

**ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ОБЪЕМА И ПОВЕРХНОСТИ ИНТЕРМЕТАЛЛИЧЕСКИХ
СОЕДИНЕНИЙ GdY_2Si_2 ($Y = Cu, Ag, Au$)**

А.Ю. Вязовская

Научный руководитель: доцент, к.ф.-м.н. В.М. Кузнецов

Национальный Исследовательский Томский Государственный Университет

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050

E-mail: alex_vyaz93@mail.ru

BULK AND SURFACE ELECTRONIC STRUCTURE OF THE GdY_2Si_2 COMPOUNDS

($Y = Cu, Ag, Au$)

A.Yu. Vyazovskaya

Scientific Supervisor: Associate Prof., Ph.D. V.M. Kuznetsov

Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin avn., 36, 634050

E-mail: alex_vyaz93@mail.ru

***Abstract.** The results of ab initio study of the bulk and surface electronic structure of the GdY_2Si_2 compounds ($Y = Cu, Ag, Au$) are presented in this work. Our electronic band structure calculations have shown that the silicon-terminated surface of GdY_2Si_2 bears two distinct two-dimensional electron states, one being a Shockley surface state, and the other – a surface resonance. We demonstrate that the appearance of the surface resonance state is caused by a layered crystal structure of the GdY_2Si_2 compounds.*

Введение. На протяжении многих лет интерметаллиды REY_2X_2 , сочетающие в себе благородный и переходный (либо редкоземельный) элементы (Y и RE соответственно), являются платформой для наблюдения таких свойств, как флуктуации валентности, сверхпроводимость, а также квантовое критическое поведение и эффект Кондо [1, 2]. Примерами таких соединений являются REY_2X_2 ($X = Si, Ge$). На настоящий момент проведено большое число исследований магнетизма систем REY_2X_2 , где RE – это редкоземельный элемент, Y – переходный 3d, 4d, 5d или благородный металл, а X – как правило, Si либо Ge (редко – Sn), однако электронная структура их поверхности слабо изучена. Имеющиеся фотоэмиссионные данные свидетельствуют о том, что электронный спектр кремниевой поверхности содержит как Шоклиевские состояния типа «оборванная связь», располагающиеся в локальной щели в окрестности точки \bar{M} , так и резонансные состояния с линейной дисперсией в точке $\bar{\Gamma}$, как известно на примере $EuRh_2Si_2$ и $GdRh_2Si_2$ [3, 4]. Ожидается, что спиновое расщепление исследуемых состояний на поверхностях REY_2X_2 будет зависеть от компонент соединения: как от RE -, так и от Y -подрешетки. Следовательно, спин-орбитальное и обменное расщепление поверхностных состояний могут изменяться от практически чисто обменного или спин-орбитального расщеплений (СОР) до их комбинации за счет изменения компонентного состава REY_2X_2 . Практический интерес представляет комбинация обменного и спин-орбитального расщеплений. Считается, что интерфейсные состояния такого типа играют важную роль в процессе переключения намагниченности, индуцируемом электрическим током в гетероструктурах ферромагнетик/тяжелый металл, которые могут быть использованы в качестве магнитных записывающих сред.

Целью настоящей работы является первопринципное исследование влияния на поверхностную электронную структуру соединений REY_2Si_2 спин-орбитальных эффектов. Соединение, демонстрирующее наиболее сильное спин-орбитальное взаимодействие, выбирается в качестве базового. Для исследования спин-орбитальных эффектов рассматриваются антиферромагнетики IV-го типа GdY_2Si_2 ($Y = Cu, Ag, Au$), с акцентом на исследование поверхностной электронной структуры $GdAu_2Si_2$ (в особенности – резонансного состояния в точке $\bar{\Gamma}$), что обусловлено наличием у Au, как у более тяжелого элемента, большего спин-орбитального взаимодействия (COB), чем у Ag и Cu.

Метод исследования. Расчеты проводились в рамках метода проекционных плоских волн, имплементированного в коде VASP [5, 6]. Для учета обменно-корреляционных эффектов использовалось обобщенное градиентное приближение в форме Пердью-Бурка-Эрнзерхофа. В гамильтониан были включены скалярно-релятивистские поправки, а спин-орбитальное взаимодействие учитывалось по методу второй вариации. При расчетах использовались асимметричные пленки, терминированные либо слоем Si, либо Gd, так как известно, что при сколе объемного кристалла GdY_2Si_2 образуются поверхности этих типов [3, 4].

