

УДК 538.915; 538.971; 538.975

DOI: 10.17223/00213411/64/8/65

*А.Ю. ВЯЗОВСКАЯ^{1,2}, В.М. КУЗНЕЦОВ¹***ВЛИЯНИЕ СПИН-ОРБИТАЛЬНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ ПОВЕРХНОСТИ GdX_2Si_2 ($X = Cu, Ag, Au$) ***

В рамках теории функционала электронной плотности было проведено исследование магнитной и электронной структуры соединений GdX_2Si_2 ($X = Cu, Ag, Au$) с акцентом на влияние спин-орбитальных эффектов на электронную структуру поверхности (001). Обнаружено, что рассматриваемые соединения демонстрируют внутрислойовой антиферромагнетизм, который, однако, не оказывает существенного воздействия на электронную структуру поверхности $GdX_2Si_2(001)$ вблизи уровня Ферми. Показано, что спин-орбитальное расщепление двумерных состояний на $GdX_2Si_2(001)$, характеризующееся комбинацией собственного спин-орбитального расщепления с расщеплением по типу Бычкова – Рашбы, возрастает по мере увеличения атомного номера благородного металла, входящего в состав интерметаллида. На основе анализа пространственной протяженности d -орбиталей и степени их взаимодействия с орбиталями кремния дано объяснение изменению силы спин-орбитального взаимодействия в соединениях с благородными металлами. Выявлено влияние заполнения d -оболочки на спин-орбитальное взаимодействие при сравнении интерметаллидов на основе редкоземельных и благородных металлов и изоструктурных интерметаллидов с переходными металлами.

Ключевые слова: электронная структура поверхности, спин-орбитальное взаимодействие, интерметаллиды, метод функционала электронной плотности.

Введение

В последнее время интенсивно исследуются соединения типа REX_2Si_2 , где RE – редкоземельный элемент, а X – переходный металл [1–7]. Кремниевая поверхность (001) этого класса соединений служит платформой для систематического исследования спин-орбитальных эффектов, в том числе эффекта Бычкова – Рашбы [8]. Особенностью указанных систем является возможность контроля силы спин-орбитального взаимодействия (СОВ) за счет изменения в пределах одной группы переходного элемента. Так, спин-орбитальные эффекты слабо выражены в соединениях с Co, в то время как в соединениях, в состав которых входит Ir, они выражены более существенно [6]. Электронная структура соединений $GdRh_2Si_2$ и $GdIr_2Si_2$ была детально исследована с помощью теоретических и экспериментальных методов [2, 4, 6]. На примере соединения $GdIr_2Si_2$ было показано [6], что его поверхностные состояния существенно модифицируются под действием спин-орбитального взаимодействия, что не свойственно родственным соединениям, демонстрирующим более слабое СОВ.

Интерес с точки зрения исследования влияния спин-орбитальных эффектов на электронную структуру представляет группа соединений GdX_2Si_2 , где X – благородные металлы (Cu, Ag, Au). Эти соединения обладают той же кристаллической структурой, что и рассмотренные выше интерметаллиды на основе редкоземельных и переходных элементов. Однако, в отличие от переходных металлов Rh и Ir, благородные металлы Cu, Ag и Au характеризуются полностью заполненной электронами валентной d -оболочкой. Сравнение электронной структуры соединений с переходными и благородными металлами позволит исследовать влияние заполнения d -оболочки на величину спин-орбитального взаимодействия в системе.

Цель настоящей работы – теоретическое исследование магнитной и электронной структуры соединений GdX_2Si_2 ($X = Cu, Ag, Au$) с последующим их сравнением с системами GdX_2Si_2 ($X = Rh, Ir$) с учетом влияния спин-орбитальных эффектов на электронную структуру поверхности (001).

Модель и применяемые методы

Исследование электронной структуры поверхности осуществлялось в рамках метода повторяющихся пленок. Толщина пленки составляла 32 атомных слоя. Расчеты проводились для двух случаев: с учетом СОВ и без его учета. Пленки были выбраны так, что их верхняя поверхность оканчивалась атомами редкоземельного элемента Gd, а нижняя – атомами Si. Выбор данных окончаний пленки обусловлен экспериментально установленным для ряда родственных соединений

* Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 19-32-90251. Исследования проведены с использованием оборудования ресурсного центра Научного парка СПбГУ «Вычислительный центр».

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>