


Форма «Т». Титульный лист отчета о выполнении проекта

Название проекта: Магнитно-упорядоченные 2D системы с Дираковским конусом электронных состояний как ключевые материалы для устройств спинтроники и топологических квантовых компьютеров	Номер проекта: 18-12-00062	
	Код типа проекта: ОНГ-П(2021)	
	Отрасль знания: 02	
Фамилия, имя, отчество (при наличии) руководителя проекта: Шикин Александр Михайлович	Контактные телефон и e-mail руководителя проекта: +79500267453, ashikin@inbox.ru	
Полное и краткое название организации, через которую осуществляется финансирование проекта: федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Санкт-Петербургский государственный университет" СПбГУ, Санкт-Петербургский государственный университет		
Объем средств, фактически полученных от РНФ в 2021 г.: 6000 тыс. руб.	Год начала проекта: 2021	Год окончания проекта: 2022
Объем финансирования*, запрашиваемый на 2022 год: 6000 тыс. руб. <i>* Не может превышать объем средств, указанный на соответствующий год в соглашении между Российским научным фондом, руководителем проекта и организацией о предоставлении гранта на проведение фундаментальных научных исследований и поисковых научных исследований, дополнительных соглашениях к данному соглашению (далее – соглашение).</i>		
Гарантирую, что при подготовке отчета не были нарушены авторские и иные права третьих лиц и/или имеется согласие правообладателей на представление в РНФ материалов и их использование РНФ для проведения экспертизы и для их обнародования.		
Подпись** руководителя проекта _____/А.М. Шикин/		Дата подачи отчета: 10.12.2021 г.
Подпись** руководителя организации*** _____/_____/		
Печать (при наличии) организации		

** Подписи должны быть расшифрованы.

*** Либо уполномоченного представителя, действующего на основании доверенности или распорядительного документа. В случае подписания формы уполномоченным представителем организации (в т.ч. – руководителем филиала) к печатному экземпляру отчета прилагается копия распорядительного документа или доверенности, заверенная печатью организации.

Отчет о выполнении проекта
№ 18-12-00062
«Магнитно-упорядоченные 2D системы с Дираковским конусом электронных состояний как ключевые материалы для устройств спинтроники и топологических квантовых компьютеров»,
в 2021 году

Номер регистрации сведений о начинаемой научно-исследовательской работе в единой государственной информационной системе учета научно-исследовательских, опытно-конструкторских и технологических работ гражданского назначения (rosrid.ru):

В соответствии с Постановлением Правительства Российской Федерации от 12 апреля 2013 г. № 327 «О единой государственной информационной системе учета научно-исследовательских, опытно-конструкторских и технологических работ гражданского назначения».

AAAA-A18-118070590081-8

1.1. Заявленный в проекте план работы научного исследования на отчетный период

Формируется в соответствии с заявкой на участие в конкурсе.

1. Сравнительное исследование особенностей электронной, спиновой структуры и магнитных свойств магнитно-упорядоченных топологических изоляторов со стехиометриями $MnBi_2Te_4$ и $MnSb_2Te_4$, а также $MnSb(2-x)Bi_xTe_4$ с промежуточным положением точки Дирака относительно уровня Ферми. Изучение модуляций электронных и магнитных свойств будет проведено методами фотоэлектронной спектроскопии с угловым и спиновым разрешениями и сверхпроводящей магнитометрии при различных температурах (2-300 К). Анализ зависимости запрещенной зоны в точке Дирака от структуры, концентрации магнитных металлов, стехиометрии образцов и температуры. Методами сканирующей туннельной и атомно-силовой зондовой микроскопии (в том числе магнитной) будет исследована атомная морфология и поверхностная структуры исследуемых систем.
2. Изучение возможностей реализации поверхностного магнитоэлектрического эффекта для $MnBi_2Te_4$. Исследование возможности модуляции величины щели в точке Дирака и индуцированной поверхностной намагниченности за счет вариации внешнего электрического поля для магнитно-упорядоченных ($MnBi_2Te_4$) и магнитно-легированных топологических изоляторов атомами магнитных переходных и редкоземельных металлов.
3. Исследование влияния легирования атомами магнитных переходных и редкоземельных металлов различной концентрации на электронную и спиновую структуры 2D Рашба систем на основе $BiTeI$, а также изменения величины энергетической щели, открываемой в точке Крамерса, при вариации концентрации легирующих примесей.
4. Изучение эффектов индуцированного спин-орбитального и обменного взаимодействий в графен-содержащих системах, сформированных на поверхности монокристаллических металлических пленок и монокристаллов SiC , и их модуляции при интеркаляции под графен атомов тяжелых (Au) и магнитных (Co, Mn) металлов. Анализ электронной и спиновой структуры в области запрещенной зоны, открываемой в точке Дирака. Анализ величины индуцированного спинового расщепления π -состояний графена в зависимости от типа металла, контактирующего с графеном, и поверхностной кристаллической структуры формируемой системы.

Подготовка 4 статей к публикации.

Планируются командировки в центры синхротронного излучения Helmholtz-Zentrum Berlin (HZB) (BESSY II г. Берлин, Германия), Elettra (Триест, Италия), HiSOR (Хиросима, Япония) для проведения исследований в рамках проекта электронной и спиновой структуры систем с Дираковским конусом электронных состояний при использовании высокоинтенсивного синхротронного излучения с варьируемой поляризацией и энергией. (Поездки 2-3 человек в каждый из перечисленных центров синхротронного излучения)

Планируются командировки (или оплата участия в онлайн мероприятиях) для участия в международных и российских научных конференциях для представления научных результатов и их обсуждения с ведущими российскими учеными и учеными ведущих мировых центров по исследуемым научным проблемам.

- XXV международный симпозиум "Нанозифика и наноэлектроника",
- Conference "New Trends in Topological Insulators 2021" (NTTI),

- 5th edition of the European Workshop on Epitaxial Graphene and 2D Materials (EWEG2D'21), May 25-29, 2021
- 15th International Conference "Advanced Carbon NanoStructures" (ACNS'2021) (состоится в офлайн формате только в случае снятия ограничений)

1.2. Заявленные научные результаты на конец отчетного периода

Формируется в соответствии с заявкой на участие в конкурсе.

- будет проведено комплексное сравнительное изучение особенностей электронной, спиновой структуры и магнитных свойств магнитно-упорядоченных топологических изоляторов со стехиометриями $MnBi_2Te_4$ и $MnSb_2Te_4$, а также $MnSb(2-x)Bi_xTe_4$ с промежуточным положением точки Дирака относительно уровня Ферми. Будет изучена модуляция электронных и магнитных свойств. Анализ будет проведен методами фотоэлектронной спектроскопии с угловым и спиновым разрешениями и сверхпроводящей магнитометрии при различных температурах (2-300 K). Будут проанализированы зависимости запрещенной зоны в точке Дирака от структуры, концентрации магнитных металлов, стехиометрии образцов и температуры. Методами сканирующей туннельной и атомно-силовой зондовой микроскопии (в том числе магнитной) будет исследована атомная морфология и поверхностная структуры исследуемых систем.
- будет проведено детальное исследование возможностей реализации поверхностного магнитоэлектрического эффекта в $MnBi_2Te_4$, возможности модуляции величины щели в точке Дирака и индуцированной поверхностной намагнитченности путем вариации внешнего приложенного электрического поля. Будет проанализирована модуляция величины щели в точке Дирака от энергии синхротронного и лазерного излучения при фотовозбуждении при различных температурах. Будут проанализированы возможности реализации поверхностного магнитоэлектрического эффекта в магнитно-допированных топологических изоляторах с допированием атомами магнитных переходных и редкоземельных металлов.
- будет исследовано влияние легирования атомами магнитных переходных и редкоземельных металлов различной концентрации на электронную и спиновую структуры 2D Рашба систем на основе $BiTeI$, а также изменения величины энергетической щели, открываемой в точке Крамерса, при вариации концентрации легирующих примесей.
- будут детально исследованы эффекты индуцированного спин-орбитального и обменного взаимодействий в графен-содержащих системах, сформированных на поверхности монокристаллических металлических пленок и монокристаллов SiC, и их модуляции при интеркаляции под графен атомов тяжелых (Au) и магнитных (Co, Mn) металлов. Будут проанализированы электронная и спиновая структуры в области запрещенной зоны, открываемой в точке Дирака с целью выявления механизмов, определяющих 3D спиновую структуру конуса Дирака.
- при помощи анализа спин-разрешенных данных фотоэлектронной спектроскопии будут определены величины индуцированного спинового расщепления пи-состояний графена вследствие индуцированного внешнего спин-орбитального и обменного взаимодействий в зависимости от типа металла, контактирующего с графеном, и поверхностной кристаллической структуры формируемой системы.

1.3. Сведения о фактическом выполнении годового плана работы

(фактически проделанная работа, до 10 стр.)

В рамках проекта в отчетном периоде выполнены следующие работы:

I. Методами фотоэлектронной спектроскопии с угловым и спиновым разрешениями и сверхпроводящей магнитометрии при различных температурах проведено сравнительное исследование особенностей электронной, спиновой структуры и магнитных свойств магнитно-упорядоченных топологических изоляторов со стехиометриями $MnBi_2Te_4$ и $MnSb_2Te_4$, а также $MnSb(2-x)Bi_xTe_4$ с промежуточным положением точки Дирака относительно уровня Ферми. Проведен анализ зависимости запрещенной зоны в точке Дирака от структуры, концентрации магнитных металлов, стехиометрии образцов и температуры.

а) Проведено детальное изучение особенностей электронной и спиновой структуры антиферромагнитного топологического изолятора $MnBi_2Te_4$ и анализ величины энергетической щели в точке Дирака. Недавно открытый собственный антиферромагнитный топологический изолятор $MnBi_2Te_4$ представляет собой перспективную платформу для реализации квантового аномального эффекта Холла и других топологических эффектов, которые могут быть эффективно использованы в современной спинтронике и квантовых вычислениях. Одной из важных характеристик, делающих этот материал привлекательным в качестве основы для практического использования, – это наличие аномально большой энергетической запрещенной зоны (щели) в структуре

топологических состояний, открываемой в точке Дирака магнитным взаимодействием. В рамках работ по проекту были проведены экспериментальные исследования и теоретические расчеты электронной структуры топологических состояний и величины энергетической щели, открываемой в точке Дирака.

Структура MnBi_2Te_4 вдоль направления (0001) формируется из семислойных блоков, разделенных Ван-дер-Ваальсовыми промежутками, где каждый блок состоит из последовательности атомных слоев (Te–Bi–Te–Mn–Te–Bi–Te). Внутри каждого семислойного блока атомы Mn связаны ферромагнитно. При этом взаимодействие между соседними семислойными блоками и соответствующими магнитными марганцевыми слоями имеет АФМ-характер. Теоретические расчеты предсказывают величину энергетической щели, открываемой в точке Дирака на уровне 81 мэВ. При этом в ряде работ экспериментально показано, что величина энергетической щели в точке Дирака может изменяться в широком диапазоне, в том числе вплоть до формирования «безщелевой» дисперсии топологических состояний. В рамках работы по проекту методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением была детально исследована серия образцов MnBi_2Te_4 , изготовленных различными технологиями, и детально исследованы особенности их электронной структуры и вариации величины энергетической щели, открываемой в точке Дирака. Экспериментально было выявлено, что величина энергетической щели для различных образцов может изменяться в диапазоне между 15 и 65 мэВ. Измерения проводились при температуре ниже температуры Нееля в диапазоне 10-16 К.

При этом примерно у половины исследованных образцов была измерена энергетическая щель порядка 30 мэВ, в то время как для четверти образцов величины измеряемых энергетических щелей находились в диапазоне от 50 до 60 мэВ. У некоторых образцов величина энергетической щели была в диапазоне 15-21 мэВ.

В рамках работ по проекту проведены исследования зависимости электронной структуры топологических состояний и величины энергетической щели в точке Дирака от температуры. Результаты проведенных исследований показывают, что зависимость спектров от температуры как для большой, так и малой щели имеет одинаковый характер при изменении температуры от 10 до 35 К. Энергетическая щель остается открытой и выше температуры Нееля, T_N (температуры нарушения дальнедействующего магнитного упорядочения), практически не изменяя своего размера при увеличении температуры. При этом величина расщепления Te pz состояний (с энергией связи 0,16–0,20 эВ) по мере перехода через T_N начинает резко уменьшаться, а при температуре выше T_N данные состояния «схлопываются» по энергии. «Схлопывание» энергетического расщепления Te pz состояний для всех исследованных образцов происходило при одной температуре, соответствующей T_N , что подтверждает, что магнитные свойства для образцов с различной величиной щели в точке Дирака, представляются подобными, несмотря на различные размеры энергетической щели. Щель остается открытой выше температуры Нееля.

Проведены предварительные измерения особенной атомной структуры и поверхностной морфологии образцов с различной величиной энергетической щели в точке Дирака методами сканирующей туннельной и атомно-силовой микроскопии.

Результаты исследований в данном направлении опубликованы в статье:

Shikin A. M., Estyunin D. A., Zaitsev N. L., Glazkova D., Klimovskikh I. I., Filnov S., Rybkin A. G., Schwier E. F., Kumar S., Kimura A., Mamedov N., Aliev Z., Babanly M. B., Kokh K., Tereshchenko O. E., Otrokov M. M., Chulkov E. V., Zvezdin K. A., Zvezdin A. K. Sample-dependent Dirac-point gap in MnBi_2Te_4 and its response to applied surface charge: A combined photoemission and ab initio study// Phys. Rev. B. – 2021. – Vol. 104. – P. 115168. Impact Factor = 4.036
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.104.115168>

На основе результатов, полученных в рамках проекта, подготовлена обзорная статья, которая направлена в журнал «Письма в ЖЭТФ» для публикации:

А.М. Шикин, Д.А. Естюнин, Д. Глазкова, С. Фильнов, И.И. Климовских. «Электронная, спиновая структура и магнитные свойства собственных антиферромагнитных топологических изоляторов в серии $\text{MnBi}_2\text{Te}_4(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$ », направлена в журнал «Письма в ЖЭТФ»

б) Проведено изучение особенностей электронной структуры топологических изоляторов типа $\text{MnBi}_2\text{Te}_4(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$, а также $\text{MnSb}_{(2-x)}\text{V}_x\text{Te}_4$.

Электронная структура ТПС для данного семейства ТИ существенно отличается для различных поверхностных терминаций, когда на поверхность выходит либо магнитный семислойник со структурой MnBi_2Te_4 , либо немагнитный пятислойник Bi_2Te_3 . Причем ситуация различна для случаев, когда на поверхности находится один пятислойник ($m=1$) или два пятислойника ($m=2$) (и т.д. для ТИ с $m \geq 3$). Для терминаций с одним или двумя пятислойниками на поверхности ($m=2$) наблюдается существенное различие в энергиях связи для точки Дирака, а также более сложная электронная структура ТПС и валентных состояний и зоны проводимости. Проведенные исследования показали, что в случае терминации поверхности магнитным семислойником MnBi_2Te_4 электронная структура ТПС для различных ТИ ($\text{MnBi}_2\text{Te}_4(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$) приблизительно похожи, Положение точки Дирака для всех типов образцов данной серии для

данной терминации приблизительно одинаковы. Но при этом имеют место значительные отличия в структуре состояний зоны проводимости, характерной для объемного монокристалла MnBi_2Te_4 . Данные изменения обусловлены гибридизацией состояний Дираковского конуса в верхнем семислойнике MnBi_2Te_4 с объемными состояниями из нижележащего пятислойника Bi_2Te_3 . Гибридизационные эффекты особенно ярко проявляются для случаев поверхностной терминации одним пятислойником Bi_2Te_3 путем формирования ярковыраженной запрещенной гибридизационной щели в области состояний верхнего конуса Дираковских состояний, находящихся в области края валентных состояний у нижележащего семислойника. В случае поверхностной терминации двумя пятислойниками данные гибридизационные эффекты проявляются уже в меньшей степени.

