

Фотоэлектронная дифракция и голография как комплексный метод исследования структуры поверхности на примере Fe/Bi₂Te₃

И.И. Огородников¹, А.С. Ворох¹, М.В. Кузнецов¹, Л.В. Яшина²

¹ ИХТТ УрО РАН, Екатеринбург, 620990, Первомайская, 91

² МГУ, Москва, 119992, Ленинские горы, 1/3

эл. почта: i_ogorodnikov@mail.ru

Методы рентгеновской фотоэлектронной дифракции (РФД) и голографии (ФГ) позволяют решать обратную и прямую задачи структурного анализа, соответственно, и опираются на одни и те же экспериментальные данные. Традиционный подход к определению структуры методом проб и ошибок, реализованный в РФД методе, состоит в сопоставлении экспериментально полученных дифракционных картин с вычисленными на основе пробной модели. В зависимости от величины количественного показателя, так называемого *R*-фактора, пробная модель принимается или отвергается. Подбор структуры таким образом может занимать довольно много времени и в случае сложных систем, таких, как адсорбция атомов железа на поверхности Bi₂Te₃, существует вероятность ошибки при выборе начальной модели структуры. Второй подход, появившийся относительно недавно и нашедший применение в ФГ методе, основан на решении прямой задачи, которая заключается в восстановлении из голограммы трехмерного изображения объекта □ атомов ближайшего окружения эмиттера. Поскольку изображение является усреднением для всех эмиттеров, попавших в область облучения, то полученное изображение можно называть изображением структуры лишь в простейшем случае, например, чистых поверхностей металлов. Чтобы свести недостатки методов РФД и ФГ к минимуму, нами предложено использовать их вместе [1].

Эксперименты проведены на линии синхротрона BESSY II (Берлин) U49-2 PGM-1, где с помощью тороидального анализатора записаны дифракционные картины на поверхности Fe/Bi₂Te₃(111) для эмиссии из состояний Bi 4*f*, Te 4*d* и Fe 3*p* с разной степенью покрытия железа: 1.2 ML и 2.3 ML. Для железа удалось получить картину дифракции и, следовательно, эти атомы располагаются упорядоченно. Они либо внедрены в решетку теллурида, либо расположены на поверхности в виде адатомов или кластеров со строгим порядком. Нами впервые предложено использовать метод ФГ для создания начальной модели поверхности. Чтобы правильно идентифицировать наблюдаемые на изображении артефакты и накладывающиеся друг на друга позиции атомов ближайшего окружения эмиттеров, расположенных на разной глубине под поверхностью, для сравнения были рассчитаны голограммы для кластеров известной структуры и из них восстановлены аналогичные изображения. Путем сравнительного анализа ближайшего окружения атомов-эмиттеров разного сорта построена модель, согласно которой атомы железа размещаются в верхнем блоке из пяти слоев в междоузлиях под слоем атомов теллура и над слоем атомов висмута. Дальнейшее уточнение структуры (межслоевых расстояний, сорта атома в той или иной наблюдаемой позиции и др.) проводили с помощью *R*-факторного анализа в рамках РФД метода. Пространственное разрешение метода РФД оказывается выше, чем ФГ и составляет 0.02 Å. Полученная модель поверхности хорошо согласуется с результатами квантовохимических расчетов.

Работа поддержана РФФИ гранты №14-02-31716 мол_а и №13-03-96032.

Литература

[1] M.V. Kuznetsov, L.V. Yashina et al. Atomic structure of Bi₂Se₃ and Bi₂Te₃ (111) surfaces probed by photoelectron diffraction and holography. *Phys. Rev. B*. 2015. 91. 085402.