Письма в ЖЭТФ, том 121, вып. 12, с. 938 – 944 

# Структурные исследования реконструкции $2 \times 2$-(Bi,Mg) на поверхности Si(111)

*М. В. Рыжкова*[+], *С. Г. Азатьян*[+], *Н. В. Денисов*[+], *Д. А. Цуканов*[+*1)]

[+]*Институт автоматики и процессов управления Дальневосточного отделения РАН, 690041 Владивосток, Россия*

[*]*Дальневосточный федеральный университет, 690922 Владивосток, Россия*

Поступила в редакцию 28 декабря 2024 г.
После переработки 29 апреля 2025 г.
Принята к публикации 30 апреля 2025 г.

Методом расчета из первых принципов была исследована кристаллическая структура поверхностной реконструкции Si(111)$2 \times 2$-(Bi,Mg), полученной в процессе адсорбции магния на поверхностную фазу Si(111)$\sqrt{3} \times \sqrt{3}$-Bi. Установлен стехиометрический состав элементарной ячейки поверхностной реконструкции $2 \times 2$. Исходя из полученных расчетных значений энергии формирования, определены наиболее стабильные структуры для двумерного сплава типа $\mathrm{Bi}_X\mathrm{Mg}_Y$, Показано, что структурная модель с конфигурацией $X = 2$ и $Y = 4$ хорошо согласуется с результатами наблюдений реконструированной поверхности Si(111)$2 \times 2$-(Bi,Mg), полученными с помощью методов дифракции медленных электронов и сканирующей туннельной микроскопии.

DOI: 10.31857/S0370274X25060137, EDN: UJIFSM

**1. Введение.** Исследование кристаллической структуры и электронных свойств низкоразмерных систем на кремнии представляет интерес в плане поиска новых материалов для наноэлектроники, спинтроники и других прикладных областей современной электроники. Такие материалы демонстрируют большое разнообразие физических явлений, например, таких, как сверхпроводимость [1–3], нетривиальная топология поверхностных состояний [4, 5], эффекты сильного спин-орбитального взаимодействия [6], анизотропные спин-поляризованные состояния [7] и другие эффекты [8, 9], перспективные для практического использования. Так, висмут среди тяжелых элементов обладает наибольшей величиной атомного спин-орбитального взаимодействия, что позволяет его использовать, например, в качестве материала, являющегося высокотемпературным топологическим изолятором со спиновым эффектом Холла [10–13], более того, известно, что сверхтонкие пленки висмута обладают спин-поляризованными поверхностными состояниями [14]. С другой стороны, магний, будучи щелочно-земельным элементом, достаточно легко отдает свои внешние электроны, тем самым являясь донором носителей заряда. Благодаря таким особенностям, формирование двумерных сплавов висмута с атомами магния позволит более ярко проявить свойства исходного материала. Так, например, формирование сверхтонких пленок сплава магния с тяжелыми металлами позволяет формировать на поверхности подложки материал со спин-поляризованными состояниями [15], концентрацию носителей в котором можно контролировать, уменьшая или увеличивая количество магния в сплаве. В работе [16] было показано, что магний, как легкий элемент с относительно низкой электроотрицательностью, при формировании двумерного сплава со свинцом оказывает влияние на изгиб зон поверхностных состояний, а также на силу электрон-фононного взаимодействия в двумерной системе (Mg,Pb)/Si(111), что позволяет управлять электрофизическими свойствами такого двумерного сплава, например, его электропроводностью [17]. В сплаве (Mg,In)/Si(111) атомы магния и индия, образуя структуру типа “сэндвич”, формируют двумерный металлический слой со свободными электронными состояниями на подложке Si(111) [18]. В данной работе изучены условия формирования двумерного сплава в системе (Bi,Mg)/Si(111), исследована его кристаллическая структура с использованием экспериментальных и расчетных методов.

**2. Экспериментальные и вычислительные методы.** Экспериментальные исследования проводились в сверхвысоковакуумной камере Riber DEL-300 (рабочее давление порядка $10^{-10}$ Тор), оснащенной дифракцией медленных электронов (ДМЭ), с помощью которой определялись условия формирования двумерных структур на основе магния и висмута на поверхности подложки Si(111), а также на-

1)e-mail: tsukanov@iacp.dvo.ru

блюдалась кристаллическая структура поверхности образцов. Наблюдения атомарной структуры и морфологии поверхности проводились методом сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) в сверхвысоковакуумной камере Omicron Multiprobe Compact. В качестве подложки использовались прямоугольные пластины ($15\times5\times0.45\,мм^3$) кремния Si(111) $n$-типа с удельным сопротивлением 20–100 Ом·см. Очистка поверхности образца проводилась путем промывания в органических растворителях с последующей сушкой, далее образец помещался в сверхвысоковакуумную камеру, где сначала проводилась его дегазация при температуре 600 °C в течение нескольких часов путем пропускания переменного тока, а затем осуществлялся кратковременный прогрев (вспышка) до температуры 1250 °C. Подготовленный таким образом образец на экране ДМЭ демонстрировал четкую картину дифракции $7\times7$, характерную для атомарно-чистого кремния с ориентацией поверхности (111).