Результаты работы в рамках проекта в данном направлении вместе с анализом магнитных свойств данных систем представлены в статье:

А.М. Шикин, Д.А. Естюнин, Д. Глазкова, С. Фильнов, И.И. Климовских. «Электронная, спиновая структура и магнитные свойства собственных антиферромагнитных топологических изоляторов в серии $\text{MnBi}_2\text{Te}_4(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$ », направлена в журнал «Письма в ЖЭТФ»

В рамках работ по проекту проведены предварительные исследования изменений электронной структуры систем $\text{MnSb}(2-x)\text{VixTe}_4$ с вариацией уровня допирования атомами Sb и показан соответствующий сдвиг положения точки Дирака в сторону уровня Ферми при росте концентрации Sb. Показано, что наиболее оптимальным для применения в спинтронике является стехиометрический состав, соответствующий уровню допирования атомами Sb 20%. В этом случае точка Дирака и соответствующая энергетическая щель, открываемая в точке Дирака, находятся на уровне Ферми.

По результатам работ в данном направлении готовится статья.

II. Проведено изучение возможностей реализации поверхностного магнитоэлектрического эффекта для MnBi_2Te_4 , исследование возможности модуляции величины щели в точке Дирака и индуцированной поверхностной намагнитченности за счет вариации внешнего электрического поля для магнитно-упорядоченных (MnBi_2Te_4) и магнитно-легированных топологических изоляторов атомами магнитных переходных и редкоземельных металлов.

а) Проведены исследования возможности модуляции величины щели в точке Дирака и индуцированной поверхностной намагнитченности за счет вариации внешнего электрического поля для магнитно-упорядоченных (MnBi_2Te_4).

Для анализа возможных факторов, ответственных за вариацию энергетической щели в точке Дирака в рамках работ по проекту были проведены расчеты электронной структуры топологических состояний и величины энергетической щели, открываемой в точке Дирака, а также их изменений при приложении перпендикулярно поверхности электрического поля варьируемой напряженности и противоположного направления. Аналогичные расчеты были также проведены для избыточного заряда различной величины и знака, локализованного на поверхности, который может возникать вследствие аккумуляции различных дефектов донорного или акцепторного типа в приповерхностной области. Произведен расчет изменений электронной и спиновой структуры топологических состояний для out-of-plane и in-plane спиновой ориентации и соответствующие изменения величины энергетической щели, открываемой в точке Дирака, в зависимости величины и знака заряда, локализованного на поверхности образца или соответствующей величины и знака градиента поверхностного потенциала.

В результате исследований было показано, что величина энергетической щели, открываемой в точке Дирака, может сильно варьироваться исходя из величины и знака заряда на поверхности, от максимально возможной величины (вплоть до 80-90 мэВ) и вплоть до минимальной величины, близкой к нулевому значению. Это позволило сделать вывод, что одним из факторов, ответственных за вариацию величины щели, может являться аккумуляция дефектов вблизи поверхности. Расчеты показывают, что нескомпенсированный поверхностный заряд, может возникать из-за наличия структурных дефектов на поверхности MnBi_2Te_4 , что может способствовать существенному уменьшению величины щели в точке Дирака, наблюдаемой в некоторых образцах. При этом тип дефектов и их концентрация и определяет вариацию величины энергетической щели для различных образцов.

Дополнительно была продемонстрирована возможность модуляции величины энергетической щели в точке Дирака приложенным перпендикулярно поверхности электрическим полем различного направления и варьируемой напряженности. С практической точки зрения это может быть использовано для настройки величины щели, открываемой в точке Дирака, и может позволить переключать состояние квантового аномального эффекта Холла (включение/выключение) или аксионного изолятора в тонких слоях MnBi_2Te_4 при приложении электрического поля.

Результаты исследований в данном направлении опубликованы в статье:

Shikin A. M., Estyunin D. A., Zaitsev N. L., Glazkova D., Klimovskikh I. I., Filnov S., Rybkin A. G., Schwier E. F., Kumar S., Kimura A., Mamedov N., Aliev Z., Babanly M. B., Kokh K., Tereshchenko O. E., Otrokov M. M., Chulkov E. V., Zvezdin K. A., Zvezdin A. K. Sample-dependent Dirac-point gap in MnBi_2Te_4 and its response to applied surface charge: A combined photoemission and

ab initio study// Phys. Rev. B. – 2021. – Vol. 104. – P. 115168. Impact Factor = 4.036

<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.104.115168>

На основе результатов, полученных в рамках проекта, подготовлена статья-обзор, которая послана в журнал «Письма в ЖЭТФ» для публикации:

А.М. Шикин, Д.А. Естюнин, Д. Глазкова, С. Фильнов, И.И. Климовских. «Электронная, спиновая структура и магнитные свойства собственных антиферромагнитных топологических изоляторов в серии $MnBi_2Te_4(Bi_2Te_3)_m$ », направлена в журнал «Письма в ЖЭТФ»

б) Проведено исследование возможности модуляции электронной структуры топологических состояний и величины щели в точке Дирака для магнитно-легированных топологических изоляторов атомами магнитных переходных металлов.

В рамках работы по проекту методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ФЭСУР) и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) проведены исследования изменений электронной структуры топологических поверхностных состояний и внутренних уровней систем при напылении атомов Co на поверхность Bi_2Te_3 и $MnBi_2Te_4$ при различных температурах. В результате проведенных работ было показано, что атомы Co связываются с поверхностными атомами подложки, при этом меняется положение точки Дирака. Наблюдаемые изменения обусловлены возможным формированием магнитных Co-содержащих упорядоченных поверхностных сплавов. Было показано, что изменения структуры ТПС при напылении Co на поверхность Bi_2Te_3 с одновременным прогревом до температур 420°С и 540°С в первую очередь проявляются в энергетическом сдвиге точки Дирака в сторону увеличения энергии связи. Причем этот сдвиг зависит как от температуры, так и количества напыляемого металла. Это свидетельствует о том, что при напылении Co с одновременным прогревом происходит перенос заряда и трансформация поверхности, приводящая к возможности создания Co-содержащего поверхностного сплава. При дальнейшем напылении Co с ростом температуры прогрева до 540°С происходит десорбция Co с поверхности, в результате чего точка Дирака сдвигается обратно в сторону меньших энергий связи. Для целей сравнения проведены аналогичные ФЭСУР измерения при напылении Co на поверхность $MnBi_2Te_4$. Выявлено, что после напыления Co имеет место небольшой сдвиг точки Дирака. При этом исследования спектров внутренних уровней свидетельствуют о возможности формирования упорядоченного соединения с содержанием Co на поверхности $MnBi_2Te_4$. Возможны следующие объяснения наблюдаемых эффектов. Во-первых, в верхнем слое $MnBi_2Te_4$ присутствуют вакансии Te, следовательно, Co может встраиваться в них. Во-вторых, возможно замещение атомов Bi атомами Co. Анализ уровней Co 2p показал, что значения энергии близки к значениям энергии в соединении CoTe, что может указывать на формирование поверхностного сплава.

Результаты работы в рамках проекта в данном направлении представлены в статье

Т. П. Макарова, Д. А. Естюнин, С. О. Фильнов, Д. А. Глазкова, Д. А. Пудиков, А. Г. Рыбкин, А. А. Гогина, З. С. Алиев, И. Р. Амирасланов, Н. Т. Мамедов, К. А. Кох, О. Е. Терещенко, А. М. Шикин, Е. В. Чулков, И. И. Климовских "Влияние атомов Co на электронную структуру топологических изоляторов Bi_2Te_3 и $MnBi_2Te_4$ ", принято к публикации в ЖЭТФ.

В рамках проекта были сделаны попытки поверхностного легирования TI Bi_2Se_3 и Bi_2Te_3 атомами Co и Mn. $BiSbTeSe_2$ был выбран ввиду того, что в отличие от подобных трехмерных TI, таких как Bi_2Se_3 и Bi_2Te_3 , он обладает наименьшей объемной дефектностью и, как следствие, объемной проводимостью. Было показано, что при покрытии поверхности в диапазоне от 0.6 до 3 атомов Co на ячейку $BiSbTeSe_2$ при температуре образца 300-330°С во время напыления, происходит образование ферромагнитной поверхности верхнего пятислойного блока (т.е. $Te\backslash Se-Bi\backslash Sb-Te\backslash Se-Bi\backslash Sb-Te\backslash Se$) с замещением атомов $Bi\backslash Sb$ преимущественно во втором слое на атомы Co. В результате в структуре поверхностных топологических состояний наблюдается появление запрещенной зоны в точке Дирака величиной до 21 мэВ. Дальнейшее увеличение покрытия Co приводит к образованию островков парамагнитной орторомбической фазы $CoTe_xSe_{2-x}$. Аналогичные результаты были получены при осаждении Mn на поверхность $BiSbTeSe_2$. В данном случае также наблюдалось появление запрещенной зоны в точке Дирака на уровне 37 мэВ. Способ поверхностного легирования TI может оказаться наиболее перспективным для создания магнитных TI, так как не нарушается объемная структура материала и при этом магнитный слой может эффективно взаимодействовать с топологическими поверхностными состояниями, приводя к открытию запрещенной зоны в точке Дирака.

На основе полученных данных в рамках проекта опубликована статья:

A. K. Kaveev, S. M. Suturen, V. A. Golyashov, K. A. Kokh, S. V. Ereemeev, D. A. Estyunin, A. M. Shikin, A. V. Okotrub, A. N. Lavrov, E. F. Schwier, and O. E. Tereshchenko " Band gap opening in the $BiSbTeSe_2$ topological surface state induced by ferromagnetic surface reordering" Phys. Rev. Materials (2021) accepted

III. Проведено исследование эффектов индуцированного спин-орбитального и обменного взаимодействий в графен-

содержащих системах, сформированных на поверхности монокристаллических металлических пленок и монокристаллов SiC, и их модуляции при интеркаляции под графен атомов тяжелых (Au) и магнитных (Co, Mn) металлов. Проанализированы особенности электронной и спиновой структуры в области запрещенной зоны, открываемой в точке Дирака, а также величины индуцированного спинового расщепления π -состояний графена в зависимости от типа металла, контактирующего с графеном, и поверхностной кристаллической структуры формируемой системы.

а) Проведены исследования электронной структуры и анализ поверхностной кристаллической структуры системы с квазисвободным графеном, сформированным на поверхности монокристалла SiC, и получена информация о структуре после интеркаляции Co.

В рамках работ по проекту проведены структурные исследования интерфейса квазисвободного графена на карбиде кремния, полученного путем интеркаляции 20\AA кобальта под буферный слой графена при температуре 450°C . Топография поверхности интеркалированного образца была измерена методом атомно-силовой микроскопии (АСМ). Было показано, что синтез буферного слоя графена и интеркаляция Co приводят к формированию слоистой структуры поверхности с кластерами треугольной формы размером около 5–10 нм. Данная структура поверхности связана с образованием тонких слоев CoSi/CoSi₂. Подобная структура силицидов кобальта наблюдалась при напылении тонких слоев кобальта на Si(111) с последующими термическими отжигами. При отжиге при более высоких температурах происходит трансформация CoSi слоя в CoSi₂ на границе с подложкой кремния. Для подтверждения слоистой структуры CoSi/CoSi₂ и получения более детальной информации о структуре слоев были выполнены исследования поперечных срезов методом просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения. Проведенные исследования показали, что промежуточный слой между подложкой SiC и пассивирующим слоем PtC имеет преобладающие толщины от ~4 до ~10 нм, что согласуется с изменением высот на профиле АСМ-изображения. Полученные данные свидетельствуют о наличии в этом слое атомов Co и уменьшении концентрации атомов Si от подложки SiC до пассивирующего слоя. Было показано, что наименьшее расстояние между атомными слоями, наблюдаемыми на изображениях HRTEM, составляет ~1.7 Å, что совпадает с СТМ измеренной высотой каждого CoSi слоя, в то время как более глубоко залегающая структура имеет большее расстояние между слоями ~2,1 Å. Поиск осей зон поворотом образца вокруг нормали к поверхности позволил найти вторую ось зон поворотом на 15° от первой. Для второй оси, элементарная ячейка SiC хорошо разрешается, а структура кластера на границе с SiC воспроизводится структурой CoSi₂. При этом было выявлено, что кластеры на границе с SiC имеют структуру CoSi₂ и покрыты остаточным слоем CoSi. В рамках проекта методом ФЭСУР с использованием синхротронного излучения была исследована модификация электронной структуры графена после интеркаляции кобальта при охлаждении образца до 25 К. Было показано, что в электронной структуре в области точки К зоны Бриллюэна наблюдается конус Дирака π электронных состояний, характерный для квазисвободного графена. При этом методом ДМЭ получено изображение гексагональной картины дифракции с четкими рефлексами графена. В сочетании с данными просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения и атомно-силовой микроскопии было продемонстрировано, что в результате интеркаляции кобальта между квазисвободным графеном и подложкой SiC образуется ультратонкая силицидная структура CoSi/CoSi₂. Таким образом, несмотря на структурную разориентацию слоев, графен имеет квазисвободный характер с линейной дисперсией π состояний. Наличие наноразмерного слоя CoSi под квазисвободным графеном открывает возможности по использованию графена на изолирующих подложках в устройствах спинтроники.

Результаты работы по проекту в данном направлении опубликованы в статье:

Rybkina A. A., Filnov S. O., Tarasov A. V., Danilov D. V., Likholetova M. V., Voroshnin V. Yu., Pudikov D. A., Glazkova D. A., Eryzhenkov A. V., Eliseyev I. A., Davydov V. Yu., Shikin A. M., Rybkin A. G. Quasi-freestanding graphene on SiC(0001) via cobalt intercalation of zero-layer graphene// Phys. Rev. B. – 2021. – Vol. 104. – P. 155423.

<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.104.155423>

б) Проведены детальные экспериментальные и теоретические исследования электронной структуры ферромагнитного графена.

В рамках проекта был синтезирован n -допированный графен на подложке Au/Co/W(110) с точкой Дирака ниже уровня Ферми и исследованы особенности его электронной структуры. Было выявлено, что для полуинтеркалированного графена характерна суперпозиция карт интенсивности от доменов Gr/Co и Gr/Au/Co (мини-конус Дирака и конус Дирака, характерный для квазисвободного графена). Сравнивая значения импульсов для точек Дирака для этих двух областей была сделана оценка растяжения решетки графена на поверхности Co(0001) на 2% относительно квазисвободного графена, что соответствует рассогласованию решеток между графеном и плотноупакованной поверхностью Co. Было показано, что увеличение количества золота под графеном приводит к изменению n -допирования графена со сдвигом энергии точки Дирака ближе к уровню Ферми. При этом картина дифракции содержит помимо рефлексов от графена рефлексы от суперструктуры (9x9) между графеном и подложкой, что подтверждает тот

факт, что монослой золота сплавляется с верхним слоем кобальта с образованием упорядоченных петлевых дислокаций. В рамках проекта проведен расчет зон со спиновой поляризацией в окрестностях противоположных K и K' точек зоны Бриллюэна, объясняющий наличие запрещенной зоны и асимметричного спинового расщепления в экспериментальных данных. Суммарный магнитный момент на графене обуславливает обменное расщепление π состояний, а противоположная намагниченность (ферримагнетизм) на A и B подрешетках графена – появление запрещенной зоны в точке Дирака. В свою очередь наличие спин-орбитального и обменного расщепления приводит к асимметричному спиновому расщеплению в окрестностях K и K' точек.

По результатам работы в данном направлении готовится статья для публикации в журнале *Physical Review Letters*.

