

УДК 538.915

**ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ПОВЕРХНОСТНОГО СПЛАВА Ag₂-Pb НА ПОВЕРХНОСТЯХ
(111) И (423) СЕРЕБРА**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**BAND STRUCTURE IN Ag₂-Pb SURFACE ALLOY ON (111) AND (423) SILVER SURFACES**D.V. Terenteva

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 PbAg₂(111) and PbAg₂(423). Orbital decomposition p_x , p_y and spin texture are presented for both systems. The weak spin splitting was revealed for both systems. The presence of the step potential and high spin orbital coupling lead to the strong diffusion of surface electron p_x and p_y states for the PbAg₂(423) system. It is noticed spin rotating effect for the PbAg₂(111) system, however for the PbAg₂(423) system s_x and s_y spin projections along directions both parallel and perpendicular step are occurred.*

Введение. В настоящее время одним из вариантов увеличения быстродействия вычислительных систем является использование новой концепции, в основе которой может использоваться не только заряд, но и спин в качестве переносчика информации. Для этого необходима разработка материалов, электронные состояния которых могут быть разделены по спину. Иначе говоря, необходимы материалы с существенным спин-орбитальным расщеплением (СОР). К таким материалам относятся поверхностные сплавы с осажденными атомами тяжелых элементов, например, висмута [1] или свинца [2] на поверхностный слой серебра. За счет создания дополнительного потенциала, создаваемого ступенчатой формой поверхности, есть возможность получать уникальные электронные состояния. Целью данной работы является выявление особенностей влияния вицинальности поверхности (423) на энергетические спектры поверхностного сплава PbAg₂ на поверхности серебра.

Экспериментальная часть. Все расчеты в данной работе были выполнены в рамках теории функционала электронной плотности методом проекционно-присоединенных волн, реализованным в пакете программ VASP. Обменно-корреляционный потенциал рассматривался с использованием обобщенно-градиентного приближения в форме, предложенной Пердью-Бурке-Эрнцнерхофом [3]. Энергия обрезания плоских волн выбиралась равной 250 эВ. На каждой итерации самосогласования собственные значения гамильтониана рассчитывались по сетке k -точек ($5 \times 5 \times 1$) для структуры $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ и ($3 \times 5 \times 1$) для гладкой поверхности со структурой $(2\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ и вицинальной поверхности во всей зоне Бриллюэна.

Для изучения электронных состояний поверхностного сплава PbAg_2 , были рассмотрены ячейки гладкой поверхности (111) со структурой $(\sqrt{3}\times\sqrt{3})R30^\circ$, гладкой поверхности со структурой $(2\sqrt{3}\times\sqrt{3})R30^\circ$, вицинальной поверхности (423). Гладкие поверхности моделировались пленкой из 21 слоя. Толщина этих пленок составила ~ 65 Å, толщина вакуумного слоя – ~ 12 Å. Вицинальная поверхность (423) была представлена ассиметричной 28-ми слойной пленкой толщиной ~ 70 Å и толщиной вакуумного слоя ~ 12 Å. В поверхностном слое этой пленки находилось 5 атомов серебра и 2 атома адсорбата Pb. Атомы адсорбата располагались таким образом, что один из них лежал на террасе, а другой на ступени.

Результаты. На рисунке 1 представлены электронные энергетические спектры поверхностных сплавов гладкой поверхности со структурой $(2\sqrt{3}\times\sqrt{3})R30^\circ$ и вицинальной поверхности (423). В спектре структуры гладкой поверхности наблюдается шесть поверхностных зон (отмечены символами α , β , γ на рисунке 1), образованных за счет гибридизации p состояний свинца и s состояний серебра. Эти состояния достаточно сильно расщепляются по спину за счет наличия сильного градиента ядерного потенциала (константа Рашбы сплава $\text{Ag}_2\text{Pb}/\text{Ag}(111)$ составляет $\alpha_R = 1,52$ эВ·Å [4]).

