

УДК 538.915

**ОСОБЕННОСТИ ЗОННОЙ СТРУКТУРЫ И СПИНОВОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ В
ПОВЕРХНОСТНОМ СПЛАВЕ $\text{Ag}_2\text{-Sb}$ НА ПОВЕРХНОСТИ $\text{Ag}(4\ 2\ 3)$** Д.В. Терентьева

Научный руководитель: к.ф.-м.н., Л.А. Святкин

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г.Томск, пр. Ленина, 30, 634050

E-mail: dvt17@tpu.ru**FEATURES OF THE BAND STRUCTURE AND SPIN POLARIZATION IN $\text{Ag}_2\text{-Sb}$ SURFACE
ALLOY ON $\text{Ag}(4\ 2\ 3)$ SURFACE**D.V. Terentyeva

Scientific Supervisor: Ph.D., L.A. Svyatkin

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: dvt17@tpu.ru

Abstract. *The first-principle calculations have been performed to investigate surface electron states of the surface alloys $\text{SbAg}_2(1\ 1\ 1)$ and $\text{SbAg}_2(4\ 2\ 3)$. Orbital decomposition p_x , p_y and spin texture are presented for both systems. The weak spin splitting was revealed for both systems. It is established the presence of the potential well along the step direction of $\text{SbAg}_2(4\ 2\ 3)$ system. The strong diffusion of surface electron p_x and p_y states is established for the $\text{SbAg}_2(4\ 2\ 3)$ system. It is noticed spin rotating effect for the $\text{SbAg}_2(1\ 1\ 1)$ system, however for the $\text{SbAg}_2(4\ 2\ 3)$ system s_x , s_y spin projections along both step and terrace directions are occurred.*

Введение. На данный момент развивается такое актуальное направление, как спинтроника, согласно которой исследуется взаимное влияние зарядовых и спиновых степеней свободы. Согласно данному направлению, поскольку основной идеей является использование спина как переносчика информации, то соответственно одному направлению спина соответствует 1 бит информации. Эта концепция приводит к созданию спиновых устройств, которые уже имеют ряд преимуществ по сравнению с электронными [1]. Целью данной работы является выявление особенностей влияния вицанальности поверхности на энергетические спектры поверхностного сплава SbAg_2 на поверхности $\text{Ag}(4\ 2\ 3)$.

Метод и детали расчета. В работе расчеты производились в рамках теории функционала электронной плотности с использованием обобщенно-градиентного приближения методом проекционно-присоединенных плоских волн, реализованным в пакете программ VASP, с обменно-корреляционным потенциалом GGA – PBE. Для рассмотрения поверхностного сплава SbAg_2 , были смоделированы элементарные ячейки: сингулярная $(1\ 1\ 1)$, состоящая из 84 атомов со структурой $(\sqrt{3}\times\sqrt{3})R30^\circ$ (на поверхности находится 1 атом сурьмы) (рис. 1 а), сингулярная поверхность $(1\ 1\ 1)$, состоящая из 168 атомов (рис. 1 б), вицанальная $(4\ 2\ 3)$, состоящая из 182 атомов (рис. 1 в). На каждой итерации самосогласования собственные значения гамильтониана рассчитывались по сетке k -точек $5\times 5\times 1$ для ячейки из 84 и $3\times 5\times 1$ для ячеек из 168 и 182 атомов, соответственно, во всей зоне Бриллюэна. Критерий сходимости по энергии взят равным 10^{-5} эВ. Процедуры оптимизации параметров решетки и релаксации

атомной структуры систем с гладкими и вицеляльными поверхностями $SbAg_2$ проводились с использованием алгоритма сопряженного градиента [2]. Учет релятивистских поправок в Гамильтониан за счет спин-орбитального взаимодействия ведется согласно алгоритму [3]. Учет релятивистских поправок в Гамильтониан за счет спин-орбитального взаимодействия согласно методу оптимизированных проекционных локализованных орбиталей [4].