В качестве источников висмута и магния использовались ячейки Кнудсена, нагреваемые постоянным током. Скорость осаждения материала (в монослоях/мин.) калибровалась путем наблюдения картин дифракции от реконструированной поверхности подложки с известным числом адсорбированных атомов (1 монослой (МС) адсорбированного материала соответствует концентрации атомов $7.8\times10^{14}\,см^{-2}$ для нереконструированной поверхности Si(111)). Так, для калибровки источника висмута использовались картины дифракции от реконструкций Si(111)-$\alpha$-$\sqrt{3}\times\sqrt{3}$-Bi (далее упоминается как $\alpha$-$\sqrt{3}$-Bi, степень покрытия висмута 1/3 МС) и Si(111)-$\beta$-$\sqrt{3}\times\sqrt{3}$-Bi (далее – $\beta$-$\sqrt{3}$-Bi, степень покрытия висмута 1 МС) [19]. Для калибровки источника магния использовались поверхностные реконструкции Si(111)$3\times1$-Mg (1/3 МС магния) [20] и Si(111)$6\times6$-(Mg,Pb) (формируется при степени покрытия магния около 1 МС) [16].

Решетка структуры поверхностной реконструкции магния и висмута была спроектирована на основе геометрии элементарной ячейки Si(111)$2\times2$. Поверхность Si(111) моделировалась на основе кристаллической решетки объемного кремния с длиной связи 2.357 Å, взятой из базы данных Materials Project (ID mp-149) [21]. Для расчетов была выбрана подложка, состоящая из 6 атомных слоев кремния, из которых два нижних слоя кремния, а также атомы водорода, пассивирующие атомы кремния снизу, были зафиксированы в пространстве. Атомы висмута и магния размещались на верхней поверхности подложки (слаба). Расчеты выполнялись в базисе плоских волн с использованием программного комплекса VASP (Vienna Ab initio Simulation Package) [22, 23]. Оптимизация геометрии структур поверхностной реконструкции, подложки и нижнего слоя кремния с атомами водорода была выполнена с помощью первопринципных расчетов в рамках метода потенциала проекционно-дополненных волн (PAW – Projected Augmented Wave) с использованием функционала Пердью–Берка–Эрнзергофа (PBE – Perdew–Burke–Ernzerhof) в приближении обобщенного градиента (GGA – Generalized Gradient Approximation) [24]. Оптимизация проводилась до тех пор, пока все компоненты атомных сил не стали меньше $10^{-2}$ эВ/Å, а изменение полной энергии было меньше $10^{-6}$ эВ. Расчеты для первой зоны Бриллюэна были выполнены с использованием сетки $k$–точек $7\times7\times1$ для элементарной ячейки $2\times2$. Энергия отсечения для плосковолнового базиса была установлена на уровне 250 эВ. Величина вакуумного зазора составляла 20 Å в направлении, перпендикулярном плоскости поверхности.

Энергия формирования $E_{form}$ структуры с адсорбированными атомами висмута и магния на поверхности кремния в расчете на ячейку $1\times1$ подложки Si(111) рассчитывалась следующим образом:

$$E_{\mathrm{form}} = (E_{\mathrm{str}} - E_{\mathrm{slab}} - n_{\mathrm{Bi}}\mu_{\mathrm{Bi}} - n_{\mathrm{Mg}}\mu_{\mathrm{Mg}})/4, \quad (1)$$

где $E_{str}$ – это расчетная энергия данной структуры, $E_{slab}$ – энергия подложки для данной структуры, $n$ – количество атомов металла, а $\mu$ – химический потенциал, рассчитанный из объемной фазы данного металла. Так как ячейка $2\times2$ состоит из четырех ячеек $1\times1$, то, соответственно, энергия формирования делится на 4.

**3. Результаты и обсуждение.** Для получения совместных структур в системе (Bi,Mg)/Si(111) магний осаждался при комнатной температуре (КТ) на подложку кремния с предварительно сформированной поверхностью Si(111)$\sqrt{3}\times\sqrt{3}$-Bi. Наблюдения картин дифракции показали, что осаждение магния в диапазоне степени покрытия от 0.6 до 2 МС на реконструированную поверхность Si(111)$\sqrt{3}\times\sqrt{3}$-Bi при комнатной температуре приводит к формированию новой реконструкции поверхности Si(111)$2\times2$-(Bi,Mg), картина дифракции которой представлена на рис. 1a. Более того, используя исходную поверхность, покрытой фазой $\beta$-$\sqrt{3}$-Bi не полностью, а частично (остальная часть поверхности занята фазой $\alpha$-$\sqrt{3}$-Bi), а затем, адсорбируя магний, было установлено, что поверхностная реконструкция $2\times2$ на поверхности существует в широком диапазоне степени покрытий висмута (от 0.25 до 1.5 МС). Резуль-