в) Проведен анализ модификации конуса Дирака графена на $Re(0001)$ при интеркаляции атомов Bi и O . В рамках работ по проекту проведены экспериментальные исследования электронной структуры системы графен/ $Bi/Re(0001)$. В ходе работы был проведен синтез и систематические исследования системы на основе графена в контакте с интеркалированными атомами висмута и кислорода. Были изучены и применены подходы и методы модификации электронной структуры графена, приводящие к его функционализации для эффективного применения в электронике и спинтронике. Методом ФЭСУР спектроскопии были получены дисперсионные зависимости электронных π -состояний графена в K -точке зоны Бриллюэна, демонстрирующие сохранение квазисвободного характера графена при интеркаляции Bi , а также появление второго конуса Дирака после интеркаляции системы атомами кислорода. Эксперимент включал в себя синтез систем с последующим исследованием электронной структуры графена методами фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ФЭСУР), рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС). Синтез системы проводился в несколько этапов: 1) Образец $Re(0001)$ был изготовлен циклами последовательного прогрева в атмосфере кислорода при давлении $5,5 \times 10^{-8}$ мбар и температуре около 1000° в течение 10 минут и отжига до температур близких 1300° С в течение 1 минуты; 2) Во время финального цикла был осуществлен высокотемпературный прогрев в атмосфере кислорода с последующим отжигом при меньшей температуре приблизительно 1100° С; 3) Графен был изготовлен методом крекинга пропилена на поверхности $Re(0001)$ при давлении $5,1 \times 10^{-7}$ мбар пропилен в камере и при температуре подложки около 820° на протяжении 15 минут; 4) Последующее напыление атомов Bi производилось путём испарения небольшого куска висмута при прогреве посредством бомбардировки электронами. С помощью кварцевых микровесов проводился контроль скорости напыления. Интеркаляция атомов Bi также проводилась в несколько этапов, на каждом из которых измерялись ДМЭ, РФЭС и ФЭСУР. Каждый этап соответствовал прогреву системы при определенной температуре в течение 5–15 мин, шаг по температуре между каждой парой соседних этапов составлял около 150° С.

В результате исследований, было выявлено, что интеркаляция атомов Bi восстанавливает квазисвободные свойства графена. Интеркаляция висмута приводит к тому, что графен переходит из сильно связанного состояния в квазисвободное состояние с линейным характером дисперсии, а также к сдвигу этих π -состояний графена в сторону больших энергий связи примерно на 0,4 эВ из-за переноса заряда от атомов висмута к графену. Также была оценена возможность наличия запрещенной зоны шириной не менее 0,4 эВ. Было обнаружено, что положение точки Дирака отличается в зависимости от конфигурации интеркалированных атомов. После выноса системы на воздух, на ФЭСУР спектре появляются два конуса Дирака. Первый из них возникает ввиду переноса заряда от атомов Bi , что приводит к смещению точки Дирака ниже уровня Ферми, т. е. к n -допированию графена. Для второго конуса точка Дирака расположена выше уровня Ферми, что приводит к p -допированию, связанному с интеркаляцией атомов кислорода. Таким образом, посредством интеркалирования атомов Bi и/или O под графен на $Re(0001)$ можно управлять носителями заряда графена (p -типа и n -типа), а также созданием запрещенной зоны точки Дирака.

Результаты работы по проекту в данном направлении опубликованы в статье:

Gogina A. A., Klimovskikh I. I., Estyunin D. A., Filnov S. O., Shikin A. M. Dirac Cone Manipulation via Bismuth and Oxygen Intercalation Underneath Graphene on $Re(0001)$ // AIP Conference Proceedings. – 2021. – Vol. 2359. – P. 020008.

IV. Проведены исследования влияния легирования атомами магнитных переходных металлов различной концентрации на электронную и спиновую структуры 2D Рашба систем на основе $BiTeI$, а также изменения величины энергетической щели, открываемой в точке Крамерса, при вариации концентрации легирующих примесей.

В рамках работ по проекту проведены исследования влияния легирования атомами магнитных переходных металлов различной концентрации на электронную структуру и магнитные свойства системы Рашбы на основе $BiTeI$. В работе изучена электронная структура образцов $BiTeI$, легированных атомами Fe , Mn и Gd , показано открытие запрещенной зоны в точке Крамерса при введении примесей, по сравнению с электронной структурой нелегированного $BiTeI$. Проведены исследования магнитных свойств магнитно-допированных образцов $BiTeI$. Обнаружено, что результаты исследований методом сверхпроводящей магнитометрии дают информацию о значениях объемных критических температур магнитных переходов, в то время как модификация электронной структуры поверхностных состояний

Рашбы зависит от изменения поверхностной критической температуры перехода.

В рамках работ по проекту проведены детальные исследования динамики носителей на Те-терминированной поверхности BiTeI. Узкозонные полупроводники с сильной спин-орбитальной связью, такие как теллуругалогениды висмута, стали популярными кандидатами на применение в спинтронике. Но для возбуждения спин-поляризованных фототоков в этих материалах циркулярно поляризованным светом требуется пикосекундное время жизни фотовозбужденных носителей и низкие скорости рассеяния с переворотом спина. В поисках этих важных ингредиентов в рамках проекта было проведено исследование динамики носителей на Те-терминированной поверхности BiTeI, которая демонстрирует гигантское расщепление Рашбы как поверхностных, так и объемных состояний. Было выявлено сложное взаимодействие динамики поверхности и объема после фотовозбуждения. При этом носители быстро перестраиваются в импульсном пространстве за счет квазиупругого рассеяния фононов и дефектов, в то время как эффекты фононных взаимодействий типа «бутылочного горлышка» приводят к медленному уравниванию между объемными электронами и решеткой. Кроме того, баллистический перенос объемных носителей на поверхность в остаточном электростатическом поле положительно заряженной поверхности приводит к накоплению носителей заряда вокруг уровня Ферми, где они могут распадаться за счет поверхностной рекомбинации и электрон-фононного рассеяния. Дырочная динамика при больших энергиях связи показывает значительное влияние особенностей электронной структуры поверхностного состояния, обусловленных эффектами спинового расщепления Рашбы. Особенности зонной дисперсии в данном материале открывают канал неупругого распада для горячих носителей в виде плазменных возбуждений, присущих системам с расщеплением Рашбы. Подобные сверхбыстрые процессы рассеяния эффективно перераспределяют возбужденные носители в импульсном и энергетическом пространстве и тем самым препятствуют возбуждению спин-поляризованных фототоков. При температуре образца 60 К динамика возбужденных состояний определяется взаимодействием электронной системы с поверхностным плазмоном, что приводит к уменьшению времени затухания к дну зоны и увеличению к уровню Ферми. При комнатной температуре распад уже почти не зависит от энергии связи и, следовательно, в нем преобладают эффективное квазиупругое рассеяние и поверхностная рекомбинация. Полученные результаты показывают, что квазиупругое и неупругое рассеяние очень эффективно перераспределяют носители по расщепленным электронным состояниям. Это общее наблюдение, которое справедливо для проводящих систем с поверхностным и объемным состояниями, расщепленными по модели Рашбы. Рассеяние импульса и эмиссия плазмонов приводят к быстрому перераспределению носителей, уменьшая возможную оптически индуцированную спиновую поляризацию. Формируемые сверхбыстрые процессы рассеяния эффективно перераспределяют возбужденные носители в импульсном и энергетическом пространстве и тем самым подавляют спин-поляризованные фототоки. Таким образом, рассеяние носителей на оптических фононах и дефектах должно быть уменьшено, чтобы гарантировать потенциал материалов Рашбы в опто-спинтронных приложениях.

Результаты работы по проекту в данном направлении опубликованы в статье:

Ketterl A. S., Andres B., Polverigiani M., Voroshnin V., Gahl C., Koh K. A., Tereshchenko O. E., Chulkov E. V., Shikin A., Weinelt M. Effect of Rashba splitting on ultrafast carrier dynamics in BiTeI// Phys. Rev. B. – 2021. – Vol. 103. – P. 085406.

<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.103.085406>

Все планируемые на год работы выполнены полностью:

да

1.4. Сведения о достигнутых конкретных научных результатах в отчетном году

(до 5 стр.)

В отчетном периоде по проекту достигнуты следующие конкретные научные результаты:

1) Проведено детальное изучение особенностей электронной и спиновой структуры антиферромагнитного топологического изолятора MnBi₂Te₄ и анализ величины энергетической щели в точке Дирака. В рамках работы по проекту методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением была детально исследована серия образцов MnBi₂Te₄, изготовленных различными технологиями, и детально исследованы особенности их электронной структуры и вариации величины энергетической щели, открываемой в точке Дирака. Экспериментально было выявлено, что величина энергетической щели для различных образцов может изменяться в диапазоне между 15 и 65 мэВ. Измерения проводились при температуре ниже температуры Нееля в диапазоне 10-16 К. При этом примерно у половины исследованных образцов была измерена энергетическая щель порядка 30 мэВ, в то время как для четверти образцов величины измеряемых энергетических щелей находились в диапазоне от 50 до 60 мэВ. У некоторых образцов величина энергетической щели была в диапазоне 15-21 мэВ. В рамках работ по проекту проведены детальные исследования

зависимости электронной структуры топологических состояний и величины энергетической щели в точке Дирака от температуры. Результаты проведенных исследований показывают, что зависимость спектров от температуры как для большой, так и малой щели имеет одинаковый характер при изменении температуры от 10 до 35 К. Энергетическая щель остается открытой и выше температуры Нееля (TN), практически не изменяя своего размера при увеличении температуры. При этом величина расщепления Te pz состояний (с энергией связи 0,16–0,20 эВ) по мере перехода через TN начинает резко уменьшаться, а при температуре выше TN данные состояния уже не расщеплены по энергии всех исследованных образцов. Подобное поведение расщепления Te pz состояний подтверждает, что магнитные свойства для образцов с различной величиной щели в точке Дирака, представляются подобными, несмотря на различные размеры энергетической щели. Щель остается открытой выше температуры Нееля.

2) Проведены детальные исследования возможности модуляции величины щели в точке Дирака и индуцированной поверхностной намагниченности за счет вариации внешнего электрического поля для магнито-упорядоченных (MnBi₂Te₄). Для анализа возможных факторов, ответственных за вариацию энергетической щели в точке Дирака в рамках работ по проекту были проведены расчеты электронной структуры топологических состояний и величины энергетической щели, открываемой в точке Дирака, а также их изменений при приложении перпендикулярно поверхности электрического поля варьируемой напряженности. Аналогичные расчеты были также проведены для заряда различной величины и знака, локализованного на поверхности, который может возникать вследствие аккумуляции различных дефектов донорного или акцепторного типа в приповерхностной области. Произведен расчет изменений электронной и спиновой структуры топологических состояний для out-of-plane и in-plane спиновой ориентации и соответствующие изменения величины энергетической щели, открываемой в точке Дирака, в зависимости величины и знака заряда, локализованного на поверхности образца или соответствующей величины и знака градиента поверхностного потенциала. В результате исследований было показано, что величина энергетической щели, открываемой в точке Дирака, может сильно варьироваться исходя из величины и знака заряда на поверхности, от максимально возможной величины (вплоть до 80-90 мэВ) и вплоть до минимальной величины, близкой к нулевому значению. Это позволило сделать вывод, что одним из факторов, ответственных за вариацию величины щели, может являться аккумуляция зарядовых дефектов вблизи поверхности. Расчеты показывают, что нескомпенсированный поверхностный заряд, может возникать из-за наличия структурных дефектов на поверхности MnBi₂Te₄, что может способствовать существенному уменьшению величины щели в точке Дирака, наблюдаемой в некоторых образцах. При этом тип дефектов и их концентрация и определяет вариацию величины энергетической щели для различных образцов. Дополнительно была продемонстрирована возможность модуляции величины энергетической щели в точке Дирака приложенным перпендикулярно поверхности электрическим полем различного направления и варьируемой напряженности. С практической точки зрения это может быть использовано для настройки величины щели, открываемой в точке Дирака, и может позволить переключать состояние квантового аномального эффекта Холла (включение/выключение) или аксионного изолятора в тонких слоях MnBi₂Te₄ при приложении электрического поля.

3) Проведено изучение особенностей электронной структуры топологических изоляторов типа MnBi₂Te₄(Bi₂Te₃)_m, а также MnSb(2-x)Bi_xTe₄. Электронная структура топологических поверхностных состояний (ТПС) для данного семейства топологических изоляторов (ТИ) существенно отличается для различных поверхностных терминаций, когда на поверхность выходит либо магнитный семислойник со структурой MnBi₂Te₄, либо немагнитный пятислойник Bi₂Te₃. Причем ситуация различна для случаев, когда на поверхности находится один пятислойник (m=1) или два пятислойника (m=2) (и т.д. для ТИ с m ≥ 3). Проведенные исследования показали, что в случае терминации поверхности магнитным семислойником MnBi₂Te₄ электронная структура ТПС для различных ТИ (MnBi₂Te₄)(Bi₂Te₃)_m приблизительно похожи. Положение точки Дирака для всех типов образцов данной серии для данной терминации приблизительно одинаковы. Но при этом имеют место значительные отличия в структуре состояний зоны проводимости, характерной для объемного монокристалла MnBi₂Te₄, обусловленные гибридизацией состояний Дираковского конуса в верхнем семислойнике MnBi₂Te₄ с объемными состояниями из нижележащего пятислойника Bi₂Te₃. Гибридизационные эффекты особенно ярко проявляются для случаев поверхностной терминации одним пятислойником Bi₂Te₃ путем формирования ярковыраженной запрещенной гибридационной щели в области состояний верхнего конуса Дираковских состояний, находящихся в области края валентных состояний у нижележащего семислойника. В случае поверхностной терминации двумя пятислойниками данные гибридационные эффекты проявляются уже в меньшей степени.

В рамках работ по проекту проведены предварительные исследования изменений электронной структуры систем MnSb(2-x)Bi_xTe₄ с вариацией уровня допирования атомами Sb и показан соответствующий сдвиг положения точки Дирака в сторону уровня Ферми при росте концентрации Sb. Показано, что наиболее оптимальным для применения в спинтронике является стехиометрический состав, соответствующий уровню допирования атомами Sb 30%. В этом

случае точка Дирака и соответствующая энергетическая щель, открываемая в точке Дирака, находятся на уровне Ферми.

4) Проведено исследование возможности модуляции электронной структуры топологических состояний и величины щели в точке Дирака для магнитно-легированных топологических изоляторов атомами магнитных переходных металлов. В рамках работы по проекту методами фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ФЭСУР) и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) проведены исследования изменений электронной структуры топологических поверхностных состояний и внутренних уровней систем при напылении атомов Co на поверхность Bi_2Te_3 и MnBi_2Te_4 при различных температурах. В результате проведенных работ было показано, что атомы Co связываются с поверхностными атомами подложки, при этом меняется положение точки Дирака. Проведенные исследования свидетельствуют о том, что при напылении Co с одновременным прогревом происходит перенос заряда и трансформация поверхности, приводящая к возможности создания Co-содержащего поверхностного сплава. Возможны следующие объяснения наблюдаемых эффектов. Во-первых, в верхнем слое MnBi_2Te_4 присутствуют вакансии Te, следовательно, Co может встраиваться в них. Во-вторых, возможно замещение атомов Bi атомами Co. Анализ уровней Co 2p показал, что значения энергии близки к значениям энергии в соединении CoTe, что может указывать на формирование поверхностного сплава.

