексагональное искажение. На уровне Ферми для $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$ наблюдаемое гексагональное искажение существенно меньше, чем в области ниже точки Дирака, где наблюдается уже звездообразная структура. Последнее свидетельствует о значительном смешивании топологических поверхностных состояний с состояниями валентной зоны в области больших энергий связи.

Для исследования устойчивости электронной структуры $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$ к изменениям, происходящим на поверхности, производилось напыление монослойного покрытия Pt на чистую поверхность соединения. На рис. 7, *a* и *b* представлены дисперсионные зависимости дираковского конуса электронных состояний для чистого топологического изолятора $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$ и после напыления монослоя Pt соответственно. Измерения проводились при энергии фотонов 62 eV в $\Gamma\bar{K}$ -направлении поверхностной зоны Бриллюэна. На рис. 7, *b* для наглядности спектр представлен в виде второй производной интенсивности по энергии d^2N/dE^2 . Можно видеть, что при напылении атомов Pt на поверхность дираковский конус сохраняется, и в области точки Дирака не происходит нарушения линейности дисперсионной зависимости. Наблюдается лишь незначительный сдвиг точки Дирака в область меньших энергий связи на величину ~ 0.05 eV, однако раствор дираковского конуса, при этом, остается неизменным. Таким образом, состояния дираковского конуса для топологического изолятора $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$ демонстрируют устойчивость к напылению атомов Pt на поверхность.

4. Заключение

Методами фотоэлектронной спектроскопии с угловым и спиновым разрешением проведены исследования особенностей электронной и спиновой структуры топологического изолятора $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$, обладающего высоко-

эффективными термоэлектрическими свойствами. Показано, что соединение $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$ характеризуется дираковским конусом топологических поверхностных состояний с геликоидальной спиновой структурой. Уровень Ферми для данного соединения располагается в области объемной запрещенной зоны. При этом положение уровня Ферми остается стабильным с течением времени независимо от температуры образца. Представленные теоретические расчеты электронной структуры, хорошо согласующиеся с экспериментальными спектрами, демонстрируют, что дисперсионная зависимость дираковского конуса электронных состояний, определяемая концентрацией атомов Se, не зависит от характера распределения Se на подрешетке Te–Se. Исследования методом сканирующей туннельной микроскопии показали, что в результате вакуумного скола $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$ образуется равномерная, однородная на больших площадях поверхность, с гексагональной атомной структурой и латеральной периодичностью 4.23 Å. Кроме того, было показано, что напыление монослойного покрытия атомов Pt на поверхность $\text{Bi}_2\text{Te}_{2.4}\text{Se}_{0.6}$ не приводит к существенным изменениям электронной структуры данного соединения и дираковский конус топологических поверхностных состояний сохраняется после напыления. Последний факт свидетельствует о возможности использования контактов Pt с топологическим изолятором в спинтронике.