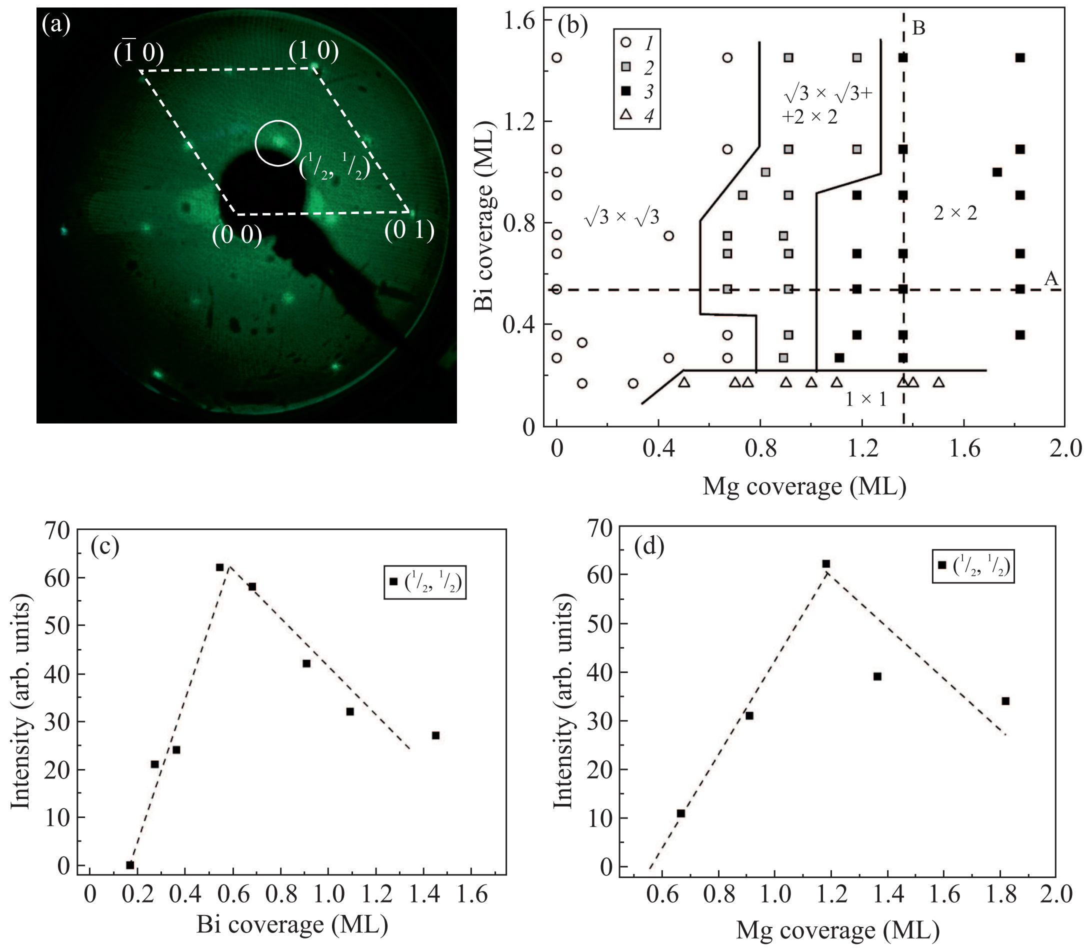


Рис. 1. (Цветной онлайн) (a) – Дифракционная картина от поверхностной реконструкции $2\times2$ ($E_p = 40$ эВ) при степени покрытия Bi – 0.75 МС и Mg – 1.25 МС, ячейка обратной решетки $2\times2$ выделена пунктирной линией, кружком обозначен рефлекс ($\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$). (b) – Фазовая диаграмма системы (Bi,Mg)/Si(111) с указанием наблюдаемых с помощью ДМЭ реконструкций: *1* – $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$; *2* – смеси $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ и $2\times2$; *3* – $2\times2$; *4* – $1\times1$. (c) и (d) – Изменение интенсивности рефлекса ($\frac{1}{2}$ $\frac{1}{2}$) на картине дифракции в зависимости от степени покрытия висмута (c) и магния (d)