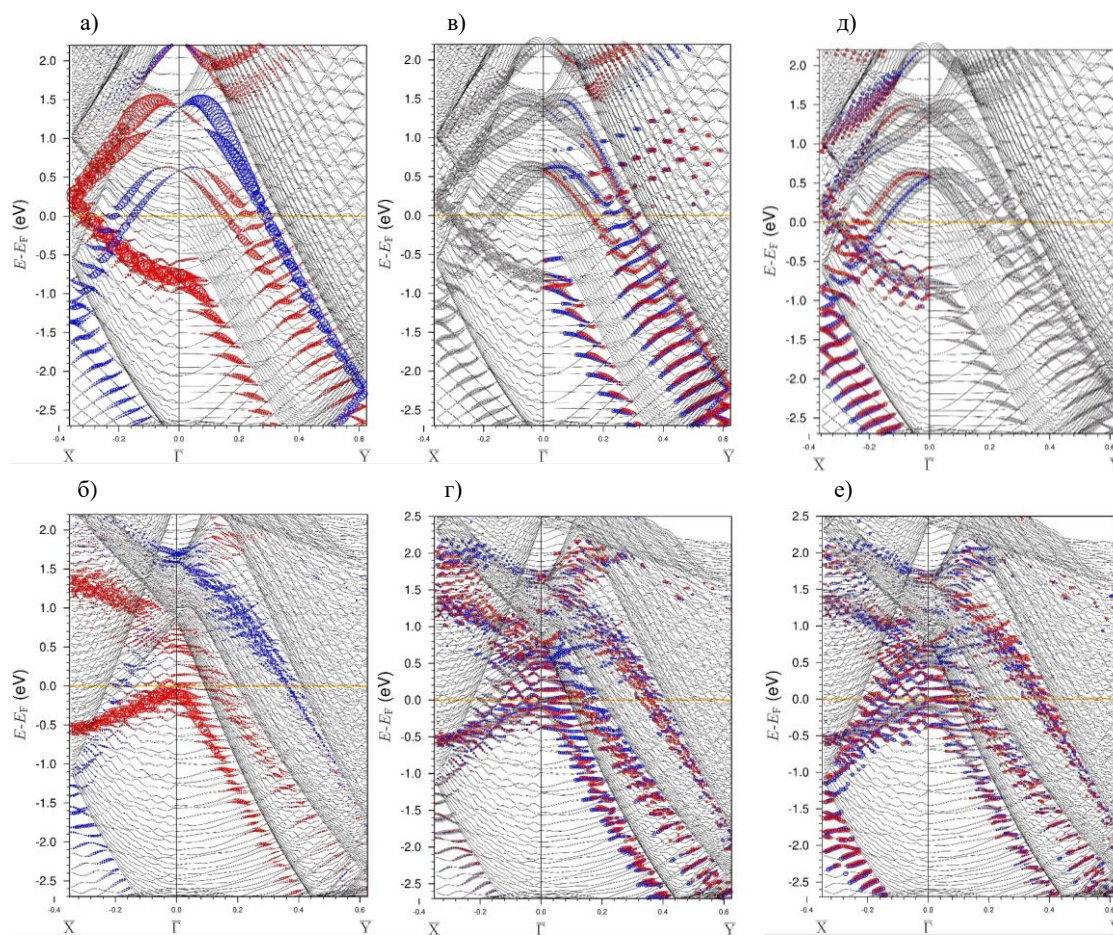


Рис. 1. Электронный энергетический спектр поверхностных сплавов PbAg_2 гладкой поверхности со структурой $(2\sqrt{3}\times\sqrt{3})R30^\circ$ (а, в, д) и вицинальной поверхности (423) (б, г, е). На панелях а, б синим цветом отмечены поверхностные состояния с преимущественным вкладом p_x орбиталей, красным – p_y орбиталей. На панелях в, г (д, е) синим и красным цветами показаны состояния с положительной и отрицательной проекцией спина на ось x (ось y) соответственно