В рамках проекта были сделаны попытки поверхностного легирования ТИ BiSbTeSe_2 атомами Co и Mn. Было показано, что при покрытии поверхности в диапазоне от 0.6 до 3 атомов Co на ячейку BiSbTeSe_2 при температуре образца 300-330 С во время напыления, происходит образование ферромагнитной поверхности верхнего пятислойного блока (т.е. $\text{Te}\backslash\text{Se}-\text{Bi}\backslash\text{Sb}-\text{Te}\backslash\text{Se}-\text{Bi}\backslash\text{Sb}-\text{Te}\backslash\text{Se}$) с замещением атомов $\text{Bi}\backslash\text{Sb}$ преимущественно во втором слое на атомы Co. В результате в структуре поверхностных топологических состояний наблюдается появление запрещенной зоны в точке Дирака величиной до 21 мэВ. Дальнейшее увеличение покрытия Co приводит к образованию островков парамагнитной орторомбической фазы $\text{CoTe}_x\text{Se}_{2-x}$. Аналогичные результаты были получены при осаждении Mn на поверхность BiSbTeSe_2 . В данном случае также наблюдалось появление запрещенной зоны в точке Дирака на уровне 37 мэВ. Способ поверхностного легирования ТИ может оказаться наиболее перспективным для создания магнитных ТИ, так как не нарушается объемная структура материала и при этом магнитный слой может эффективно взаимодействовать с топологическими поверхностными состояниями, приводя к открытию запрещенной зоны в точке Дирака.

5) Проведены исследования электронной структуры и анализ поверхностной кристаллической структуры системы с квазисвободным графеном, сформированным на поверхности монокристалла SiC, и получена информация о структуре после интеркаляции Co.

Проведены структурные исследования интерфейса квазисвободного графена на карбиде кремния (SiC), полученного путем интеркаляции 20\AA кобальта под буферный слой графена при температуре 450°C . Топография поверхности интеркалированного образца была измерена методом атомно-силовой микроскопии (АСМ). Было показано, что синтез буферного слоя графена и интеркаляция Co приводят к формированию слоистой структуры поверхности с кластерами треугольной формы размером около 5–10 нм. Данная структура поверхности связана с образованием тонких слоев $\text{CoSi}/\text{CoSi}_2$. Подобная структура силицидов кобальта наблюдалась при напылении тонких слоев кобальта на $\text{Si}(111)$ с последующими термическими отжигами. При отжиге при более высоких температурах происходит трансформация CoSi слоя в CoSi_2 на границе с подложкой кремния. Для подтверждения слоистой структуры $\text{CoSi}/\text{CoSi}_2$ и получения более детальной информации о структуре слоев были выполнены исследования поперечных срезов методом просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения. Проведенные исследования свидетельствуют о наличии в этом слое атомов Co и уменьшении концентрации атомов Si от подложки SiC до пассивирующего слоя. Было показано, что наименьшее расстояние между атомными слоями, наблюдаемыми на изображениях, полученных методом просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения (HRTEM), составляет $\sim 1.7\text{ \AA}$, что совпадает с измеренной высотой методом сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) каждого CoSi слоя, в то время как более глубоко залегающая структура имеет большее расстояние между слоями $\sim 2,1\text{ \AA}$. Выявлено, что кластеры на границе с SiC имеют структуру CoSi_2 и покрыты остаточным слоем CoSi. В рамках проекта методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ФЭСУР) с использованием синхротронного излучения была исследована модификация электронной структуры графена после интеркаляции кобальта. Было показано, что в электронной структуре в области точки К зоны Бриллюэна наблюдается конус Дирака π электронных состояний, характерный для квазисвободного графена. При этом методом дифракции медленных электронов (ДМЭ) получено изображение гексагональной картины дифракции с четкими рефлексами графена. В сочетании с данными просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения и атомно-силовой микроскопии было продемонстрировано, что в результате интеркаляции кобальта между квазисвободным графеном и подложкой SiC образуется ультратонкая силицидная структура $\text{CoSi}/\text{CoSi}_2$. Таким образом, несмотря на структурную разориентацию слоев, графен имеет

квазисвободный характер с линейной дисперсией π состояний. Наличие наноразмерного слоя CoSi под квазисвободным графеном открывает возможности по использованию графена на изолирующих подложках в устройствах спинтроники.

6) Проведены детальные экспериментальные и теоретические исследования электронной структуры ферромагнитного графена.

В рамках проекта был синтезирован n -допированный графен на подложке Au/Co/W(110) с точкой Дирака ниже уровня Ферми и исследованы особенности его электронной структуры. Было выявлено, что для полуинтеркалированного графена характерна суперпозиция карт интенсивности от доменов Gr/Co и Gr/Au/Co (мини-конус Дирака и конус Дирака, характерный для квазисвободного графена). Сравнивая значения импульсов для точек Дирака для этих двух областей была сделана оценка растяжения решетки графена на поверхности Co(0001) на 2% относительно квазисвободного графена, что соответствует рассогласованию решеток между графеном и плотноупакованной поверхностью Co. Было показано, что увеличение количества золота под графеном приводит к изменению n -допирования графена со сдвигом энергии точки Дирака ближе к уровню Ферми. При этом картина дифракции содержит помимо рефлексов от графена рефлексы от суперструктуры (9x9) между графеном и подложкой, что подтверждает тот факт, что монослой золота сплавляется с верхним слоем кобальта с образованием упорядоченных петель дислокаций. В рамках проекта проведен расчет методом теории функционала плотности зон со спиновой поляризацией в окрестностях противоположных K и K' точек зоны Бриллюэна, объясняющий наличие запрещенной зоны и асимметричного спинового расщепления в экспериментальных данных. Суммарный магнитный момент на графене обуславливает обменное расщепление π состояний, а противоположная намагниченность (ферромагнетизм) на A и B подрешетках графена – появление запрещенной зоны в точке Дирака. В свою очередь наличие спин-орбитального и обменного расщепления приводит к асимметричному спиновому расщеплению в окрестностях K и K' точек.

7) Проведен анализ модификации конуса Дирака графена на Re(0001) при интеркаляции атомов Bi и O. В ходе работы был проведен синтез и систематические исследования системы на основе графена на подложке Re(0001) в контакте с интеркалированными атомами висмута и кислорода. Были изучены и применены подходы и методы модификации электронной структуры графена, приводящие к его функционализации для эффективного применения в электронике и спинтронике. Методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ФЭСУР) были получены дисперсионные зависимости электронных π -состояний графена в K -точке зоны Бриллюэна, демонстрирующие сохранение квазисвободного характера графена при интеркаляции Bi, а также появление второго конуса Дирака после интеркаляции системы атомами кислорода. В результате исследований, было выявлено, что интеркаляция висмута приводит к тому, что графен переходит из сильно связанного состояния в квазисвободное состояние с линейным характером дисперсии, а также к сдвигу π -состояний графена в сторону больших энергий связи примерно на 0,4 эВ из-за переноса заряда от атомов висмута к графену. Также была оценена возможность наличия запрещенной зоны шириной не менее 0,4 эВ. Было обнаружено, что положение точки Дирака отличается в зависимости от конфигурации интеркалированных атомов. После выноса системы на воздух, на ФЭСУР спектре появляются два конуса Дирака. Первый из них возникает ввиду переноса заряда от атомов Bi, что приводит к смещению точки Дирака ниже уровня Ферми, т. е. к n -допированию графена. Для второго конуса точка Дирака расположена выше уровня Ферми, что приводит к p -допированию, связанному с интеркаляцией атомов кислорода. Таким образом, посредством интеркалирования атомов Bi и/или O под графен на Re(0001) можно управлять носителями заряда графена (p -типа и n -типа), а также созданием запрещенной зоны точки Дирака.

8) Проведены исследования влияния легирования атомами магнитных переходных металлов различной концентрации на электронную и спиновую структуры 2D Рашба систем на основе BiTeI, а также изменения величины энергетической щели, открываемой в точке Крамерса, при вариации концентрации легирующих примесей. В рамках работ по проекту проведены детальные исследования динамики носителей на Te-терминированной поверхности BiTeI. Узкозонные полупроводники с сильной спин-орбитальной связью, такие как теллур-галогениды висмута (BiTeX, X=Cl, Br, I), стали популярными кандидатами на применение в спинтронике. Но для возбуждения спин-поляризованных фототоков в этих материалах циркулярно поляризованным светом требуется пикосекундное время жизни фотовозбужденных носителей и низкие скорости рассеяния с переворотом спина. В поисках этих важных ингредиентов в рамках проекта было проведено исследование динамики носителей на Te-терминированной поверхности BiTeI, которая демонстрирует гигантское расщепление Рашбы как поверхностных, так и объемных состояний. Было выявлено сложное взаимодействие динамики поверхности и объема после фотовозбуждения. При этом носители быстро перестраиваются в импульсном пространстве за счет квазиупругого рассеяния фононов и дефектов, в то время как эффекты фононных

взаимодействий типа «бутылочного горлышка» приводят к медленному уравниванию между объемными электронами и решеткой. Кроме того, баллистический перенос объемных носителей на поверхность в остаточном электростатическом поле положительно заряженной поверхности приводит к накоплению носителей заряда вокруг уровня Ферми, где они могут распадаться за счет поверхностной рекомбинации и электрон-фононного рассеяния. Дырочная динамика при больших энергиях связи показывает значительное влияние особенностей электронной структуры поверхностного состояния, обусловленных эффектами спинового расщепления Рашбы. Особенности зонной дисперсии в данном материале открывают канал неупругого распада для «горячих» носителей в виде плазменных возбуждений, присущих системам с расщеплением Рашбы. При температуре образца 60 К динамика возбужденных состояний определяется взаимодействием электронной системы с поверхностным плазмоном, что приводит к уменьшению времени затухания ко дну зоны и увеличению к уровню Ферми. При комнатной температуре распад уже почти не зависит от энергии связи и, следовательно, в нем преобладают эффективное квазиупругое рассеяние и поверхностная рекомбинация. Полученные результаты показывают, что квазиупругое и неупругое рассеяние очень эффективно перераспределяют носители по расщепленным электронным состояниям. Было показано, что рассеяние импульса и эмиссия плазмонов приводят к быстрому перераспределению носителей, уменьшая возможную оптически индуцированную спиновую поляризацию. Формируемые сверхбыстрые процессы рассеяния эффективно перераспределяют возбужденные носители в импульсном и энергетическом пространстве и тем самым подавляют спин-поляризованные фототоки. Таким образом, рассеяние носителей на оптических фонах и дефектах должно быть уменьшено, чтобы гарантировать потенциал материалов Рашбы в опто-спинтронных приложениях.

Все запланированные в отчетном году научные результаты достигнуты:

да

1.5. Описание выполненных в отчетном году работ и полученных научных результатов для публикации на сайте РНФ

на русском языке (до 3 страниц текста, также указываются ссылки на информационные ресурсы в сети Интернет (url-адреса), посвященные проекту)

В отчетном периоде получены следующие научные результаты:

- 1) Проведено изучение особенностей электронной и спиновой структуры антиферромагнитного топологического изолятора (ТИ) $MnBi_2Te_4$ и анализ величины энергетической щели в точке Дирака. В рамках работы по проекту методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ФЭСУР) была детально исследована серия образцов $MnBi_2Te_4$, изготовленных различными технологиями, и детально исследованы особенности их электронной структуры и вариации величины энергетической щели, открываемой в точке Дирака. Экспериментально было выявлено, что величина энергетической щели для различных образцов может изменяться в диапазоне между 15 и 65 мэВ. Измерения проводились как при температуре ниже температуры Нееля в диапазоне 10-16 К, так и выше 30-35К. При этом примерно у половины исследованных образцов была измерена энергетическая щель порядка 30 мэВ, в то время как для четверти образцов величины измеряемых энергетических щелей находились в диапазоне от 50 до 60 мэВ. У некоторых образцов величина энергетической щели была в диапазоне 15-21 мэВ. При этом энергетическая щель в точке Дирака для всех образцов остается открытой и выше температуры Нееля, практически не изменяя своего размера при увеличении температуры. Сравнительный анализ модуляции величины расщепления $Te\ pz$ состояний от температуры показал, что магнитные свойства для образцов с различной величиной щели в точке Дирака, являются подобными, несмотря на различные размеры энергетической щели.
- 2) Для анализа возможных факторов, ответственных за вариацию энергетической щели в точке Дирака были проведены расчеты электронной структуры топологических состояний для $MnBi_2Te_4$ и величины энергетической щели, открываемой в точке Дирака, а также ее изменений при приложении перпендикулярно поверхности электрического поля варьируемой напряженности. Аналогичные расчеты были также проведены для избыточного заряда различной величины и знака, локализованного на поверхности, который может возникать вследствие аккумуляции различных дефектов донорного или акцепторного типа в приповерхностной области. Произведен расчет изменений электронной и спиновой структуры топологических состояний для out-of-plane и in-plane спиновой ориентации и соответствующие изменения величины энергетической щели, открываемой в точке Дирака, в зависимости величины и знака заряда, локализованного на поверхности образца или соответствующей величины и знака градиента поверхностного потенциала. В результате было показано, что величина энергетической щели, открываемой в точке Дирака, может сильно варьироваться в зависимости от величины и знака заряда на поверхности, от максимально возможной величины (вплоть до 80-90 мэВ) и вплоть до минимальной величины, близкой к нулевому значению. Это позволило сделать вывод, что одним из факторов, ответственных за вариацию величины щели, может

являться аккумуляция заряженных дефектов вблизи поверхности. При этом тип дефектов и их концентрация и определяет вариацию величины энергетической щели для различных образцов.

3) Проведено изучение особенностей электронной структуры ТИ семейства $MnBi_2Te_4(Bi_2Te_3)_m$. Было показано, что в случае терминации поверхности магнитным семислойником $MnBi_2Te_4$ положение точки Дирака для всех типов образцов семейства $MnBi_2Te_4(Bi_2Te_3)_m$ приблизительно одинаково. Но при этом имеют место значительные отличия в структуре состояний зоны проводимости, в отличие $MnBi_2Te_4$, обусловленные гибридизацией состояний Дираковского конуса в верхнем семислойнике $MnBi_2Te_4$ с объемными состояниями из нижележащего пятислойника Bi_2Te_3 .

Гибридизационные эффекты особенно ярко проявляются для случаев поверхностной терминации одним пятислойником Bi_2Te_3 путем формирования ярковыраженной запрещенной гибридизационной щели в области состояний верхнего конуса Дираковских состояний, находящихся в области края валентных состояний у нижележащего семислойника. В случае поверхностной терминации двумя пятислойниками данные гибридизационные эффекты проявляются уже в меньшей степени.

В рамках работ по проекту проведены исследования изменений электронной структуры систем $MnSb(2-x)Bi_xTe_4$ с уровнем легирования атомами Sb и показан соответствующий сдвиг положения точки Дирака в сторону уровня Ферми при росте концентрации Sb . Показано, что наиболее оптимальным для применения в спинтронике является стехиометрический состав, соответствующий уровню легирования атомами Sb равный 30%. В этом случае точка Дирака и соответствующая энергетическая щель в точке Дирака находятся на уровне Ферми.

4) Проведено изучение изменений электронной структуры топологических поверхностных состояний при напылении атомов Co и Mn на поверхность ТИ Bi_2Te_3 , $MnBi_2Te_4$ и $BiSbTeSe_2$ при различных температурах и проанализирована возможность модуляции величины щели в точке Дирака при легировании топологических изоляторов атомами магнитных металлов. В результате исследований было показано, что при этом происходит образование ферромагнитной поверхности верхнего пятислойного блока (т.е. $Te\backslash Se-Bi\backslash Sb-Te\backslash Se-Bi\backslash Sb-Te\backslash Se$) с замещением атомов $Bi\backslash Sb$ преимущественно во втором слое на атомы Co . В результате в структуре поверхностных топологических состояний наблюдается появление запрещенной зоны в точке Дирака величиной до 21 мэВ. При осаждении Mn на поверхность $BiSbTeSe_2$ также наблюдалось появление запрещенной зоны в точке Дирака на уровне 37 мэВ.