таты наблюдений картин дифракции представлены в виде фазовой диаграммы, где показаны области существования поверхностных реконструкций в системе (Bi,Mg)/Si(111) в зависимости от степени покрытия висмута и магния (рис. 1b), том числе и область существования структуры $2\times2$, которая находится на диаграмме справа. На левой области фазовой диаграммы представлены картины ДМЭ, наблюдаемые от поверхностной реконструкции $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$, в том числе $\alpha$-$\sqrt{3}$-Bi, $\beta$-$\sqrt{3}$-Bi , а также их смеси в случае, если концентрация висмута лежит в диапазоне от 1/3 до 1 МС. Это подтверждается распределением интенсивности сверхрефлексов $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ на картинах дифракции при энергии первичного электронного пучка 75 эВ, согласно [19]. В промежуточной области на фазовой диаграмме представлены диапазоны степени покрытий осажденных металлов на Si(111), при которых картины дифракции $2\times2$ и $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ на поверхности подложки наблюдаются совместно. В случае, когда степень покрытия висмута меньше 1/3 МС, то на поверхности наблюдается картина дифракции $1\times1$, что характерно для взаимодействия магния с атомарно-чистой поверхностью кремния Si(111) [20].

На рисунке 1c представлен график изменения интенсивности сверхрефлекса ($\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}$) (см. рис. 1a) в зависимости от степени покрытия магния при фиксированном количестве висмута 0.54 МС на исходной поверхности (линия A на фазовой диаграмме на рис. 1b). Видно, что максимум интенсивности данного сверхрефлекса приходится на степень покрытия магния около 1.2 МС. Обратная ситуация представлена на рис. 1d, где показано изменение интенсивности того же сверхрефлекса ($\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}$) в зависимости

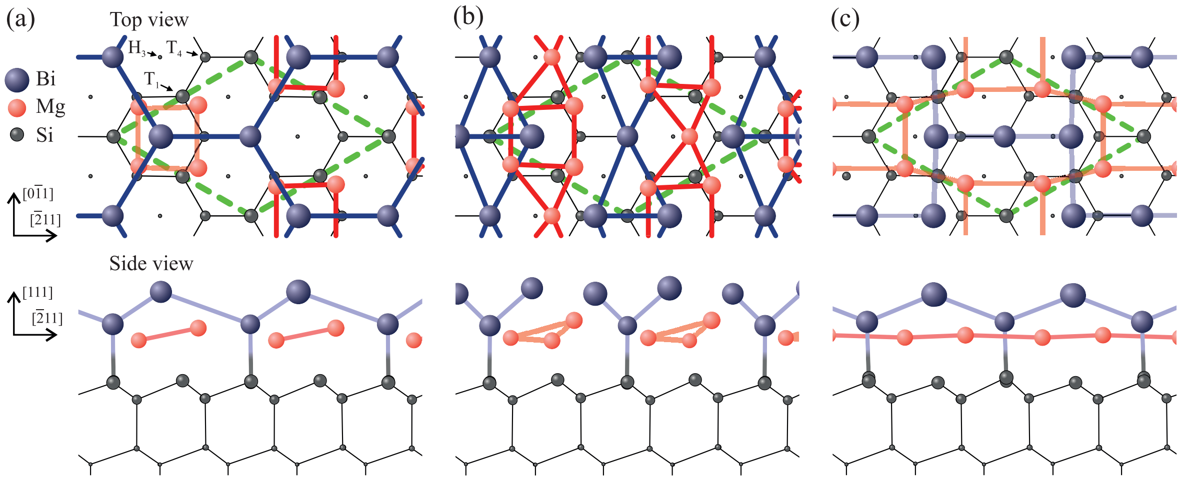


Рис. 2. (Цветной онлайн) Модели решетки $2\times2$ с наиболее энергетически выгодными конфигурациями атомов Bi и Mg на поверхности Si(111) в двух проекциях: (a) – “2 – 4”; (b) – “3 – 5” и (c) – “3 – 4”

от степени покрытия висмута на исходной поверхности при фиксированном количестве адсорбированного магния в 1.36 МС (линия B на фазовой диаграмме рис. 1b). В последнем случае максимум интенсивности приходится на степень покрытия висмута около 0.6 МС. Таким образом, можно установить концентрации атомов висмута и магния в совместной структуре, когда интенсивность сверхрефлекса $(\frac{1}{2}\,\frac{1}{2})$ является максимальной, а значит и кристаллическая структура поверхности является наиболее совершенной. Соответственно, имеется возможность определить примерное количество адсорбированных атомов в элементарной ячейке структуры $2\times2$.

В таблице 1 представлено соотношение количества атомов адсорбата к количеству атомов в 1 МС структуры поверхностной реконструкции $2\times2$, а также соответствующая степень покрытия материала в монослоях. Согласно этой таблице, а также по результатам наблюдений картин дифракции, в элементарной ячейке $2\times2$ может содержаться от 4 до 6 атомов магния (или от 1 до 1.5 МС), а также от 2 до 3 атомов висмута (от 0.5 до 0.75 МС). На основе данной оценки атомарного состава ячейки $2\times2$ были построены предполагаемые модели для численных экспериментов по расчету кристаллической структуры поверхностной реконструкции Si(111)$2\times2$-(Bi,Mg).