Из рисунка 1 видно, что зоны α и β являются частично занятыми, вырождаются в точке $\bar{\Gamma}$ при энергиях 0,5 эВ и 1,4 эВ и пересекают уровень Ферми при $k = \pm 0,1 \text{ \AA}^{-1}$ и $k = \pm 0,3 \text{ \AA}^{-1}$ соответственно. Орбитальный состав пары зон α изменяется при значении $k = \pm 0,1 \text{ \AA}^{-1}$ в вершинах парабол. Вдоль направления $\bar{\Gamma}\bar{X}$ распространяются Зоны принимают преимущественно p_x ориентацию вдоль направления $\bar{\Gamma}\bar{X}$ и преимущественно p_y – вдоль $\bar{\Gamma}\bar{Y}$. Аналогичная ситуация наблюдается для зон β , где при $k = \pm 0,1 \text{ \AA}^{-1}$ изменяется орбитальный состав зон, однако это изменение происходит уже не в вершинах парабол. Стоит отметить, что ветви парабол одной пары зон с одинаковым орбитальным составом, начиная от $k = \pm 0,24 \text{ \AA}^{-1}$ и выше, начинают перемешиваться друг с другом. А p_x орбитали α зоны и p_y орбитали β зоны не перемешиваются. Пара зон γ находится полностью в незанятой части спектра. В окрестности точки $\bar{\Gamma}$ она двухкратно вырождена. При $k = 0,1 \text{ \AA}^{-1}$ состояние p_y орбитали расщепляется на две ветви восходящих парабол, а при $k = -0,2 \text{ \AA}^{-1}$ поверхностное состояние обрывается.

Вицинальность достаточно сильно влияет на энергетический спектр. Во-первых, наблюдается смещение зон в точке $\bar{\Gamma}$ по энергиям. Во-вторых, вдоль направления $\bar{\Gamma}\bar{X}$ наблюдается две ветви зоны p_y орбитали. Первая находится полностью в занятой части спектра вблизи уровня Ферми, пересекая точку $\bar{\Gamma}$ при энергии -0,1 эВ. Эта ветка практически линейно распространяется вдоль направления $\bar{\Gamma}\bar{X}$, касаясь точки \bar{X} при энергии -0,5 эВ. Вторая ветвь находится в незанятой части спектра, и также практически линейно распространяется вдоль направления $\bar{\Gamma}\bar{X}$, касаясь точки $\bar{\Gamma}$ и \bar{X} при энергиях 0,5 эВ и 1,3 эВ соответственно. На p_x орбитали вицинальность не оказывает практически никакого влияния. В-третьих, электронные состояния становятся более диффузными.

Заключение. Были исследованы поверхностные электронные состояния поверхностных сплавов $\text{PbAg}_2/\text{Ag}(111)$ и $\text{PbAg}_2/\text{Ag}(423)$. Установлено, что вдоль направления параллельного ступени наблюдается размытие электронных орбиталей p_x и p_y . Вдоль направления террасы наблюдается образование двух практически бездисперсных p_y -состояний вдоль направления $\bar{\Gamma}\bar{X}$. Причем захватывается только состояние p_y -ориентации, а для p_x -состояния дисперсия за счет вицинальности не изменяется. Для поверхности (111) наблюдается эффект закручивания спина, для вицинальной поверхности (423) спин электронов ориентирован сложным образом как в направлении перпендикулярно ступени, так и вдоль нее.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Gierz I., Stadtmüller B., Vuorinen J., Lindroos M., Meier F., Dil J.H., Kern K., Ast C.R. Structural influence on the Rashba-type spin splitting in surface alloys // Phys. Rev. B. – 2010. – Vol. 81. – P. 245430.
2. Pacilé D., Ast C.R., Papagno M., Silva C.Da, Moreschini L., Falub M., Ari P. Seitsonen, Grioni M. Electronic structure of an ordered Pb/Ag(111) surface alloy: Theory and experiment // Phys. Rev. B. – 2006. – Vol. 73 (24). – P. 245429.
3. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple // Phys. Rev. Lett. – 1996. – Vol. 77. – P. 3865-3868.
4. Gierz I., Meier F. Dil J.H. Kern K., Ast C.R. Tuning the spin texture in binary and ternary surface alloys on Ag(111) // Phys. Rev. B. – 2011. – Vol. 83. – P. 195122.