Список литературы

- [1] M.Z. Hasan, C.L. Kane. *Rev. Mod. Phys.* **82**, 3045 (2010).
- [2] C.L. Kane, J.E. Moore. *Phys. World* **24**, 32 (2011).
- [3] P. Olbrich, L.E. Golub, T. Herrmann, S.N. Danilov, H. Plank, V.V. Bel'kov, G. Mussler, Ch. Weyrich, C.M. Schneider, J. Kampmeier, D. Grützmacher, L. Plucinski, M. Eschbach, S.D. Ganichev. *Phys. Rev. Lett.* **113**, 096 601 (2014).
- [4] Y. Xia, D. Qian, D. Hsieh, L. Wray, A. Pal, H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, Y.S. Hor, R.J. Cava, M.Z. Hasan. *Nat. Phys.* **5**, 398 (2009).
- [5] Y.L. Chen, J.G. Analytis, J.-H. Chu, Z.K. Liu, S.-K. Mo, X.L. Qi, H.J. Zhang, D.H. Lu, X. Dai, Z. Fang, S.C. Zhang, I.R. Fisher, Z. Hussain, Z.-X. Shen. *Science* **325**, 178 (2009).
- [6] S.V. Eremeev, Yu.M. Koroteev, E.V. Chulkov. *JETP Lett.* **91**, 387 (2010).
- [7] D. Hsieh, Y. Xia, D. Qian, L. Wray, J.H. Dil, F. Meier, J. Osterwalder, L. Patthey, J.G. Checkelsky, N.P. Ong, A.V. Fedorov, H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, Y.S. Hor, R.J. Cava, M.Z. Hasan. *Nature* **460**, 1101 (2009).
- [8] J. Henk, M. Flieger, I.V. Maznichenko, I. Mertig, A. Ernst, S.V. Eremeev, E.V. Chulkov. *Phys. Rev. Lett.* **109**, 076 801 (2012).
- [9] S.V. Eremeev, G. Landolt, T.V. Menshchikova, B. Slomski, Y.M. Koroteev, Z.S. Aliev, M.B. Babanly, J. Henk, A. Ernst, L. Patthey, A. Eich, A.A. Khajetoorians, J. Hagemeyer, O. Pietzsch, J. Wiebe, R. Wiesendanger, P.M. Echenique, S.S. Tsirkin, I.R. Amiraslanov, J.H. Dil, E.V. Chulkov. *Nat. Commun.* **3**, 635 (2012).