Для моделирования атомной структуры поверхностной реконструкции Si(111)$2\times2$-(Bi,Mg) методом перебора были предложены наиболее вероятные места расположения атомов Bi и Mg на поверхности Si(111) в ячейке $2\times2$, которая, в свою очередь, состоит из четырех элементарных ячеек $1\times1$ подложки кремния с высокосимметричными адсорбционными позициями $T_1$, $T_4$ и $H_3$ (показаны на рис. 2a):

**Таблица 1.** Соотношение количества атомов адсорбата $N$ к числу атомов верхнего слоя ячейки Si(111)$2\times2$ ($N_{2\times2}$) и их соответствующие значения степени покрытия $\Theta$ адсорбированного материала, выраженного в монослоях

| $N/N_{2\times2}$ | $\Theta$, МС |
|---|---|
| 1/4 | 0.25 |
| 2/4 | 0.5 |
| 3/4 | 0.75 |
| 4/4 | 1 |
| 5/4 | 1.25 |
| 6/4 | 1.5 |
| 7/4 | 1.75 |
| 8/4 | 2 |

над самым верхним атомом кремния (позиция $T_1$), над атомом кремния во втором слое (позиция $T_4$), над атомом кремния в четвертом слое (позиция $H_3$). А затем рассчитывалась энергия формирования для каждой из конфигураций.

Так как адсорбированные атомы на поверхности стараются повторять симметрию подложки, то было предположено, что, например, атомы Bi занимают преимущественно положения $T_1$, атомы Mg – положения $T_4$ и $H_3$. Были рассмотрены конфигурации атомов адсорбата (Bi и Mg) с количеством от 1 до 8 атомов на ячейку $2\times2$ (см. табл. 1). Таким образом, число позиций для одного атома в ячейке $2\times2$ равно 3, для двух атомов – 6 и так далее – до восьми атомов металла на ячейку, что в сумме дает 164 модели. Помимо них рассматривались и 12 моделей с промежуточными положениями атомов металла, расположенных между высокосимметричными позициями ($T_4$-$H_3$, $T_1$-$T_4$ и $T_1$-$H_3$), а также добавили еще 10 моделей для количества атомов более, чем восемь на ячейку (конфигурации “4–5”, “4–6”, “5–6”, и

"5–7"). Итого было рассмотрено 186 возможных моделей для расчета.

На рисунке 3 представлены результаты численного эксперимента по исследованию энергии формирования для структур, образованных совместно атомами висмута и магния на поверхности Si(111) в ячейке $2 \times 2$. Энергия формирования представлена в зависимости от общего количества $X$ и $Y$ атомов металлов (висмута и магния, соответственно) на поверхности подложки. На графике (рис. 3) показаны только точки с наименьшей энергией формирования для каждой величины общего количества адсорбированных атомов из рассмотренных моделей для структуры $2 \times 2$. Все структуры, представленные на графике на рис. 3, рассчитаны с учетом спин-орбитального взаимодействия. Элементный состав каждой исследованной структуры показан в подписях на графике типа "$X$–$Y$", например, точка "2–4" показывает, что в рассмотренной конфигурации типа $\mathrm{Bi}_X\mathrm{Mg}_Y$ значения $X = 2$ и $Y = 4$ означают, что данная структура содержит 2 атома висмута и 4 атома магния, соответственно. На графике (рис. 3) виден обширный минимум энергии формирования, образованный точками для конфигураций типа "2–4", "3–4", "3–5" и "4–5". Из таблицы 2 видно, что эти структуры являются наиболее близкими по энергии формирования. При этом данные структуры, кроме "4–5", по величине степени покрытия содержащихся в них элементов, висмута и магния, соответствуют диапазону степени покрытия поверхностной реконструкции $2 \times 2$ согласно фазовой диаграмме (рис. 1b), полученной из наблюдений картин ДМЭ. На рисунке 2a–c представлены модели структур элементарной ячейки реконструкции $2 \times 2$ для наиболее энергетически выгодных конфигураций типа "2–4", "3–4" и "3–5" на поверхности кремния Si(111) в горизонтальной плоскости (верхняя панель) и плоскости проекции, которая идет вдоль большой диагонали, являющейся зеркальной плоскостью симметрии для ячейки $2 \times 2$ (нижняя панель). Можно отметить следующие особенности. В представленных трех моделях один атом висмута всегда находится в центре ячейки $2 \times 2$ в позиции $\mathrm{T}_1$, причем этот атом расположен ниже других атомов висмута, на глубине 0.15 Å от поверхности. Кроме того, видно, что модели "2–4" и "3–4" имеют общее структурное сходство – у них есть один и тот же структурный элемент, состоящий из двух атомов висмута и четырех атомов магния. В модели "3–5" крайние атомы висмута располагаются наиболее близко к центральному атому висмута, при этом все атомы висмута в ячейке $2 \times 2$ расположены строго вдоль главной диагонали в направлении $[\bar{2}11]$ во всех трех моделях.