Изученный способ поверхностного легирования ТИ может оказаться наиболее перспективным для создания магнитных ТИ, так как не нарушается объемная структура материала и при этом магнитный слой может эффективно взаимодействовать с топологическими поверхностными состояниями, приводя к открытию запрещенной зоны в точке Дирака.

5) Проведены исследования электронной структуры и анализ поверхностной кристаллической структуры системы с квазисвободным графеном, сформированным на поверхности монокристалла SiC , и получена информация о структуре после интеркаляции Co . Топография поверхности исследуемого интеркалированного образца была измерена методом атомно-силовой микроскопии. Было показано, что синтез буферного слоя графена и интеркаляция Co приводят к формированию слоистой структуры поверхности с кластерами треугольной формы размером около 5–10 нм. Данная структура поверхности связана с образованием тонких слоев $CoSi/CoSi_2$. При температурном отжиге происходит трансформация $CoSi$ слоя в $CoSi_2$ на границе с подложкой кремния. Для подтверждения слоистой структуры $CoSi/CoSi_2$ и получения более детальной информации о структуре слоев были выполнены исследования поперечных срезов методом просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения. Проведенные исследования свидетельствуют о наличии в этом слое атомов Co и уменьшении концентрации атомов Si от подложки SiC до пассивирующего слоя. Методом ФЭСУР с использованием синхротронного излучения была исследована модификация электронной структуры графена после интеркаляции кобальта. Было показано, что в электронной структуре в области точки K зоны Бриллюэна наблюдается конус Дирака π электронных состояний, характерный для квазисвободного графена. При этом методом дифракции медленных электронов получено изображение гексагональной картины дифракции с четкими рефлексами графена. В сочетании с данными просвечивающей электронной микроскопии высокого разрешения и атомно-силовой микроскопии было продемонстрировано, что в результате интеркаляции кобальта между квазисвободным графеном и подложкой SiC образуется ультратонкая силицидная структура $CoSi/CoSi_2$. Таким образом, несмотря на структурную разориентацию слоев, графен имеет квазисвободный характер с линейной дисперсией π состояний. Наличие наноразмерного слоя $CoSi$ под квазисвободным графеном открывает возможности по использованию графена на изолирующих подложках в устройствах спинтроники. Проведены экспериментальные и теоретические исследования электронной, спиновой структуры и магнитных свойств ферромагнитного графена, сформированного на подложке $Au/Co/W(110)$ с точкой Дирака ниже уровня Ферми и исследованы особенности его электронной структуры.

6) Проведен анализ модификации конуса Дирака графена на поверхности $Re(0001)$ при интеркаляции атомов Bi и O . В процессе исследований были изучены и использованы подходы и методы модификации электронной структуры графена, приводящие к его функционализации для эффективного применения в электронике и спинтронике. Методом

ФЭСУР были измерены дисперсионные зависимости электронных π -состояний графена в К-точке зоны Бриллюэна, демонстрирующие сохранение квазисвободного характера графена при интеркаляции Vi , а также показано появление второго конуса Дирака после интеркаляции системы атомами кислорода. В результате исследований, было выявлено, что интеркаляция висмута приводит к тому, что графен переходит из сильно связанного состояния в квазисвободное состояние с линейным характером дисперсии, а также к сдвигу π -состояний графена в сторону больших энергий связи примерно на 0,4 эВ из-за переноса заряда от атомов висмута к графену. Была оценена возможность наличия запрещенной зоны шириной не менее 0,4 эВ. Было выявлено, что положение точки Дирака различается в зависимости от конфигурации интеркалированных атомов. Проанализированы причины появления двух конусов Дирака в ФЭСУР спектрах после выноса системы на воздух. Первый из конусов возникает ввиду переноса заряда от атомов Vi , что приводит к смещению точки Дирака ниже уровня Ферми, т. е. к n -допированию графена. Для второго конуса точка Дирака расположена выше уровня Ферми, что приводит к p -допированию, связанному с интеркаляцией атомов кислорода. Таким образом, посредством интеркалирования атомов Vi и/или O под графен на $\text{Re}(0001)$ можно управлять носителями заряда графена (p -типа и n -типа), а также созданием запрещенной зоны точки Дирака.

7) Проведено изучение влияния легирования атомами магнитных переходных металлов различной концентрации на электронную и спиновую структуры 2D Рашба систем на основе BiTeI , а также анализ динамики носителей на Te -терминированной поверхности BiTeI . В результате проведенных исследований было выявлено сложное взаимодействие динамики поверхности и объема после фотовозбуждения. Было показано, что носители быстро перестраиваются в импульсном пространстве за счет квазиупругого рассеяния фононов и дефектов, при этом эффекты фононных взаимодействий типа «бутылочного горлышка» приводят к медленному уравниванию между объемными электронами и решеткой. Кроме того, баллистический перенос объемных носителей на поверхность в остаточном электростатическом поле положительно заряженной поверхности приводит к накоплению носителей заряда вокруг уровня Ферми, где они могут распадаться за счет поверхностной рекомбинации и электрон-фононного рассеяния. Дырочная динамика при больших энергиях связи показывает значительное влияние особенностей электронной структуры поверхностного состояния, обусловленных эффектами спинового расщепления Рашбы. Особенности зонной дисперсии в данном материале открывают канал неупругого распада для «горячих» носителей в виде плазмонных возбуждений, присущих системам с расщеплением Рашбы. Было показано, что рассеяние импульса и эмиссия плазмонов приводят к быстрому перераспределению носителей, уменьшая возможную оптически индуцированную спиновую поляризацию. Формируемые сверхбыстрые процессы рассеяния эффективно перераспределяют возбужденные носители в импульсном и энергетическом пространстве и тем самым подавляют спин-поляризованные фототоки.

на английском языке

The electronic and spin structure features of the antiferromagnetic topological insulator (TI) MnBi_2Te_4 were studied and the energy gap at the Dirac point (DP) was analyzed. Within the framework of the project a series of MnBi_2Te_4 samples fabricated by different technologies were studied by the angle-resolved photoelectron spectroscopy method (ARPES). Their electronic structure features and variations in the value of the energy gap opened at the Dirac point were investigated in details. It was found experimentally that the value of the energy gap for different samples can vary in the range between 15 and 65 meV. Measurements were taken both at temperatures below the Neel temperature: 10-16 K, and above it: 30-35K. Approximately one half of the studied samples had energy gap of about 30 meV, while for a quarter of the samples the measured energy gaps were in the range of 50 to 60 meV. Some of the samples had energy gap values in the range of 15-21 meV. At the same time, the energy gap at the Dirac point for all samples remains open even above the Neel temperature, practically not changing its size with temperature. A comparative analysis of the modulation of the magnitude of the splitting of Te p_z states with temperature for the all samples showed that the magnetic properties for them are similar, despite the difference in the gap sizes.

To analyze the possible factors responsible for the variation of the energy gap at the Dirac point, we calculated the electronic structure of the topological states for MnBi_2Te_4 and the value of the energy gap opened at the Dirac point, as well as its changes when an electric field of varying strength is applied perpendicular to the surface. Similar calculations were also carried out for the excess charge of different magnitude and sign, localized on the surface, which can arise due to the accumulation of various defects of donor or acceptor type in the near-surface area. The changes in the electronic and spin structure of topological states for the out-of-plane and in-plane spin orientations and the corresponding changes in the value of the energy gap opened at the Dirac point, depending on the magnitude and sign of the charge localized on the sample surface or the corresponding magnitude and sign of the surface potential gradient, were calculated. As a result, it was shown that the magnitude of the energy gap opened at the Dirac point can vary greatly depending on the magnitude and the sign of the charge on the surface, from the maximum possible value (up to 80-90 meV) to a minimum value close to zero. This allowed us to conclude that one of the factors responsible for the variation of the gap size may be the accumulation of

charged defects near the surface. In this case, the type of defects and their concentration determine the variation of the energy gap value for different samples.

The electronic structure of the $\text{MnBi}_2\text{Te}_4(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$ TI family was studied. It was shown that in the case of surface termination by a magnetic MnBi_2Te_4 septuple layer, the position of the Dirac point for all types of $\text{MnBi}_2\text{Te}_4(\text{Bi}_2\text{Te}_3)_m$ samples is approximately the same. But there are significant differences in the structure of conduction band states, unlike MnBi_2Te_4 , due to hybridization of the Dirac cone states in the upper septuple layer MnBi_2Te_4 with the bulk states from the underlying quintuple layer Bi_2Te_3 . Hybridization effects are particularly pronounced for the cases of surface termination by one quintuple layer Bi_2Te_3 . In the case of surface termination with two quintuple layers, these hybridization effects appear weaker.

Within the framework of the project the changes in the electronic structure of $\text{MnSb}_{(2-x)}\text{Bi}_x\text{Te}_4$ systems with the doping level of Sb atoms were investigated and the corresponding shift of the Dirac point position toward the Fermi level with increasing Sb concentration was shown. It was demonstrated that the most optimal for spintronics applications is the stoichiometric composition corresponding to the Sb atom doping level equal to 30%. In this case, the Dirac point and the corresponding energy gap in the Dirac point are at the Fermi level.

The changes in the electronic structure of topological surface state during the deposition of Co and Mn atoms on the surface of Bi_2Te_3 , MnBi_2Te_4 and BiSbTeSe_2 TI at different temperatures were studied and the possibility of modulating the gap value at the Dirac point when doping topological insulators with magnetic metal atoms was analyzed. As a result of studies, it was shown that the formation of ferromagnetic surface of the upper quintuple layer block (i.e., $\text{Te}\backslash\text{Se}-\text{Bi}\backslash\text{Sb}-\text{Te}\backslash\text{Se}-\text{Bi}\backslash\text{Sb}-\text{Te}\backslash\text{Se}$) with replacement of $\text{Bi}\backslash\text{Sb}$ atoms mainly in the second layer by Co atoms occurs. As a result, the appearance of the band gap at the Dirac point up to 21 meV was observed in the structure of surface topological state. When Mn was deposited on the surface of BiSbTeSe_2 , the appearance of the gap at the Dirac point of about 37 meV was also observed. The studied method of TI surface doping can be very promising for the creation of magnetic TIs, since the bulk structure of the material is not violated and the magnetic layer can effectively interact with the topological surface state, leading to the opening of the gap at the Dirac point.

The changes in the electronic structure and in the surface crystal structure of a system with quasi-free graphene formed on a SiC single crystal were studied, and information on the structure after intercalation of Co was obtained. The surface topography of the intercalated sample was measured by atomic force microscopy. It was shown that the synthesis of the graphene buffer layer and intercalation of Co leads to the formation of a layered surface structure with triangular shaped clusters of about 5-10 nm. This surface structure is associated with the formation of $\text{CoSi}/\text{CoSi}_2$ thin layers. The CoSi layer is transformed into CoSi_2 at the boundary with the silicon substrate during temperature annealing. To confirm the layered structure of $\text{CoSi}/\text{CoSi}_2$ and to obtain more detailed information about the structure of the layers, cross-sections of the samples were examined by high resolution transmission electron microscopy. These studies indicate the presence of Co atoms in this layer and a decrease in the concentration of Si atoms from the SiC substrate to the passivating layer. The modification of the electronic structure of graphene after cobalt intercalation was investigated by the ARPES method using synchrotron radiation source. It was shown that in the electronic structure in the region of the K point of the Brillouin zone, the Dirac cone π electronic states characteristic for the quasi-freestanding graphene was observed. The hexagonal diffraction pattern with clear graphene reflexes was obtained by the method of low energy electron diffraction (LEED). Combined with high-resolution transmission electron microscopy and atomic force microscopy data, it was demonstrated that cobalt intercalation between the quasi-freestanding graphene and the SiC substrate resulted in the formation of an ultra-thin $\text{CoSi}/\text{CoSi}_2$ silicide structure. Thus, despite the structural disorientation of the layers, the graphene has a quasi-free character with a linear dispersion of π states. The presence of the nanoscale CoSi layer under the quasi-free graphene opens the possibility of using graphene on insulating substrates in spintronics devices. Experimental and theoretical studies of the electronic and spin structure and magnetic properties of the ferrimagnetic graphene formed on the $\text{Au}/\text{Co}/\text{W}(110)$ substrate with the Dirac point below the Fermi level were carried out, and the features of its electronic structure were studied.

The modification of the Dirac cone of graphene on top of the $\text{Re}(0001)$ monocrystal under the intercalation of Bi and O atoms was analyzed. In the research we studied and used approaches and methods to modify the electronic structure of graphene, leading to its functionalization for effective use in electronics and spintronics. By the ARPES method the dispersion dependences of the electronic π -states of graphene at the K-point of the Brillouin zone were measured, demonstrating the preservation of the quasi-free character of graphene during the Bi intercalation. The appearance of the second Dirac cone after the system intercalation with oxygen atoms was also shown. As a result of studies, it was found that bismuth intercalation leads to the fact that graphene passes from the strongly bound state to the quasi-free state with linear dispersion character, as well as to the shift of the π -states of graphene towards higher binding energies by about 0.4 eV due to the charge transfer from bismuth atoms to graphene. The possibility of the band gap at the Dirac point with a width of at least 0.4 eV was evaluated. It was found that the position of the Dirac point varies depending on the configuration of the intercalated atoms. The reasons for the appearance of two Dirac cones in the ARPES spectra after taking the system to air are analyzed.

The first cone arises due to charge transfer from the Bi atoms, which leads to a shift of the Dirac point below the Fermi level, i.e. to n-doping of the graphene. For the second cone the Dirac point is located above the Fermi level, which leads to p-doping associated with the intercalation of oxygen atoms. Thus, by intercalating Bi and/or O atoms under the graphene at Re(0001), the graphene charge carriers (p-type and n-type) can be controlled and the band gap at the Dirac point can be created.

The effect of doping with magnetic transition metal atoms of different concentrations on the electronic and spin structures of 2D Rashba systems based on BiTeI as well as the analysis of carrier dynamics on the Te-terminated BiTeI surface were studied. These studies revealed a complex interaction between surface and bulk dynamics after photoexcitation. It was shown that carriers rearrange rapidly in the momentum space due to quasi-elastic scattering of phonons and defects, with "bottle-neck" type phonon interactions resulting in a slow equilibration between the bulk electrons and the lattice. In addition, the ballistic transfer of bulk carriers to the surface in the residual electrostatic field of the positively charged surface leads to the accumulation of charge carriers around the Fermi level, where they can decay due to surface recombination and electron-phonon scattering. The hole dynamics at high coupling energies show the significant influence of the features of the electronic structure of the surface state, caused by the effects of the Rashba-type spin splitting. Peculiarities of the band dispersion in this material open a channel of inelastic decay for "hot" carriers in the form of the plasmonic excitations inherent in the systems with the Rashba splitting. It was shown that momentum scattering and plasmon emission led to a rapid redistribution of carriers, reducing the possible optically induced spin polarization. The generated ultrafast scattering processes effectively redistribute the excited carriers in the momentum and energy space and thus suppress the spin-polarized photocurrents.

1.6. Файл с дополнительными материалами

(при необходимости представления экспертному совету РНФ дополнительных графических материалов к отчету по проекту, файл размером до 3 Мб в формате pdf)

скачать...

1.7. Перечень публикаций за год по результатам проекта

(добавляются из списка публикаций, зарегистрированных участниками проекта)

1. Гогина А.А., Климовских И.И., Естюнин Д.А., Фильнов С.О., Шикин А.М. (Gogina A. A., Klimovskikh I. I., Estyunin D. A., Filnov S. O., Shikin A. M.) **Dirac Cone Manipulation via Bismuth and Oxygen Intercalation Underneath Graphene on Re(0001)** AIP Conference Proceedings (2021 г.)

