

ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ НА ОСНОВЕ РЕДКОЗЕМЕЛЬНОГО  
ЭЛЕМЕНТА И ПЕРЕХОДНОГО ИЛИ БЛАГОРОДНОГО МЕТАЛЛАА. Ю. Вязовская

Научный руководитель: к. ф.-м. н. М.М. Отроков

Национальный исследовательский Томский государственный университет,

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

E-mail: [alex\\_vyaz93@mail.ru](mailto:alex_vyaz93@mail.ru)ELECTRONIC STRUCTURE OF INTERMETALLICS BASED ON A RARE EARTH ELEMENT AND  
A TRANSITION OR NOBLE METALA.Yu. Vyazovskaya

Scientific Supervisor: Ph.D. M.M. Otrokov

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

E-mail: [alex\\_vyaz93@mail.ru](mailto:alex_vyaz93@mail.ru)

**Abstract.** *The results of ab initio study of resonant surface states genesis in the vicinity of  $\bar{\Gamma}$  point for  $GdRh_2Si_2$  are presented in this work. Our electronic band structure calculations have shown that the resonant surface states are already formed in three atomic layer slab Si-Rh-Si. The states localization within three layer slab causes its resonant nature and presence of these states on Si- and Gd- termination surfaces.*

**Введение.** Интерметаллиды, сочетающие в себе редкоземельный и переходный (либо благородный) металлы, на протяжении многих лет являются платформой для наблюдения таких свойств, как сверхпроводимость и флуктуации валентности, а также эффекта Кондо или квантового критического поведения. Фотоэмиссионные исследования систем  $REY_2Si_2$ , где  $RE = Eu, Gd, Ho, Yb$  или  $U$ , а  $Y = Rh, Ru$  либо  $Co$ , позволили получить общую картину электронной структуры их Si-терминированной поверхности. Так, установлено, что электронный спектр кремниевой поверхности таких систем содержит как поверхностные состояния Шокли, располагающиеся в окрестности точки  $\bar{M}$ , так и резонансные состояния в точке  $\bar{\Gamma}$  [1, 2]. Механизм происхождения поверхностных состояний типа Шокли общеизвестен. Они возникают в локальной (фундаментальной) запрещенной щели металла (полупроводника) вследствие ее инвертированного характера. В случаях  $EuRh_2Si_2$ ,  $GdRh_2Si_2$  и  $HoRh_2Si_2$  поверхностное состояние Шокли в обратном пространстве находится в инвертированной щели в точке  $\bar{M}$ , а в прямом – локализуется в 4 - 5 поверхностных атомных слоях.

Отличием резонансных состояний, так же демонстрирующих высокую амплитуду вблизи поверхности, являются то, что они располагаются вне запрещенных щелей, вследствие чего они гибридизуются с объемными состояниями внутри кристалла. Их наличие не зависит от окончания поверхности, поскольку они наблюдаются как на Si, так и на Gd поверхностях.

В отличие от поверхностного состояния Шокли в точке  $\bar{M}$ , происхождение данного резонансного состояния в точке  $\bar{\Gamma}$  в соединениях типа  $REY_2Si_2$  ( $RE$  – редкоземельный элемент, редкоземельный элемент,  $Y$  – переходный либо благородный металл) не столь очевидно и механизм его формирования остается неисследованным. Таким образом, целью данной работы является теоретическое исследование

происхождения поверхностного резонансного состояния в точке  $\bar{\Gamma}$  в соединениях типа  $REY_2Si_2$ . Исследование проводилось на примере соединения  $GdRh_2Si_2$ .

**Методы исследования.** Первопринципные расчеты проводились в рамках метода проекционных плоских волн [3]. В расчетах для учета обменно-корреляционных эффектов использовалось обобщенное градиентное приближение [4]. В гамильтониан были включены скалярно-релятивистские поправки, а спин-орбитальное взаимодействие учитывалось по методу второй вариации [5].

**Результаты.** Для аккуратного описания сначала были рассмотрены электронные структуры Si- и Gd поверхностей (001)  $GdRh_2Si_2$ , рассчитанные для толстой 32-слойной как с учетом спин-орбитального и обменного взаимодействий, так и без их учета, показаны на рисунках 1 а и 1 б соответственно. Оранжевые символы на обеих панелях выделяют спектральные особенности, имеющие высокую плотность состояний на кремниевой поверхности – а именно поверхностное состояние Шокли в окрестности точки  $\bar{M}$  и резонансное состояние в точке  $\bar{\Gamma}$ . А зеленые символы – спектральные особенности, имеющие высокую плотность состояний на гадолиниевой поверхности, на которой, как видно, отсутствует состояние Шокли в точке  $\bar{M}$ .