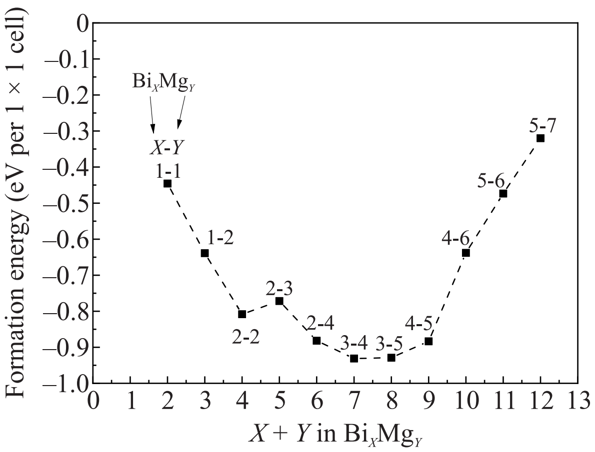


Рис. 3. Энергия формирования в зависимости от общего количества атомов металла (висмута и магния) в решетке $2 \times 2$ на подложке Si(111)

**Таблица 2.** Энергия формирования структур $\mathrm{Bi}_X\mathrm{Mg}_Y$ в расчете на элементарную ячейку $1 \times 1$

| Конфигурация $X$-$Y$ | Энергия, эВ/$1 \times 1$ |
|---|---|
| 1-1 | −0.446 |
| 1-2 | −0.639 |
| 2-2 | −0.808 |
| 2-3 | −0.772 |
| 2-4 | −0.882 |
| 3-4 | −0.931 |
| 3-5 | −0.929 |
| 4-5 | −0.883 |
| 4-6 | −0.638 |
| 5-6 | −0.474 |
| 5-7 | −0.320 |

Для того, чтобы окончательно выбрать наиболее достоверную структурную модель, были проведены исследования поверхности с помощью метода СТМ, что позволило на основании информации о топографии поверхности сравнить расчетные модели со структурой, наблюдаемой в эксперименте. Однако нужно иметь в виду, что метод СТМ чувствителен не только к положению атомов, но и к локальной плотности электронных состояний поверхности [25]. На рисунке 4a, b представлены экспериментальные картины поверхности Si(111)2 × 2-(Bi,Mg) размером $5 \times 5$ нм$^2$, полученные методом СТМ в режиме постоянного тока при приложенных напряжениях +1.4 В (незаполненные состояния, рис. 4a) и −1.4 В (заполненные состояния, рис. 4b). Экспериментальные СТМ-изображения поверхности Si(111)2 × 2-(Bi,Mg)