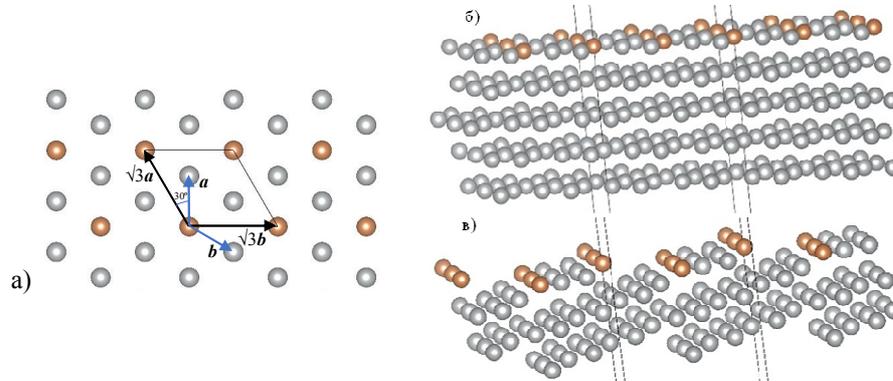


Рис. 1. Элементарная ячейка $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ структуры поверхностного сплава $SbAg_2$ (а). Вид сингулярной поверхности $(1\ 1\ 1)$ (б) и вицеляльной поверхности $(4\ 2\ 3)$ (в). Оранжевым обозначены атомы сурьмы, серым – серебра. Границы расчетных ячеек обозначены прямыми линиями

Результаты и обсуждение. В работе были построены энергетические спектры, включающие в себя информацию об орбитальном дихроизме, рассчитывающийся по формуле:

$$D = \frac{p_x - p_y}{p_x + p_y}, \quad (1)$$

где p_x и p_y – вклады p состояний Sb, ориентированных по направлениям перпендикулярно (Ox) и вдоль (Oy) ступени, соответственно. Для оценки вклада преобладающего состояния можно судить только о числителе: при $p_x - p_y > 0$ имеем преобладающий вклад p_x состояний, а при $p_x - p_y < 0$ – преимущественно вклад p_y состояний.

На рис. 2 представлена информация об орбитальном составе и спиновой текстуре для гладкой $(1\ 1\ 1)$ поверхности и вицеляльной $(4\ 2\ 3)$ поверхности (рис. 2). В обозначениях для орбитального дихроизма: синим цветом отмечен вклад преимущественно p_x состояния, красным – p_y . В случае спиновой текстуры, синему цвету соответствуют ориентации проекции спина вдоль рассматриваемой оси, красному – против.

Отследим влияние вицеляльности на энергетический спектр с учетом орбитального дихроизма (рис. 2 а и б). Во-первых, исчезла восходящая ветвь p_y состояния. Во-вторых, наблюдается смещение состояний по энергии. Тем самым, если для гладкой поверхности в точке $\bar{\Gamma}$ наблюдались вырожденные состояния при $-0,6$ эВ и $0,4$ эВ, то для вицеляльной в этих точках состояния p_x и p_y сильно размыты. Относительно точки $\bar{\Gamma}$ при $\sim 0,6$ эВ, продвигаясь вдоль $\bar{\Gamma Y}$, наблюдаются разрывы p_x состояний. В-третьих, наблюдается разрыв зоны p_y состояния, ранее выходящей из точки $\bar{\Gamma}$ при $0,4$ эВ, на две зоны, слабо зависящие от волнового числа: красные точки вдоль направления $\bar{\Gamma X}$ на уровне Ферми и при $-1,2$ эВ.