2. Кавеев А. К., Сутурин С. М., Голяшов В. А., Кох К. А., Еремеев С. В., Естюнин Д. А., Шикин А. М., Окотруб А. В., Лавров А. Н., Швир Э. Ф., Терещенко О. Е. (Kaveev A. K., Suturein S. M., Golyashov V. A., Kokh K. A., Eremeev S. V., Estyunin D. A., Shikin A. M., Okotrub A. V., Lavrov A. N., Schwier E. F., Tereshchenko O. E.) **Band gap opening in the BiSbTeSe₂ topological surface state induced by ferromagnetic surface reordering** Physical Review Materials (2021 г.)

3. Кеттерл А. С., Андрес Б., Полвериджани М., Ворошнин В., Гал С., Кох К. А., Терещенко О. Е., Чулков Е. В., Шикин А., Вайнелт М. (Ketterl A. S., Andres B., Polverigiani M., Voroshnin V., Gahl S., Kokh K. A., Tereshchenko O. E., Chulkov E. V., Shikin A., Weinelt M.) **Effect of Rashba splitting on ultrafast carrier dynamics in BiTeI** PHYSICAL REVIEW B (2021 г.)

4. Макарова Т.П., Естюнин Д.А., Фильнов С.О., Глазкова Д.А., Пудиков Д.А., Рыбкин А.Г., Гогина А.А., Алиев З.С., Амирасланов И.Р., Мамедов Н.Т., Кох К.А., Терещенко О.Е., Шикин А.М., Чулков Е.В., Климовских И.И. (Makarova T.P., Estyunin D.A., Filnov S.O., Glazkova D.A., Pudikov D.A., Rybkin A.G., Gogina A.A., Aliev Z.S., Amiraslanov I. R., Mamedov N.T., Kokh K.A., Tereshchenko O.E., Shikin A.M., Chulkov E.V., Klimovskikh I.I.) **Влияние атомов Со на электронную структуру топологических изоляторов Bi₂Te₃ и MnBi₂Te₄** Журнал экспериментальной и теоретической физики (2021 г.)

5. Рыбкина А.А., Фильнов С.О., Тарасов А.В., Данилов Д.В., Лихолетова М.В., Ворошнин В.Ю., Пудиков Д.А., Глазкова Д.А., Ерыженков А.В., Елисеев И.А., Давыдов В.Ю., Шикин А.М., Рыбкин А.Г. (Rybkin A. A., Filnov S. O., Tarasov A. V., Danilov D. V., Likholetova M. V., Voroshnin V. Yu., Pudikov D. A., Glazkova D. A., Eryzhenkov A. V., Eliseyev I. A., Davydov V. Yu., Shikin A. M., Rybkin A. G.) **Quasi-freestanding graphene on SiC(0001) via cobalt intercalation of zero-layer graphene** PHYSICAL REVIEW B (2021 г.)

6. Шикин А.М., Естюнин Д.А., Зайцев Н.Л., Глазкова Д., Климовских И.И., Фильнов С., Рыбкин А.Г., Швир Э.Ф., Кумар С., Кимура А., Мамедов Н., Алиев З., Бабанлы М.Б., Кох К., Терещенко О.Е., Отроков М.М., Чулков Е.В., Звездин К.А., Звездин А.К. (Shikin A. M., Estyunin D. A., Zaitsev N. L., Glazkova D., Klimovskikh I. I., Filnov S., Rybkin A. G., Schwier E. F., Kumar S., Kimura A., Mamedov N., Aliev Z., Babanly M. B., Kokh K., Tereshchenko O. E., Otkov M. M., Chulkov E. V., Zvezdin K., Zvezdin A.) **Sample-dependent Dirac-point gap in MnBi₂Te₄ and its response to applied surface charge: A combined photoemission and ab initio study** PHYSICAL REVIEW B (2021 г.)

1.8. В 2021 году возникли исключительные права на результаты интеллектуальной деятельности (РИД), созданные при выполнении проекта:

Нет

1.9. Показатели реализации проекта

Показатели кадрового состава научного коллектива (рассчитываются как округленное до целого отношение суммы количества месяцев, в которых действовали в отчетном периоде в отношении членов научного коллектива приказы о составе научного коллектива, к количеству месяцев, в которых действовало в отчетном периоде соглашение)

Плановые значения указываются только для показателей, предусмотренных соглашением.

Показатели	Единица измерения	2021 год	
		план	факт
Число членов научного коллектива	человек	10	10
Число исследователей в возрасте до 39 лет (включительно) среди членов научного коллектива	человек	9	9
Число аспирантов (интернов, ординаторов, адъюнктов) очной формы обучения среди членов научного коллектива	человек		3
Количество лиц категории «Вспомогательный персонал»	человек		0

Публикационные показатели реализации проекта (значения показателей формируются автоматически на основе данных, представленных в форме 2о (накопительным итогом). Показатели публикационной активности приводятся в отношении публикаций, имеющих соответствующую ссылку на поддержку Российского научного фонда и на организацию (в последнем случае – за исключением публикаций, созданных в рамках оказания услуг сторонними организациями).

Плановые значения указываются только для показателей, предусмотренных соглашением.

Публикационные показатели реализации проекта (нарастающим итогом, за исключением показателя «Число цитирований...»)	Единица измерения	2021 год	
		план	факт
Количество публикаций по проекту членов научного коллектива в рецензируемых российских и зарубежных научных изданиях, индексируемых в базах данных «Сеть науки» (Web of Science Core Collection) или «Скопус» (SCOPUS)	Ед.	4	10
в том числе в изданиях, входящих в первый квартиль (Q1) по импакт-фактору JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, по SJR (принадлежность издания к Q1 в Scopus определяется по базе данных http://www.scimagojr.com/)	Ед.		4
Число цитирований публикаций членов научного коллектива в научных журналах, индексируемых в международной базе данных «Сеть науки» (Web of Science Core Collection) в отчетном году	Ед.		1

1.10. Информация о представлении достигнутых научных результатов на научных мероприятиях (конференциях, симпозиумах и пр.)

(в том числе форма представления – приглашенный доклад, устное выступление, стендовый доклад)

1. Фильнов Сергей Олегович "Исследование процесса интеркаляции кобальта под буферный слой углерода на монокристалле SiC(0001)" (стендовый доклад), VIII Всероссийский с международным участием Молодежный научный форум "Open Science 2021", г. Гатчина, 17 – 19 ноября 2021.

2. Ерыженков Александр Владимирович "Модельное описание электронной структуры графена с индуцированными обменным и спин-орбитальным взаимодействиями" (стендовый доклад), VIII Всероссийский с международным участием Молодежный научный форум "Open Science 2021", г. Гатчина, 17 – 19 ноября 2021.

3. I.I. Klimovskikh, D.E. Estyunin, S.O. Filnov, A.G. Rybkin and A.M. Shikin "Intrinsic magnetic topological insulators: an experimental view" (устный доклад) III Международная конференция и школа «Наноструктуры для фотоники» (NSP-2021), г. Санкт-Петербург, 15 - 17 ноября 2021.

4. I.I. Klimovskikh "Intrinsic magnetic topological insulators: an experimental view" (приглашенный доклад), Quantum Physics / Nanoscience 78th Special Seminar – October 6, 2021

5. А.Г. Рыбкин, А.В. Тарасов, А.А. Рыбкина, А.М. Шикин "Магнитно-спин-орбитальный графен" (устный доклад), XXV

Международный симпозиум «Нанозфизика и нанозлектроника». Онлайн-формат. г. Нижний Новгород, 9-12 марта 2021 года.

6. D.A. Estyunin «Observation of the Antiferromagnetic Topological Insulator $MnBi_2Te_4$ » (устный доклад), 2-ая конференция "Физика Конденсированных Состояний", посвященная 90-летию со дня рождения академика Ю.А. Осипьяна. Очное участие. Черногловка, ИФТТ РАН, 31 мая - 4 июня 2021 года.

1.11. Все публикации, информация о которых представлена в пункте 1.9, имеют указание на получение финансовой поддержки от Фонда:

да

1.12. Информация (при наличии) о публикациях в СМИ, посвященных результатам проекта, с упоминанием Фонда:

Нет

1.13. Изменялся ли в отчетном периоде состав основных исполнителей проекта?

Нет

Основные исполнители проекта в 2021 г.:

Естюнин Дмитрий Алексеевич

Климовских Илья Игоревич

Рыбкина Анна Алексеевна

(в случаях изменения состава основных исполнителей проекта, указанных в заявке на участие в конкурсе, в составе отчета представляются сведения об исключении членов научного коллектива из состава основных исполнителей и о новых основных исполнителях проекта в соответствии с формой 2 приложения № 1 к конкурсной документации о проведении конкурса)

1.14. Форма трудового договора с руководителем проекта соответствует указанной в исходной заявке на участие в конкурсе (п. 2.6 Формы 2):

«Организация будет являться основным местом работы (характер работы – не дистанционный): да»

да

1.15. Перечень работ из Плана научного исследования, которые не были выполнены в связи с объективными обстоятельствами (описание работы из Плана научного исследования, подробное пояснение о приведших к невыполнению обстоятельств):

-

Перечень работ, которые были выполнены досрочно взамен невыполненных в связи с объективными обстоятельствами (описание работы из Плана научного исследования):

-

Настоящим подтверждаю:

- самостоятельность и авторство текста отчета о выполнении проекта;
- при обнародовании результатов, полученных в рамках поддержанного РНФ проекта, научный коллектив ссылался на получение финансовой поддержки проекта от РНФ и на организацию, на базе которой выполнялось исследование;
- согласие с опубликованием РНФ сведений из отчета о выполнении проекта, в том числе в информационно-телекоммуникационной сети «Интернет»;
- проект не имеет других источников финансирования;
- проект не является аналогичным**** по содержанию проекту, одновременно финансируемому из других источников.

**** Проекты, аналогичные по целям, задачам, объектам, предметам и методам исследований, а также ожидаемым

результатам. Экспертиза на совпадение проводится экспертным советом Фонда.

Подпись руководителя проекта _____ /А.М. Шикин/

Сведения о публикациях по результатам проекта
№ 18-12-00062
«Магнитно-упорядоченные 2D системы с Дираковским конусом электронных состояний как ключевые материалы для устройств спинтроники и топологических квантовых компьютеров»,
в 2021 году

Приводится в отношении публикаций, имеющих соответствующую ссылку на поддержку РФФ.

(заполняется отдельно на каждую публикацию, для формирования п.1.7. отчета)
Указывается в случае официального принятия к публикации в последующих изданиях,
положительного решения о регистрации исключительных прав.

В карточке публикации все данные приводятся на языке и в форме, используемой базами данных «Сеть науки» (Web of Science Core Collection), «Скопус» (Scopus) и/или РИНЦ, каждая статья упоминается только один раз (независимо от языков опубликования).

1

2.1. Авторы публикации

Указываются в порядке, приведенном в публикации в формате Фамилия И.О., Фамилия2 И2.О2., ...

на русском языке: Гогина А.А., Климовских И.И., Естюнин Д.А., Фильнов С.О., Шикин А.М.

на английском языке: Gogina A. A., Klimovskikh I. I., Estyunin D. A., Filnov S. O., Shikin A. M.

WoS Researcher ID (при наличии): <https://publons.com/researcher/M-7405-2013>

Scopus AuthorID (при наличии): <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorid=7004434363>

ORCID (при наличии): <https://orcid.org/0000-0002-2476-1248>

В состав авторов публикации входит аспирант(ы) (интерн, ординатор, адъюнкт) очной формы обучения:
да

2.2. Название публикации

Dirac Cone Manipulation via Bismuth and Oxygen Intercalation Underneath Graphene on Re(0001)

2.3. Год публикации

2021

2.4. Ключевые слова

Graphene, Angle-resolved photoemission spectroscopy

2.5. Вид публикации

статья

2.6. Название издания (для монографий также указываются название издательства, город)

AIP Conference Proceedings

ISSN (при наличии): ---

e-ISSN (при наличии): ---

ISBN (при наличии): ---

Издание входит в первый квартиль (Q1) по импакт-фактору JCR Science Edition, JCR Social Sciences Edition, по SJR (принадлежность издания к Q1 в Scopus определяется по базе данных <http://www.scimagojr.com/>):

нет

2.7. Выходные данные публикации (номер, том, выпуск, страницы, реквизиты документа о регистрации исключительных прав)

2359, 020008

Месяц и год публикации: 06.2021

Адрес полнотекстовой электронной версии публикации (URL) в открытом источнике (при наличии):

<https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/5.0056673>

2.8. DOI (при наличии)

<https://doi.org/10.1063/5.0056673>

Accession Number WoS (при наличии): ---

Scopus EID (при наличии): ---

2.9. Принята в печать (указывается в случае официального принятия к публикации в последующих изданиях, положительного решения о регистрации исключительных прав)

Для принятых к публикации материалов п. 2.7 не заполняется.

Письмо из редакции или издательства с извещением об официальном принятии рукописи к публикации: ---

2.10. Издание индексируется базой данных Web of Science Core Collection

да

2.11. Импакт-фактор издания

По JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, для Scopus – CiteScore (при отсутствии индексирования в Web of Science Core Collection).

0.4

2.12. Издание индексируется базой данных Scopus

да

2.13. Издание индексируется базой данных РИНЦ

да

2.14. Публикация аффилирована с организацией:

да

2.15. В публикации:

В качестве источника финансирования исследования указан грант Российского научного фонда:

да

Указаны иные источники финансирования (в том числе указаны несколько грантов Российского научного фонда), помимо данного гранта Российского научного фонда:

да

Пояснения о том, какие работы выполнялись не за счет данного гранта Фонда, как это отражено в публикации (в случаях, если в тексте публикации не отражено за счет каких источников выполнялись отдельные работы – пояснения о причинах отсутствия такой информации и о том, какие работы выполнялись не за счет данного гранта Фонда):

Работа выполнена в рамках данного гранта Фонда. Часть экспериментальных измерений проведена при поддержке СПбГУ. Сведения отражены в разделе публикации Acknowledgment.

2.16. Файл с текстом публикации

(для материалов в открытом доступе можно не размещать; для монографий представляются отдельные страницы с выходными данными и информацией о поддержке РФФИ; размер до 3 Мб в формате pdf)

скачать

2.1. Авторы публикации

Указываются в порядке, приведенном в публикации в формате Фамилия И.О., Фамилия2 И2.О2., ...

на русском языке: Кавеев А. К., Суторин С. М., Голяшов В. А., Кох К. А., Еремеев С. В., Естюнин Д. А., Шикин А. М., Окотруб А. В., Лавров А. Н., Швир Э. Ф., Терещенко О. Е.

на английском языке: Kaveev A. K., Suturin S. M., Golyashov V. A., Kokh K. A., Ereemeev S. V., Estyunin D. A., Shikin A. M., Okotruba A. V., Lavrov A. N., Schvier E. F., Tereshchenko O. E.

WoS Researcher ID (при наличии): <https://publons.com/researcher/M-7405-2013>

Scopus AuthorID (при наличии): <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7004434363>

ORCID (при наличии): <https://orcid.org/0000-0002-2476-1248>

В состав авторов публикации входит аспирант(ы) (интерн, ординатор, адъюнкт) очной формы обучения:
да

2.2. Название публикации

Band gap opening in the BiSbTeSe₂ topological surface state induced by ferromagnetic surface reordering

2.3. Год публикации

2021

2.4. Ключевые слова

Magnetic insulators, Topological materials, Ab initio calculations, Angle-resolved photoemission spectroscopy

2.5. Вид публикации

статья

2.6. Название издания (для монографий также указываются название издательства, город)

Physical Review Materials

ISSN (при наличии): ---

e-ISSN (при наличии): ---

ISBN (при наличии): ---

Издание входит в первый квартиль (Q1) по импакт-фактору JCR Science Edition, JCR Social Sciences Edition, по SJR (принадлежность издания к Q1 в Scopus определяется по базе данных <http://www.scimagojr.com/>):

да

2.7. Выходные данные публикации (номер, том, выпуск, страницы, реквизиты документа о регистрации исключительных прав)

Месяц и год публикации: ---

Адрес полнотекстовой электронной версии публикации (URL) в открытом источнике (при наличии):
<https://journals.aps.org/prmaterials/accepted/a507cZ46U9d1f30c317797b7e5208ec81a5aa6753>

2.8. DOI (при наличии)

Accession Number WoS (при наличии): ---

Scopus EID (при наличии): ---

2.9. Принята в печать (указывается в случае официального принятия к публикации в последующих изданиях, положительного решения о регистрации исключительных прав)

Для принятых к публикации материалов п. 2.7 не заполняется.