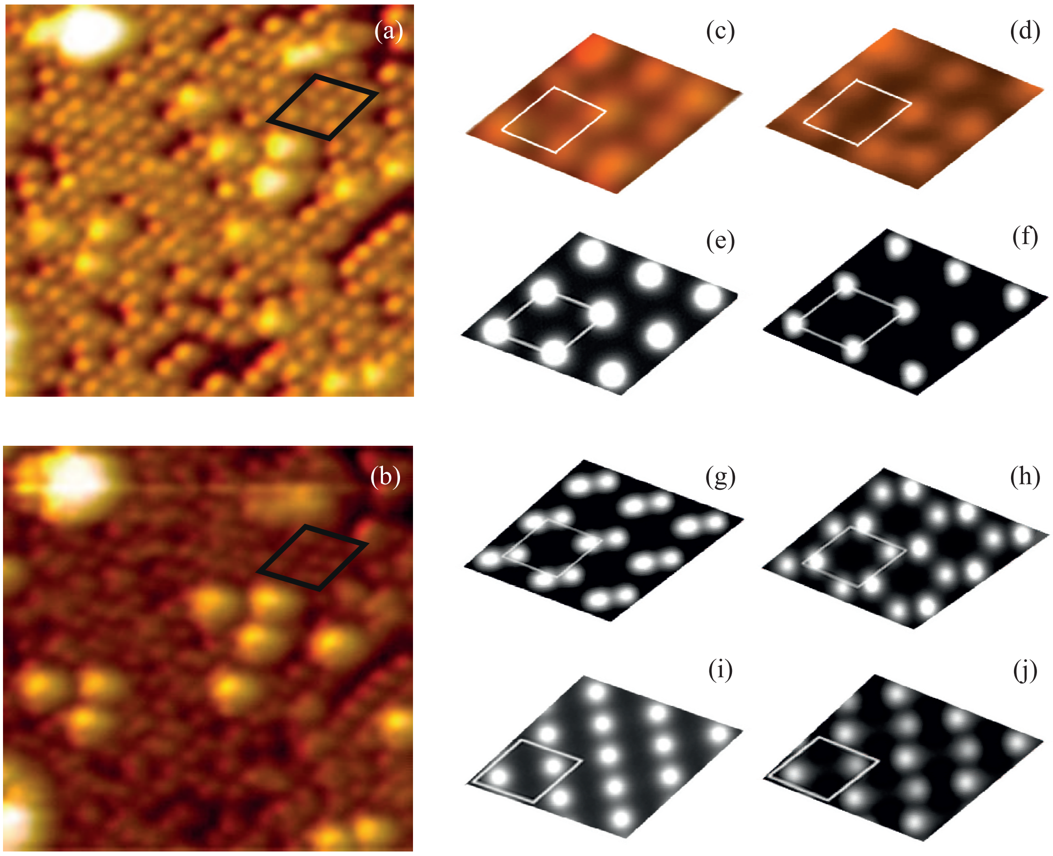


Рис. 4. (Цветной онлайн) СТМ изображения ($5 \times 5$ нм$^2$) поверхности Si(111)$2 \times 2$-(Bi,Mg), полученные при напряжении $-1.4$ В (a) и $+1.4$ В (b). Сравнение (c), (d) экспериментального и смоделированного изображений поверхности $2 \times 2$ для конфигураций типа (e), (f) “2–4”, (g), (h) “3–4” и (i), (j) “3–5” для напряжений $-1.4$ В (заполненные состояния) и $+1.4$ В (незаполненные состояния), соответственно. Черной линией на (a) и (b) показаны участки поверхности, взятые для сравнения с расчетными картинами (e)–(j), где белой линией выделена ячейка $2 \times 2$

на первый взгляд имеют более сложную структуру, что связано с тем, что данная поверхность имеет большое количество дефектов: это островки из групп атомов и вакансии атомной решетки, – которые возникают в процессе формирования двумерной решетки, когда атомы висмута и магния конкурируют между собой при взаимодействии с кремнием. Тем не менее, картина ДМЭ от такой поверхности имеет четкую периодичность $2 \times 2$. На увеличенном изображении на рис. 4c, d видно, что поверхность содержит области с реконструкцией с периодичностью $2 \times 2$, ячейка которой выделена белым цветом. Можно отметить, что на одну ячейку приходится один максимум интенсивности округлой формы. На рисунке 4e и рис. 4f представлены расчетные картины СТМ для структуры с конфигурацией “2–4” при тех же напряжениях ($+1.4$ В и $-1.4$ В, соответственно). Видно, что расчетная картина явно соответствует экспериментальной. В обоих случаях наблюдается один максимум интенсивности округлой формы на ячейку, находящийся в одном и том же месте при изменении приложенного напряжения. На рисунке 4g, h и i, j представлены расчетные картины поверхности с конфигурациями “3–4” и “3–5”, соответственно. Эти модели имеют признаки, которые позволили бы довольно четко отличить их на экспериментальных картинах СТМ (рис. 4a и b). Анализ данных изображений показал, что на поверхности образца: а) нет сдвоенных либо вытянутых максимумов интенсивности (что могло бы быть однозначным признаком в модели “3–4”); б) нет одномерных цепочек из атомов (что могло бы быть признаком модели “3–5”); в) все видимые максимумы интенсивности имеют округлый характер, и из них строится периодичность $2{\times}2$, которая, однако, из-за высокой дефектности поверхности имеет искажения, из-за которых трудно найти на поверхности достаточно протяженный участок, где электронные оболочки атомов могли бы построить хорошо упорядоченную конфигурацию. В конечном итоге при определенной концентрации элементов (2 атома (0.5 МС) висмута и 4 атома (1 МС) магния на ячейку $2 \times 2$) и температуре подложки, близкой к КТ, формируется упорядоченный двумерный сплав висмута и магния в виде двумерной решетки, стехиометрический состав которого соответствует $Bi_2Mg_4$.

**4. Заключение.** В данной работе методом расчета из первых принципов были проведены исследования атомной структуры поверхностной реконструкции Si(111)$2 \times 2$-(Bi,Mg). Было выявлено несколько моделей ячейки $2 \times 2$ с наименьшим значением энергии формирования, из которых модель с элементным составом $Bi_X Mg_Y$ с конфигурациями $X$ и $Y$ типа: $X = 2$, $Y = 4$ (конфигурация "2–4") – наиболее близко соответствует экспериментальным СТМ-изображениям данной структуры. Таким образом, количество атомов металла (степень покрытия) в поверхностной реконструкции Si(111)$2 \times 2$-(Bi,Mg) было установлено следующим: 2 атома (0.5 МС) висмута и 4 атома (1 МС) магния – что согласуется с фазовой диаграммой для двумерной системы (Bi,Mg)/Si(111), полученной из наблюдений картин ДМЭ.

**Финансирование работы.** Данная работа финансировалась за счет средств бюджета института (в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации FWFW-2021-0002). Никаких дополнительных грантов на проведение или руководство данным конкретным исследованием получено не было.