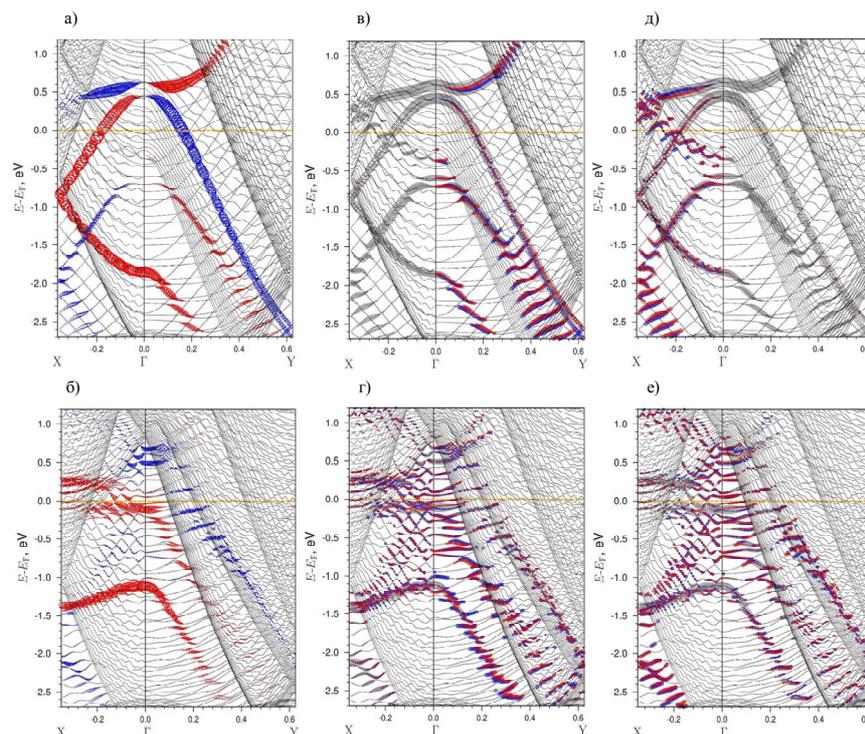


Рис. 2. Дихроизм D поверхностного срава $SbAg_2/Ag$ (1 1 1) (а) и (4 2 3) (б). Спиновая текстура с проекцией спина электронов на ось Ox для (1 1 1) (в) и (4 2 3) (г), на ось Oy для (1 1 1) (д) и (4 2 3) (е)

Для поверхности (1 1 1) наблюдается закручивание спина (рис. 2 в и д). Из рис. 2 г и е видно, что проекции спина на оси Ox и Oy присутствуют в сразу в двух направлениях, а расщепление по спину в данном поверхностном сплаве поверхностями (1 1 1) и (4 2 3) является незначительным.

Заключение. Были исследованы поверхностные электронные состояния поверхностных сплавов $SbAg_2/Ag(1\ 1\ 1)$ и $SbAg_2/Ag(4\ 2\ 3)$. Установлено, что вдоль направления параллельного ступени наблюдается сильное размытие электронных состояний p_x и p_y . Вдоль направления перпендикулярного ступени наблюдается эффект влияния изменения потенциала на поверхности в виде чередующихся ступеней. Стоит отметить, что расщепление по спину в данном поверхностном сплаве с пилообразной поверхностью (4 2 3) является незначительным, также как и в случае гладкой поверхности (1 1 1). Для поверхности (1 1 1) наблюдается эффект закручивания спина, для виценальной (4 2 3) наблюдаются вклады проекций спина s_x и s_y вдоль обоих направлений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Аплеснин С.С. Основы спинтроники: Учебное пособие. Изд. «Лань». – 2010. – С. 288
2. Press W.H., Flannery B.P., Teukolsky S.A., Vetterling W.T. Numerical Recipes. – Cambridge University Press. – New York. – 1986. – P. 1262
3. Steiner S., Khmelevskiy S., Marsman M., Kresse G. Calculation of the magnetic anisotropy with projected-augmented-wave methodology and the case study of disordered $Fe_{1-x}Co_x$ alloys // Phys. Rev. B. – 2016. – Vol. 93. – P. 224425
4. Schüler M., Peil O.E., Kraberger G.J., Pordzik R., Marsman M., Kresse G., Wehling T.O., Aichhorn M.J. Charge self-consistent many-body corrections using optimized projected localized orbitals // Phys.: Condens. Matter. – 2018. – Vol. 30. – P. 475901