- [10] I.V. Silkin, Yu.M. Koroteev, S.V. Eremeev, G. Bihlmayer, E.V. Chulkov. *JETP Lett.* **94**, 217 (2011).
- [11] K. Miyamoto, A. Kimura, T. Okuda, H. Miyahara, K. Kuroda, H. Namatame, M. Taniguchi, S.V. Eremeev, T.V. Menshchikova, E.V. Chulkov, K.A. Kokh, O.E. Tereshchenko. *Phys. Rev. Lett.* **109**, 166 802 (2012).
- [12] T. Okuda, T. Maegawa, M. Ye, K. Shirai, T. Warashina, K. Miyamoto, K. Kuroda, M. Arita, Z.S. Aliev, I.R. Amiraslanov, M.B. Babanly, E.V. Chulkov, S.V. Eremeev, A. Kimura, H. Namatame, M. Taniguchi. *Phys. Rev. Lett.* **111**, 206 803 (2013).
- [13] Z. Ren, A.A. Taskin, S. Sasaki, K. Segawa, Y. Ando. *Phys. Rev. B* **82**, 241 306 R (2010).
- [14] M. Neupane, S.-Y. Xu, L.A. Wray, A. Petersen, R. Shankar, N. Alidoust, C. Liu, A. Fedorov, H. Ji, J.M. Allred, Y.S. Hor, T.-R. Chang, H.-T. Jeng, H. Lin, A. Bansil, R.J. Cava, M.Z. Hasan. *Phys. Rev. B* **85**, 235 406 (2012).
- [15] H. Ji, J.M. Allred, M.K. Fuccillo, M.E. Charles, M. Neupane, L.A. Wray, M.Z. Hasan, R.J. Cava. *Phys. Rev. B* **85**, 201 103 R (2012).
- [16] A.M. Shikin, I.I. Klimovskikh, S.V. Eremeev, A.A. Rybkina, M.V. Rusinova, A.G. Rybkin, E.V. Zhizhin, J. Sánchez-Barriga, A. Varykhalov, I.P. Rusinov, E.V. Chulkov, K.A. Kokh, V.A. Golyashov, V. Kamyshlov, O.E. Tereshchenko. *Phys. Rev. B* **89**, 125 416 (2014).
- [17] K.A. Kokh, B.G. Nenashev, A.E. Kokh, G.Yu. Shvedenkov. *J.Cryst. Growth* **275**, 2129 (2005).
- [18] C. Hartwigsen, S. Goedecker, J. Hutter. *Phys. Rev. B* **58**, 3641 (1998).
- [19] X. Gonze, B. Amadon, P.-M. Anglade, J.-M. Beuken, F. Bottin, P. Boulanger, F. Bruneval, D. Caliste, R. Caracas, M. Cote, T. Deutsch, L. Genovese, Ph. Ghosez, M. Giantomassi, S. Goedecker, D.R. Hamann, P. Hermet, F. Jollet, G. Jomard, S. Leroux, M. Mancini, S. Mazevet, M.J.T. Oliveira, G. Onida, Y. Pouillon, T. Rangel, G.-M. Rignanese, D. Sangalli, R. Shaltaf, M. Torrent, M.J. Verstraete, G. Zerah, J.W. Zwanziger. *Comput. Phys. Commun.* **180**, 2582 (2009).
- [20] M.M. Otrokov, S.D. Borisova, V. Chis, M.G. Vergniory, S.V. Eremeev, V.M. Kuznetsov, E.V.Chulkov. *JETP Lett.* **96**, 714 (2013).
- [21] V.A. Golyashov, K.A. Kokh, S.V. Makarenko, K.N. Romanyuk, I.P. Prosvirin, A.V. Kalinkin, O.E. Tereshchenko, A.S. Kozhukhov, D.V. Sheglov, S.V. Eremeev, S.D. Borisova, E.V. Chulkov. *Appl. Phys.* **112**, 113 702 (2012).
- [22] C.H. Park, S.G. Louie. *Phys. Rev. Lett.* **109**, 09 760 (2012).
- [23] C. Jozwiak, C.-H. Park, K. Gotlieb, C. Hwang, D.-H. Lee, S.G. Louie, J.D. Denlinger, C.R. Rotundu, R.J. Birgeneau, Z. Hussain, A. Lanzara. *Nature Phys.* **9**, 293 (2013).
- [24] J. Sanchez-Barriga, A. Varykhalov, J. Braun, S.-Y. Xu, N. Alidoust, O. Kornilov, J. Minár, K. Hummer, G. Springholz, G. Bauer, R. Schumann, L.V. Yashina, H. Ebert, M.Z. Hasan, O. Rader. *Phys. Rev. X* **4**, 011 046 (2014).
- [25] Z.-H. Zhu, G. Levy, B. Ludbrook, C.N. Veenstra, J.A. Rosen, R. Comin, D. Wong, P. Dosanjh, A. Ubaldini, P. Syers, N.P. Butch, J. Paglione, I.S. Elfimov, A. Damascelli. *Phys. Rev. Lett.* **107**, 186 405 (2011).
- [26] M.S. Bahramy, P.D.C King, A. de la Torre, J. Chang, M. Shi, L. Patthey, G. Balakrishnan, Ph. Hofmann, R. Arita, N. Nagaosa, F. Baumberger. *Nature Commun.* **3**, 1159 (2012).
- [27] P.D.C. King, R.C. Hatch, M. Bianchi, R. Ovsyannikov, C. Lupulescu, G. Landolt, B. Slomski, J.H. Dil, D. Guan, J.L. Mi, E.D.L. Rienks, J. Fink, A. Lindblad, S. Svensson, S. Bao, G. Balakrishnan, B.B. Iversen, J. Osterwalder, W. Eberhardt, F. Baumberger, Ph. Hofmann. *Phys. Rev. Lett.* **107**, 096 802 (2011).
- [28] S.V. Eremeev, M.G. Vergniory, T.V. Menshchikova, A.A. Shaposhnikov, E.V. Chulkov. *New J. Phys.* **14**, 113 030 (2012).
- [29] M.G. Vergniory, T.V. Menshchikova, S.V. Eremeev, E.V. Chulkov. *JETP Lett.* **95**, 213 (2012).
- [30] G. Zhang, H. Qin, J. Teng, J. Guo, Q. Guo, X. Dai, Z. Fang, K. Wua. *Appl. Phys. Lett.* **95**, 053 114 (2009).
- [31] S. Nakajima. *J. Phys. Chem. Solids* **24**, 479 (1963).