Результаты получены с использованием оборудования Центра коллективного пользования "Дальневосточный вычислительный ресурс" Института автоматики и процессов управления Дальневосточного отделения Российской академии наук (https://www.cc.dvo.ru).

**Конфликт интересов.** Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

1. T. Zhang, P. Cheng, W.-J. Li, Y.-J. Sun, G. Wang, X.-G. Zhu, K. He, L. Wang, X. Ma, X. Chen, Y. Wang, Y. Liu, H.-Q. Lin, J.-F. Jia, and Q.-K. Xue, Nature Phys. **6**(2), 104 (2010).
2. Y. Hasegawa, Nature Phys. **6**(2), 80 (2010).
3. F. Ming, X. Wu, C. Chen, K.D. Wang, P. Mai, T.A. Maier, J. Strockoz, J. Venderbos, C. González, J. Ortega, S. Johnston, and H. Weitering, Nature Phys. **19**(4), 500 (2023).
4. Q.-Q. Yang, R.-T. Liu, C. Huang, Y.-F. Huang, L.-F. Gao, B. Sun, Z.-P. Huang, L. Zhang, C.-X. Hu, Z.-Q. Zhang, C.-L. Sun, Q. Wang, Y.-L. Tang, and H.-L. Zhang, Nanoscale **10**(45), 21106 (2018).
5. S. Hasegawa, Appl. Phys. Express **17**(5), 050101 (2024).
6. K. Sakamoto, T. Kobayashi, K. Yaji, T. Shishidou, and M. Donath, Progress in Surface Science **97**(3), 100665 (2022).
7. T. Oguchi and T. Shishidou, J. Phys. Condens. Matter **21**(9), 092001 (2009).
8. S. Wirth and F. Steglich, Nat. Rev. Mater. **1**(10), 1 (2016).
9. W. Li, X. Qian, and J. Li, Nat. Rev. Mater. **6**(9), 829 (2021).
10. S.-Y. Yang, K. Chang, and S. S. Parkin, Physical Review Research **2**(2), 022029 (2020).
11. T. Zhou, J. Zhang, H. Jiang, I. Žutić, and Z. Yang, npj Quantum Mater. **3**(1), 39 (2018).
12. G.-Y. Guo, J. Magn. Magn. Mater. **563**, 169949 (2022).
13. F. Schindler, Z. Wang, M.G. Vergniory, A.M. Cook, A. Murani, S. Sengupta, A.Y. Kasumov, R. Deblock, S. Jeon, I. Drozdov, H. Bouchiat, S. Gueron, A. Yazdani, B.A. Bernevig, and T. Neupert, Nature Phys. **14**(9), 918 (2018).
14. T. Hirahara, K. Miyamoto, I. Matsuda, T. Kadono, A. Kimura, T. Nagao, G. Bihlmayer, E. Chulkov, S. Qiao, K. Shimada, H. Hamatame, M. Taniguchi, and S. Hasegawa, Phys. Rev. B **76**(15), 153305 (2007).
15. A. Tupchaya, L. Bondarenko, Y. Vekovshinin, A. Yakovlev, A. Mihalyuk, D. Gruznev, C. Hsing, C. Wei, A. Zotov, and A. Saranin, Phys. Rev. B **101** (23), 235444 (2020).
16. A. Tupchaya, L. Bondarenko, A. Yakovlev, Y. Vekovshinin, A. Mihalyuk, D. Gruznev, N. Denisov, A. Matetskiy, A.Y. Aladyshkin, A. Zotov, and A. Saranin, Applied Surface Science **589**, 152951 (2022).
17. M. Ryzhkova and D.A. Tsukanov, St. Petersburg Polytechnic University Journal: Physics and Mathematics **15**(S3.1), 107 (2022).
18. S. Terakawa, S. Hatta, H. Okuyama, and T. Aruga, Phys. Rev. B **105**(12), 125402 (2022).
19. T. Kuzumaki, T. Shirasawa, S. Mizuno, N. Ueno, H. Tochihara, and K. Sakamoto, Surf. Sci. **604**(11–12), 1044 (2010).
20. A. Saranin, A. Zotov, V. Lifshits, M. Katayama, and K. Oura, Surf. Sci. **426**(3), 298 (1999).
21. A. Jain, S.P. Ong, G. Hautier, W. Chen, W.D. Richards, S. Dacek, S. Cholia, D. Gunter, D. Skinner, G. Ceder, and K.A. Persson, APL Mater. **1**(1), 011002 (2013).
22. G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B **47**(1), 558 (1993).
23. G. Kresse and J. Furthmüller, Phys. Rev. B **54**(16), 11169 (1996).
24. J.P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. **77**(18), 3865 (1996).
25. K. Oura, V. Lifshits, A. Saranin, A. Zotov, and M. Katayama, *Surface Science: An Introduction*, Advanced Texts in Physics, Springer Berlin Heidelberg (2013).