Результаты. Анализ результатов расчета электронной структуры поверхности $GdAu_2Si_2$, в котором f -электроны Gd включены в число валентных, показал, что обменное расщепление в обсуждаемых состояниях отсутствует. Это позволяет не учитывать антиферромагнитное упорядочение рассматриваемых соединений и при дальнейших расчетах перейти к рассмотрению парамагнитного случая, включив f -электроны Gd в атомный остов. На рисунке 1 приведена электронная структура поверхности $GdAu_2Si_2$, рассчитанная вдоль симметричных направлений $-\bar{X} \rightarrow \bar{\Gamma} \rightarrow \bar{X}$ двумерной зоны Бриллюэна для пленки толщиной в 32 атомных слоя с учетом COB. Для выделения интересующих состояний из множества зон пленочного спектра отображается спиновая текстура зон, для которых разрешенные по k -вектору плотности электронных состояний (ПЭС), проектированные в сферы Вигнера-Зейтца, максимальны на втором атомном слое золота Si-терминированной поверхности. В изображенном интервале энергии видны две зоны с высокой ПЭС – электронная и дырочная – приходящие в точку $\bar{\Gamma}$ при энергиях -1.8 и -1.4 эВ, соответственно, и расщепленные по типу Бычкова-Рашбы. Заметим, что константа Бычкова-Рашбы α_R в данном случае не является хорошо определенной величиной. Действительно, расчеты, проведенные в отсутствие COB, свидетельствуют о вырождении данных зон в точке $\bar{\Gamma}$, которое снимается при введении COB, т.е. возникает собственное СОР величиной около 0.38 эВ. Последнее приводит к так называемой инвертации зон в окрестности точки $\bar{\Gamma}$, где верхняя зона меняет поведение с электронного на дырочное, что затрудняет определение констант для обеих зон, испытывающих СОР. Анализ орбитального состава показал, что Au $5d_{yz}(5d_{xz})$ -орбитали α_R вносят основной вклад в электронные (дырочные) зоны, за исключением окрестности точки $\bar{\Gamma}$, представленной преимущественно $5d_{xz}(5d_{yz})$ -орбиталями.

Слои атомов Si, располагающиеся над и под слоем Au, также дают значительный вклад в указанные состояния вследствие p - d -гибридизации. Интересно, что дисперсия рассматриваемых состояний фактически оформляется уже при толщине пленки в 4 атомных слоя: в трехслойном блоке Si – Au – Si возникают СОР и инвертация зон, а добавление слоя атомов Gd приводит к расщеплению по типу Бычкова-Рашбы.

Выводы. Локализация электронной и дырочной зон в прослойке Si – Au – Si, чередующейся с

монослойными вставками Gd, объясняет их резонансный характер, наблюдаемый в экспериментах на схожих соединениях [3, 4]. Отметим также, что вблизи точки $\bar{\Gamma}$ дырочное состояние демонстрирует параболическую дисперсию, а при конечных k – линейную, вследствие чего в работе [2] для его обозначения использовался термин «конус Дирака». Поверхности GdY_2Si_2 ($Y = Cu, Ag$) демонстрируют схожее электронное строение, но с меньшим СОР. Таким образом, поверхность $GdAu_2Si_2$ демонстрирует необычное электронное строение и является кандидатом для изучения эффектов спин-орбиты и магнетизма.

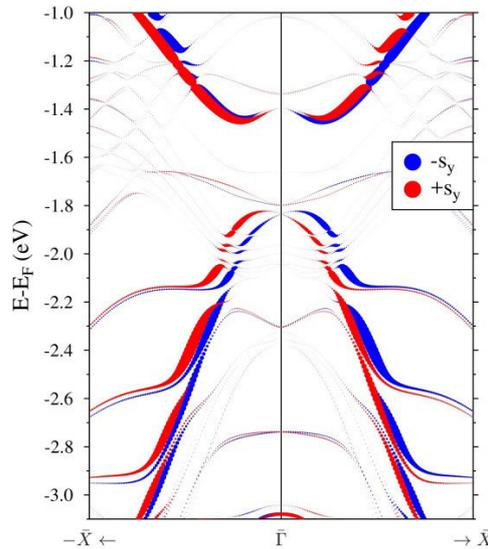


Рис. 1. Электронная структура поверхности $GdAu_2Si_2$, рассчитанная вдоль симметричных направлений $-\bar{X} \rightarrow \bar{\Gamma} \rightarrow \bar{X}$ двумерной зоны Бриллюэна для пленки толщиной в 32 атомных слоя с учетом СОВ

Работа выполнена под руководством к.ф.-м.н. М. М. Отрокова.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Steglich F. Superconductivity in the Presence of Strong Pauli Paramagnetism: $CeCu_2Si_2$ / F. Steglich, J. Aarts, C. D. Bredl et al. // Phys. Rev. Lett. – 1979. – V. 43. – № 25. – P. 1892–1896.
2. Trovarelli O. YbRh₂Si₂: Pronounced Non-Fermi-Liquid Effects above a Low-Lying Magnetic Phase Transition / O. Trovarelli, C. Geibel, S. Mederle et al. // Phys. Rev. Lett. – 2000. – V. 85. – № 3. – P. 626–629.
3. Chikina A. Strong ferromagnetism at the surface of an antiferromagnet caused by buried magnetic moments / A. Chikina, M. Höppner, S. Seiro et al. // Nature Communication. – 2014. – V. 5. – № 3171. – P. 1–5.
4. Güttler M. Robust and tunable itinerant ferromagnetism at the silicon surface of the antiferromagnet $GdRh_2Si_2$ / M. Güttler, A. Generalov, M. M. Otrokov et al. // Scientific Reports. – 2016 – V. 6. – P. 24254.
5. Kresse G. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set / G. Kresse, J. Furthmüller // Phys. Rev. B. – 1996. – V. 54. – № 16. – P. 11169–11186.
6. Kresse G. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method / G. Kresse, D. Joubert // Phys. Rev. B. – 1998. – V. 59. – № 3. – P. 1758–1775.