да

Письмо из редакции или издательства с извещением об официальном принятии рукописи к публикации: скачать

В формате pdf, до 3 Мб, в том числе электронное письмо.

2.10. Издание индексируется базой данных Web of Science Core Collection

да

2.11. Импакт-фактор издания

По JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, для Scopus – CiteScore (при отсутствии индексирования в Web of Science Core Collection).

3.989

2.12. Издание индексируется базой данных Scopus

да

2.13. Издание индексируется базой данных РИНЦ

да

2.14. Публикация аффилирована с организацией:

да

2.15. В публикации:

В качестве источника финансирования исследования указан грант Российского научного фонда:

да

Указаны иные источники финансирования (в том числе указаны несколько грантов Российского научного фонда), помимо данного гранта Российского научного фонда:

да

Пояснения о том, какие работы выполнялись не за счет данного гранта Фонда, как это отражено в публикации (в случаях, если в тексте публикации не отражено за счет каких источников выполнялись отдельные работы – пояснения о причинах отсутствия такой информации и о том, какие работы выполнялись не за счет данного гранта Фонда):

Support by the Russian Science Foundation Grant No. 18-12-00062 in part of the photoemission measurements. Сведения отражены в разделе публикации Acknowledgment.

Остальные работы выполнялись не за счет данного гранта Фонда.

2.16. Файл с текстом публикации

(для материалов в открытом доступе можно не размещать; для монографий представляются отдельные страницы с выходными данными и информацией о поддержке РФФ; размер до 3 Мб в формате pdf)

скачать

3

2.1. Авторы публикации

Указываются в порядке, приведенном в публикации в формате Фамилия И.О., Фамилия2 И2.О2., ...

на русском языке: Кеттерл А. С., Андрес Б., Полвериджани М., Ворошнин В., Гал С., Кох К. А., Терещенко О. Е., Чулков Е. В., Шикин А., Вайнелт М.

на английском языке: Ketterl A. S., Andres B., Polverigiani M., Voroshnin V., Gahl C., Kokh K. A., Tereshchenko O. E., Chulkov E. V., Shikin A., Weinelt M.

WoS Researcher ID (при наличии): <https://publons.com/researcher/M-7405-2013>

Scopus AuthorID (при наличии): <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorid=7004434363>

ORCID (при наличии): <https://orcid.org/0000-0002-2476-1248>

В состав авторов публикации входит аспирант(ы) (интерн, ординатор, адъюнкт) очной формы обучения:

нет

2.2. Название публикации

Effect of Rashba splitting on ultrafast carrier dynamics in BiTeI

2.3. Год публикации

2021

2.4. Ключевые слова

Carrier dynamics, Quasiparticles and collective excitations, Spin-orbit coupling, Surface plasmons, Surface states, Time and angle resolved photoemission spectroscopy

2.5. Вид публикации

статья

2.6. Название издания (для монографий также указываются название издательства, город)

PHYSICAL REVIEW B

ISSN (при наличии): ---

e-ISSN (при наличии): ---

ISBN (при наличии): ---

Издание входит в первый квартиль (Q1) по импакт-фактору JCR Science Edition, JCR Social Sciences Edition, по SJR (принадлежность издания к Q1 в Scopus определяется по базе данных <http://www.scimagojr.com/>):

да

2.7. Выходные данные публикации (номер, том, выпуск, страницы, реквизиты документа о регистрации исключительных прав)

103, 085406

Месяц и год публикации: 02.2021

Адрес полнотекстовой электронной версии публикации (URL) в открытом источнике (при наличии):
<https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.103.085406>

2.8. DOI (при наличии)

<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.103.085406>

Accession Number WoS (при наличии): ---

Scopus EID (при наличии): ---

2.9. Принята в печать (указывается в случае официального принятия к публикации в последующих изданиях, положительного решения о регистрации исключительных прав)

Для принятых к публикации материалов п. 2.7 не заполняется.

Письмо из редакции или издательства с извещением об официальном принятии рукописи к публикации: ---

2.10. Издание индексируется базой данных Web of Science Core Collection

да

2.11. Импакт-фактор издания

По JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, для Scopus – CiteScore (при отсутствии индексирования в Web of Science Core Collection).

4.036

2.12. Издание индексируется базой данных Scopus

да

2.13. Издание индексируется базой данных РИНЦ

да

2.14. Публикация аффилирована с организацией:

да

2.15. В публикации:

В качестве источника финансирования исследования указан грант Российского научного фонда:

да

Указаны иные источники финансирования (в том числе указаны несколько грантов Российского научного фонда), помимо данного гранта Российского научного фонда:

да

Пояснения о том, какие работы выполнялись не за счет данного гранта Фонда, как это отражено в публикации (в случаях, если в тексте публикации не отражено за счет каких источников выполнялись отдельные работы – пояснения о причинах отсутствия такой информации и о том, какие работы выполнялись не за счет данного гранта Фонда):

В рамках данного гранта Фонда проведена часть экспериментальных исследований по изучению электронной структуры. Сведения отражены в разделе публикации Acknowledgment.

Остальные работы выполнялись не за счет данного гранта Фонда.

2.16. Файл с текстом публикации

(для материалов в открытом доступе можно не размещать; для монографий представляются отдельные страницы с выходными данными и информацией о поддержке РФФИ; размер до 3 Мб в формате pdf)

скачать

2.1. Авторы публикации

Указываются в порядке, приведенном в публикации в формате Фамилия И.О., Фамилия2 И2.О2., ...

на русском языке: Макарова Т.П., Естунин Д.А., Фильнов С.О., Глазкова Д.А., Пудиков Д.А., Рыбкин А.Г., Гогина А.А., Алиев З.С., Амირасланов И.Р., Мамедов Н.Т., Кох К.А., Терещенко О.Е., Шикин А.М., Чулков Е.В., Климовских И.И.

на английском языке: Makarova T.P., Estyunin D.A., Filnov S.O., Glazkova D.A., Pudikov D.A., Rybkin A.G., Gogina A.A., Aliev Z.S., Amiraslanov I. .R., Mamedov N.T., Kokh K.A., Tereshchenko O.E., Shikin A.M., Chulkov E.V., Klimovskikh I.I.

WoS Researcher ID (при наличии): <https://publons.com/researcher/M-7405-2013>

Scopus AuthorID (при наличии): <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorId=7004434363>

ORCID (при наличии): <https://orcid.org/0000-0002-2476-1248>

В состав авторов публикации входит аспирант(ы) (интерн, ординатор, адъюнкт) очной формы обучения:
да

2.2. Название публикации

Влияние атомов Со на электронную структуру топологических изоляторов Bi₂Te₃ и MnBi₂Te₄

2.3. Год публикации

2021

2.4. Ключевые слова

Топологические изоляторы, фотоэлектронная спектроскопия с угловым разрешением

2.5. Вид публикации

статья

2.6. Название издания (для монографий также указываются название издательства, город)

Журнал экспериментальной и теоретической физики

ISSN (при наличии): ---

e-ISSN (при наличии): ---

ISBN (при наличии): ---

Издание входит в первый квартиль (Q1) по импакт-фактору JCR Science Edition, JCR Social Sciences Edition, по SJR (принадлежность издания к Q1 в Scopus определяется по базе данных <http://www.scimagojr.com/>):

нет

2.7. Выходные данные публикации (номер, том, выпуск, страницы, реквизиты документа о регистрации исключительных прав)

Месяц и год публикации: ---

Адрес полнотекстовой электронной версии публикации (URL) в открытом источнике (при наличии):

2.8. DOI (при наличии)

Accession Number WoS (при наличии): ---

Scopus EID (при наличии): ---

2.9. Принята в печать (указывается в случае официального принятия к публикации в последующих изданиях, положительного решения о регистрации исключительных прав)

Для принятых к публикации материалов п. 2.7 не заполняется.

да

Письмо из редакции или издательства с извещением об официальном принятии рукописи к публикации: скачать

В формате pdf, до 3 Мб, в том числе электронное письмо.

2.10. Издание индексируется базой данных Web of Science Core Collection

да

2.11. Импакт-фактор издания

По JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, для Scopus – CiteScore (при отсутствии индексирования в Web of Science Core Collection).

1.532

2.12. Издание индексируется базой данных Scopus

да

2.13. Издание индексируется базой данных РИНЦ

да

2.14. Публикация аффилирована с организацией:

да

2.15. В публикации:

В качестве источника финансирования исследования указан грант Российского научного фонда:

да

Указаны иные источники финансирования (в том числе указаны несколько грантов Российского научного фонда), помимо данного гранта Российского научного фонда:

да

Пояснения о том, какие работы выполнялись не за счет данного гранта Фонда, как это отражено в публикации (в случаях, если в тексте публикации не отражено за счет каких источников выполнялись отдельные работы – пояснения о причинах отсутствия такой информации и о том, какие работы выполнялись не за счет данного гранта Фонда):

Работа выполнена в рамках данного гранта Фонда. Часть экспериментальных измерений проведена при поддержке СПбГУ и РФФИ. Сведения отражены в разделе публикации Acknowledgment.

2.16. Файл с текстом публикации

(для материалов в открытом доступе можно не размещать; для монографий представляются отдельные страницы с выходными данными и информацией о поддержке РФФИ; размер до 3 Мб в формате pdf)

скачать

5

2.1. Авторы публикации

Указываются в порядке, приведенном в публикации в формате Фамилия И.О., Фамилия2 И2.О2., ...

на русском языке: Рыбкина А.А., Фильнов С.О., Тарасов А.В., Данилов Д.В., Лихолетова М.В., Ворошнин В.Ю., Пудиков Д.А., Глазкова Д.А., Ерыженков А.В., Елисейев И.А., Давыдов В.Ю., Шикин А.М., Рыбкин А.Г.

на английском языке: Rybkina A. A., Filnov S. O., Tarasov A. V., Danilov D. V., Likholetova M. V., Voroshnin V. Yu., Pudikov D. A., Glazkova D. A., Eryzhenkov A. V., Eliseyev I. A., Davydov V. Yu., Shikin A. M., Rybkin A. G.

WoS Researcher ID (при наличии): <https://publons.com/researcher/M-7405-2013>

Scopus AuthorID (при наличии): <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorid=7004434363>

ORCID (при наличии): <https://orcid.org/0000-0002-2476-1248>

В состав авторов публикации входит аспирант(ы) (интерн, ординатор, адъюнкт) очной формы обучения:

да

2.2. Название публикации

Quasi-freestanding graphene on SiC(0001) via cobalt intercalation of zero-layer graphene

2.3. Год публикации

2021

2.4. Ключевые слова

Graphene, Angle-resolved photoemission spectroscopy, Density functional theory, First-principles calculations, Raman spectroscopy, X-ray photoelectron spectroscopy

2.5. Вид публикации

статья

2.6. Название издания (для монографий также указываются название издательства, город)

PHYSICAL REVIEW B

ISSN (при наличии): ---

e-ISSN (при наличии): ---

ISBN (при наличии): ---

Издание входит в первый квартиль (Q1) по импакт-фактору JCR Science Edition, JCR Social Sciences Edition, по SJR (принадлежность издания к Q1 в Scopus определяется по базе данных <http://www.scimagojr.com/>):

да

2.7. Выходные данные публикации (номер, том, выпуск, страницы, реквизиты документа о регистрации исключительных прав)

104, 155423

Месяц и год публикации: 10.2021

Адрес полнотекстовой электронной версии публикации (URL) в открытом источнике (при наличии):
<https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.104.155423>

2.8. DOI (при наличии)

<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.104.155423>

Accession Number WoS (при наличии): ---

Scopus EID (при наличии): ---

2.9. Принята в печать (указывается в случае официального принятия к публикации в последующих изданиях, положительного решения о регистрации исключительных прав)

Для принятых к публикации материалов п. 2.7 не заполняется.

Письмо из редакции или издательства с извещением об официальном принятии рукописи к публикации: ---

2.10. Издание индексируется базой данных Web of Science Core Collection

да

2.11. Импакт-фактор издания

По JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, для Scopus – CiteScore (при отсутствии индексирования в Web of Science Core Collection).

4.036

2.12. Издание индексируется базой данных Scopus

да

2.13. Издание индексируется базой данных РИНЦ

да

2.14. Публикация аффилирована с организацией:

да

2.15. В публикации:

В качестве источника финансирования исследования указан грант Российского научного фонда:

да

Указаны иные источники финансирования (в том числе указаны несколько грантов Российского научного фонда), помимо данного гранта Российского научного фонда:

да

Пояснения о том, какие работы выполнялись не за счет данного гранта Фонда, как это отражено в публикации (в случаях, если в тексте публикации не отражено за счет каких источников выполнялись отдельные работы – пояснения о причинах отсутствия такой информации и о том, какие работы выполнялись не за счет данного гранта Фонда):

Support by the Russian Science Foundation Grant No. 18-12-00062 in the part of AFM, HRTEM measurements and data

analysis. Сведения отражены в разделе публикации Acknowledgment.
Остальные работы выполнялись не за счет данного гранта Фонда.

2.16. Файл с текстом публикации

(для материалов в открытом доступе можно не размещать; для монографий представляются отдельные страницы с выходными данными и информацией о поддержке РФФИ; размер до 3 Мб в формате pdf)

скачать

2.1. Авторы публикации

Указываются в порядке, приведенном в публикации в формате Фамилия И.О., Фамилия2 И2.О2., ...

на русском языке: Шикин А.М., Естюнин Д.А., Зайцев Н.Л., Глазкова Д., Климовских И.И., Фильнов С., Рыбкин А.Г., Швир Э.Ф., Кумар С., Кимура А., Мамедов Н., Алиев З., Бабанлы М.Б., Кох К., Терещенко О.Е., Отроков М.М., Чулков Е.В., Звездин К.А., Звездин А.К.

на английском языке: Shikin A. M., Estyunin D. A., Zaitsev N. L., Glazkova D., Klimovskikh I. I., Filnov S., Rybkin A. G., Schwier E. F., Kumar S., Kimura A., Mamedov N., Aliev Z., Babanly M. B., Kokh K., Tereshchenko O. E., Otrokov M. M., Chulkov E. V., Zvezdin K., Zvezdin A.

WoS Researcher ID (при наличии): <https://publons.com/researcher/M-7405-2013>

Scopus AuthorID (при наличии): <https://www.scopus.com/authid/detail.uri?authorid=7004434363>

ORCID (при наличии): <https://orcid.org/0000-0002-2476-1248>

В состав авторов публикации входит аспирант(ы) (интерн, ординатор, адъюнкт) очной формы обучения:
да

2.2. Название публикации

Sample-dependent Dirac-point gap in MnBi₂Te₄ and its response to applied surface charge: A combined photoemission and ab initio study

2.3. Год публикации

2021

2.4. Ключевые слова

Antiferromagnets, Magnetic insulators, Topological materials, Ab initio calculations, Angle-resolved photoemission spectroscopy

2.5. Вид публикации

статья

2.6. Название издания (для монографий также указываются название издательства, город)

PHYSICAL REVIEW B

ISSN (при наличии): ---

e-ISSN (при наличии): ---

ISBN (при наличии): ---

Издание входит в первый квартиль (Q1) по импакт-фактору JCR Science Edition, JCR Social Sciences Edition, по SJR (принадлежность издания к Q1 в Scopus определяется по базе данных <http://www.scimagojr.com/>):

да

2.7. Выходные данные публикации (номер, том, выпуск, страницы, реквизиты документа о регистрации исключительных прав)

11, 104, 115168

Месяц и год публикации: 09.2021

Адрес полнотекстовой электронной версии публикации (URL) в открытом источнике (при наличии):
<https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.104.115168>

2.8. DOI (при наличии)

<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.104.115168>

Accession Number WoS (при наличии): ---

Scopus EID (при наличии): ---

2.9. Принята в печать (указывается в случае официального принятия к публикации в последующих изданиях, положительного решения о регистрации исключительных прав)

Для принятых к публикации материалов п. 2.7 не заполняется.

Письмо из редакции или издательства с извещением об официальном принятии рукописи к публикации: ---

2.10. Издание индексируется базой данных Web of Science Core Collection

да

2.11. Импакт-фактор издания

По JCR Science Edition или JCR Social Sciences Edition, для Scopus – CiteScore (при отсутствии индексирования в Web of Science Core Collection).

4.036

2.12. Издание индексируется базой данных Scopus

да

2.13. Издание индексируется базой данных РИНЦ

да

2.14. Публикация аффилирована с организацией:

да

2.15. В публикации:

В качестве источника финансирования исследования указан грант Российского научного фонда:

да

Указаны иные источники финансирования (в том числе указаны несколько грантов Российского научного фонда), помимо данного гранта Российского научного фонда:

да

Пояснения о том, какие работы выполнялись не за счет данного гранта Фонда, как это отражено в публикации (в случаях, если в тексте публикации не отражено за счет каких источников выполнялись отдельные работы – пояснения о причинах отсутствия такой информации и о том, какие работы выполнялись не за счет данного гранта Фонда):

Support by the Russian Science Foundation Grant No. 18-12-00062 in part of the photoemission measurements and total analysis of the results. Сведения отражены в разделе публикации Acknowledgment.

Остальные работы выполнялись не за счет данного гранта Фонда.

2.16. Файл с текстом публикации

(для материалов в открытом доступе можно не размещать; для монографий представляются отдельные страницы с выходными данными и информацией о поддержке РФФ; размер до 3 Мб в формате pdf)

скачать

Подпись руководителя проекта _____/А.М. Шикин/

План работы на 2022 год и ожидаемые результаты по проекту
№ 18-12-00062
«Магнитно-упорядоченные 2D системы с Дираковским конусом электронных состояний как ключевые материалы для устройств спинтроники и топологических квантовых компьютеров»

(представляется для проектов, работа над которыми в соответствии с исходной заявкой на участие в конкурсе должна быть продолжена в следующем году)

3.1. План работы на 2022 год

(в том числе указываются запланированные командировки по проекту), до 5 стр.

1. Комплексное сравнительное изучение особенностей электронной, спиновой структуры и магнитных свойств магнитно-упорядоченных и магнитно-допированных топологических изоляторов различного состава и стехиометрии. Анализ зависимости запрещенной зоны, открываемой в точке Дирака, от концентрации магнитных металлов и соответствующей кристаллической структуры. Изучение взаимосвязи особенностей электронной структуры с возможностью реализации квантового аномального эффекта Холла и топологического магнитоэлектрического эффекта. Изучение атомной морфологии и поверхностной структуры исследуемых систем методами сканирующей туннельной и атомно-силовой зондовой микроскопии.
2. Детальное сравнительное исследование возможности модуляции величины щели, открываемой в точке Дирака, для магнитно-упорядоченных и магнитно-допированных топологических изоляторов различного состава, стехиометрии, с различными параметрами электронной структуры в зависимости от уровня легирования атомами магнитных и немагнитных элементов. Анализ модуляция величины щели в точке Дирака от энергии синхротронного и лазерного излучения при фотовозбуждении при различных температурах, а также в зависимости от приложенного электрического и магнитного полей. Анализ изменений положения точки Дирака относительно уровня Ферми от уровня легирования.
3. Исследования изменений электронной и спиновой структуры Дираковского конуса топологических состояний топологических изоляторов, в том числе топологических сверхпроводников, при контакте со сверхпроводящими, тяжелыми и магнитными металлами.
5. Сравнительное изучение возможностей и методов функционализации графена на различных подложках, с целью эффективного использования в электронных устройствах. Исследование эффектов индуцированного спин-орбитального и обменного взаимодействий в графен-содержащих системах, сформированных на поверхности монокристаллических подложек, с упорядоченным расположением интеркалированных атомов тяжелых, магнитных переходных и редкоземельных металлов. Анализ механизмов усиления обменного взаимодействия в графене при контакте с магнитными металлами, возможности создания магнито-спин-орбитального графена и реализации топологической фазы в графене в подобных системах. Изучение роли периодических структурных дислокаций на интерфейсе между графеном и подложкой в индуцированном спин-орбитальном и обменном взаимодействии в графене, а также в формировании поверхностных спин-поляризованных состояний в Г-точке вблизи уровня Ферми.
6. Анализ проведенных исследований и выявленных закономерностей с целью применения в наноэлектронных и спиновых устройствах на основе магнитно-упорядоченных систем топологических изоляторов, графена и металлов с высоким спин-орбитальным и обменным взаимодействием.

Запланированные командировки по проекту в 2022 году:

Планируются командировки в центры синхротронного излучения Helmholtz-Zentrum Berlin (HZB) (BESSY II г. Берлин, Германия), Solaris (г. Краков, Польша), Elettra (Триест, Италия), HiSOR (Хиросима, Япония) для проведения исследований в рамках проекта по изучению электронной и спиновой структуры систем с Дираковским конусом электронных состояний при использовании высокоинтенсивного синхротронного излучения с варьируемой поляризацией и энергией. (Поездки 2-3 человек в каждый из перечисленных центров синхротронного излучения).

Планируются командировки (или оплата участия в онлайн мероприятиях) для участия в международных и российских научных конференциях для представления научных результатов и их обсуждения с ведущими российскими учеными и учеными ведущих мировых центров по исследуемым научным проблемам:

- XXVI международный симпозиум "Нанозифика и нанозлектроника", 14-17 марта 2022 г., г. Нижний Новгород;
- 5th edition of the European Workshop on Epitaxial Graphene and 2D Materials (EWEG2D'22), May 24-28, 2022;
- Conference "New Trends in Topological Insulators 2022" (NTTI). и др.

3.2. Ожидаемые в конце 2022 года конкретные научные результаты

(форма изложения должна дать возможность провести экспертизу результатов и оценить степень выполнения заявленного в проекте плана работы), до 5 стр.

- будет проведено комплексное сравнительное изучение особенностей электронной, спиновой структуры и магнитных свойств систем на основе магнитно-упорядоченных топологических изоляторов со стехиометриями $MnBi_2Te_4$ и $MnSb_2Te_4$, семейства $MnBi_2Te_4(Bi_2Te_3)_m$, а также серии $MnSb(2-x)Bi_xTe_4$ при изменении концентрации Sb в широких пределах. Будет проведен анализ положения точки Дирака относительно уровня Ферми для различных стехиометрий изучаемых систем, а также изменений величины энергетической щели, открываемой в точке Дирака. От концентрации магнитных металлов, стехиометрии образцов и температуры. Будет изучена модуляция электронных и магнитных свойств, а также факторов их определяющих. Анализ будет проведен методами фотоэлектронной спектроскопии с угловым и спиновым разрешениями и сверхпроводящей магнитометрии при различных температурах. Будет проанализирована взаимосвязь между особенностями электронной структуры и возможностью реализации квантового аномального эффекта Холла и топологического магнитоэлектрического эффекта. Методами сканирующей туннельной и атомно-силовой зондовой микроскопии (в том числе магнитной) будет исследована атомная морфология и поверхностная структуры исследуемых систем.
- будет проведено детальное сравнительное исследование возможности модуляции величины щели, открываемой в точке Дирака, для магнитно-упорядоченных и магнитно-допированных топологических изоляторов различного состава, стехиометрии, с различными параметрами электронной структуры в зависимости от уровня легирования атомами магнитных и немагнитных элементов. Будет исследована возможность модуляции величины щели в точке Дирака приложенным электрическим и магнитным полем, а также в зависимости от энергии синхротронного и лазерного излучения при фотовозбуждении при различных температурах. Будет проанализировано влияние эффектов спин-орбитального взаимодействия на величину щели в точке Дирака. Будет проведен анализ изменений положения точки Дирака относительно уровня Ферми от уровня легирования магнитными металлами.
- будут проведены исследования изменений электронной и спиновой структуры Дираковского конуса топологических состояний систем на основе топологических изоляторов различной стехиометрии, в том числе топологических сверхпроводников, при контакте со сверхпроводящими металлами (Pb), а также тяжелыми и магнитными металлами.
- будет проведено сравнительное изучение возможностей и методов функционализации графена на различных подложках, с целью эффективного использования в электронных устройствах. Будут детально исследованы эффекты индуцированного спин-орбитального и обменного взаимодействий в графен-содержащих системах, сформированных на поверхности монокристаллических подложек, с упорядоченным расположением интеркалированных атомов тяжелых, магнитных переходных и редкоземельных металлов. Будут проанализированы особенности электронной и спиновой структуры состояний в области запрещенной зоны, открываемой в точке Дирака с целью выявления механизмов, определяющих 3D спиновую структуру конуса Дирака. Методом спин-разрешенных фотоэлектронной спектроскопии с высоким угловым и энергетическим разрешением будут определены величины индуцированного спинового расщепления π -состояний графена вследствие индуцированного внешнего спин-орбитального и обменного взаимодействий в зависимости от типа металла, контактирующего с графеном, и поверхностной кристаллической структуры формируемой системы. Будет проведен анализ механизмов усиления обменного взаимодействия в графене при контакте с магнитными металлами, а также возможности создания магнито-спин-орбитального графена и реализации топологической фазы в графен-содержащих и графен-подобных системах. Будет изучена роль периодических структурных дислокаций на интерфейсе между графеном и подложкой в индуцированном спин-орбитальном и обменном взаимодействии в графене, а также в формировании поверхностных спин-поляризованных состояний в Г-точке вблизи уровня Ферми.
- будет проведен общий анализ результатов исследований в рамках проекта и выявленных закономерностей с целью применения в нанозлектронных и спиновых устройствах на основе магнитно-упорядоченных систем топологических изоляторов, графена и металлов с высоким спин-орбитальным и обменным взаимодействием.

3.3. Файл с дополнительной информацией (при необходимости)

С графиками, фотографиями, рисунками и иной информацией о содержании проекта. В формате pdf, размером до 3 Мб.

Подпись руководителя проекта _____/А.М. Шикин/

Запрашиваемое финансирование по проекту
№ 18-12-00062
«Магнитно-упорядоченные 2D системы с Дираковским конусом электронных состояний как ключевые материалы для устройств спинтроники и топологических квантовых компьютеров»,
на 2022 год

4.1. Планируемые расходы по проекту за счет средств, предоставляемых Фондом на следующий год (тыс. руб.)

Без учета неиспользованного остатка средств гранта предыдущих лет на начало планируемого года.

№ п.п.	Направления расходования средств гранта	Сумма расходов (тыс. руб.)
	ВСЕГО	6000
	Вознаграждение членов научного коллектива (с учетом страховых взносов, налогов (при наличии), без лиц категории «вспомогательный персонал»), в том числе:	3000
	вознаграждение членов научного коллектива – исследователей в возрасте до 39 лет (включительно) Имеет информационный характер.	2530
	Вознаграждение лиц категории «вспомогательный персонал» (с учетом страховых взносов, налогов (при наличии))	0
	Оплата ¹ отпусков и выплаты компенсаций за неиспользованные отпуска лицам, являвшимся членами научного коллектива или лицами категории «вспомогательный персонал» (с учетом страховых взносов, налогов (при наличии)), оплата недоимки ² по страховым взносам ¹ Указывается для лиц, которые не будут привлекаться в планируемом периоде к реализации проекта. ² Возникшей по действующему грантовому соглашению.	0
1	Итого вознаграждение (с учетом страховых взносов, налогов (при наличии))	3000
2	Оплата научно-исследовательских работ сторонних организаций, направленных на выполнение научного проекта Не более значений, предусмотренных соглашением.	0
3	Расходы на приобретение оборудования и иного имущества, необходимых для проведения научного исследования (включая обучение работников, монтажные, пуско-наладочные и ремонтные ³ работы) ³ Не связанные с осуществлением текущей деятельности организации.	1800
4	Расходы на приобретение материалов и комплектующих для проведения научного исследования	0
5	Иные расходы для целей выполнения проекта	600
6	Накладные расходы организации Не могут превышать значений, предусмотренных соглашением.	600

4.2. Расшифровка планируемых расходов

№ п.п. Направления расходования средств гранта, расшифровка

1 Итого вознаграждение (с учетом страховых взносов, налогов (при наличии))

(указывается общая сумма вознаграждения с учетом страховых взносов, налогов (при наличии))

1. Шикин Александр Михайлович (руководитель) - 470 тыс. руб.
2. Климовских Илья Игоревич (отв. Исполнитель) - 370 тыс. руб.
3. Рыбкина Анна Алексеевна (отв. Исполнитель) - 370 тыс. руб.
4. Естюнин Дмитрий Алексеевич (отв. Исполнитель) - 370 тыс. руб.
5. Рыбкин Артем Геннадиевич - 370 тыс. руб.
6. Фильнов Сергей Олегович - 370 тыс. руб.
7. Глазкова Дарья Алексеевна - 170 тыс. руб.
8. Гогина Алевтина Андреевна - 170 тыс. руб.

9. Макарова Татьяна Павловна - 170 тыс. руб.
10. Ерыженков Александр Владимирович - 170 тыс. руб.
- 2 Оплата научно-исследовательских работ сторонних организаций, направленных на выполнение научного проекта
(приводится перечень планируемых договоров (счетов) со сторонними организациями с указанием предмета и суммы каждого договора)
- 3 Расходы на приобретение оборудования и иного имущества, необходимых для проведения научного исследования (включая обучение работников, монтажные, пуско-наладочные и ремонтные работы)
(представляется перечень планируемых к закупке оборудования и иного имущества, необходимых для проведения научного исследования)
Закупка электронно-лучевого испарителя металлов для новой сверхвысоковакуумной установки «Altitudo magna - PVD» (AM-PVD), предназначенной для синтеза наносистем методом молекулярно-лучевой эпитаксии (закупка UHV Electron Beam Evaporator with power supply).
- 5 Иные расходы для целей выполнения проекта
(приводится классификация иных затрат на цели выполнения проекта, в том числе - расходы на командировки, связанные с выполнением проекта или представлением результатов проекта, оплату услуг связи, транспортных услуг, иное; расходы не расшифровываются)
- 1) Командировки в центры синхротронного излучения BESSY (Германия), Solaris (Польша), Elettra (Италия), HiSOR (Япония) для проведения экспериментальных исследований в рамках проекта.
- 2) Командировки (или оплата участия в онлайн мероприятиях) для участия в международных и российских научных конференциях.

Подпись руководителя проекта _____/А.М. Шикин/

Подпись руководителя организации (уполномоченного представителя, действующего на основании доверенности (письменного уполномочия)), **печать** (при ее наличии) **организации.**

В случае подписания формы уполномоченным представителем организации (в т.ч. – руководителем филиала) к печатному экземпляру отчета прилагается доверенность (копия письменного уполномочия или доверенности, заверенная печатью организации).

_____/_____
М.П.

Изменения в составе участников

Естюнин Дмитрий Алексеевич

Климовских Илья Игоревич

Рыбкина Анна Алексеевна