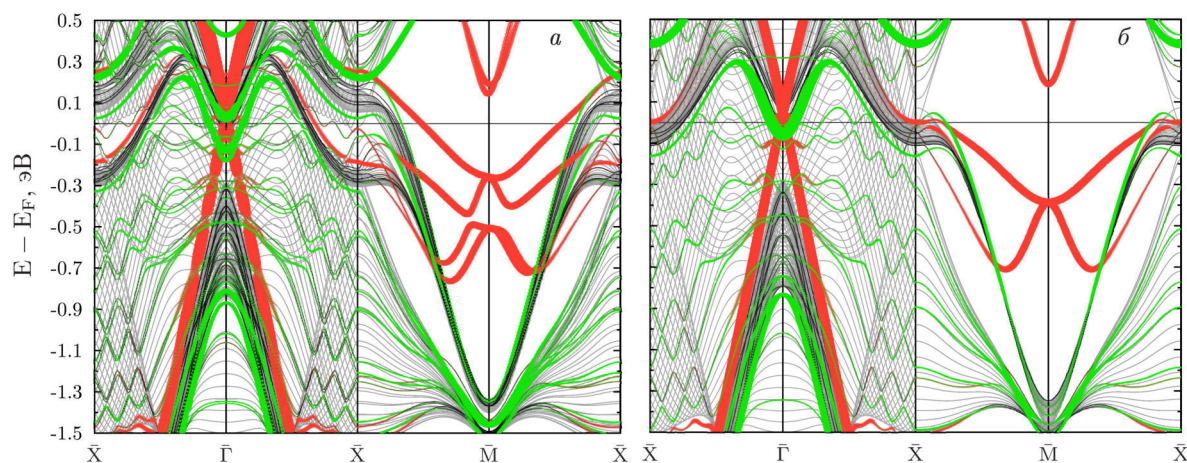


Рис. 1. Зонный спектр  $GdRh_2Si_2$  (001), рассчитанный для 32-слойной пленки а) с учетом спин-орбитального и обменного взаимодействий и б) без учета этих взаимодействий

Принципиальным отличием представленных на рисунке спектров друг от друга является сохранение вырождения зон пленки по спину на панели б, снятое во всех точках  $k$  (за исключением точек пересечения зон в окрестности точки  $\bar{M}$ ) на панели а. Указанное снятие вырождения происходит по причине формирования ферромагнитного состояния на кремниевой поверхности  $GdRh_2Si_2$ , действующего в комбинации с собственным спин-орбитальным расщеплением и расщеплением по типу Бычкова-Рашбы.

При исследовании вопроса о возникновении резонансного состояния в точке  $\bar{\Gamma}$  мы сосредоточимся на обсуждении зонной структуры системы без учета указанных взаимодействий, что не влияет на сделанные выводы, поскольку данные взаимодействия не являются фундаментальной причиной возникновения указанных состояний.

Для выяснения происхождения резонансного состояния в точке  $\bar{\Gamma}$  система  $GdRh_2Si_2$  были рассмотрены пленки различных толщин, для каждой из которых была проанализирована зонная

структура. Структурным блоком минимальной толщины для данного соединения является последовательность слоев Gd-Si-Rh-Si. Сначала трислой Si-Rh-Si был разложен на отдельные слои с целью проследить эволюцию электронной структуры такой системы при изменении межплоскостного расстояния: от ситуации, описывающей невзаимодействующие слои до равновесного расстояния в объемном материале. Такие расчеты показали, что имеющееся уже в свободностоящем слое родия дырочное состояние  $d_{xy}$  симметрии, в образованном трехслойнике может быть идентифицировано как состояние, которое в толстых пленках будет названо резонансным. Его энергия связи, однако, существенно отличается от той, что имеет место на поверхности  $\text{GdRh}_2\text{Si}_2$ . При переходе к толщине пленки в 4 атомных слоя дырочное состояние  $d_{xy}$  симметрии в точке  $\bar{\Gamma}$  опускается в валентную зону и оказывается полностью занятым.

Поскольку кристаллическая структура рассматриваемого соединения, по сути, представляет собой чередование Si-Rh-Si-прослоек с монослойными вставками Gd, то локализация электронной и дырочной зон в Si-Rh-Si объясняет их резонансный характер, наблюдаемый в экспериментах на схожих соединениях.

**Выводы.** В рамках расчетов из первых принципов было исследовано происхождения резонансных состояний в окрестности точки  $\bar{\Gamma}$  на примере соединения  $\text{GdRh}_2\text{Si}_2$ . Результаты расчетов показали, что имеющие сложный генезис состояния в точке  $\bar{\Gamma}$  начинают формироваться уже в 3-слойном блоке Si-Rh-Si. Поскольку структура  $\text{REY}_2\text{Si}_2$  представляет собой укладку атомных плоскостей ...-Gd-Si-X-Si-Gd-Si-X-Si-..., данные состояния, локализующиеся в каждом трислое, формируют континуум объемных состояний. При образовании поверхности происходит отделение локализующейся в поверхностном трислое квазидвумерной зоны от континуума объемных состояний, что обусловлено изгибом потенциала на поверхности. Данная зона приобретает резонансный характер вследствие гибридизации с объемными состояниями той же симметрии. Кроме того, локализация резонансных состояний в трислое Si-Rh-Si позволяет объяснить факт наличия данных состояний в электронном спектре поверхности независимо от окончания поверхности. Поскольку происхождение данных состояний не зависит ни от спин-орбитального взаимодействия ни от эффектов магнетизма, их генезис является общим для широкого класса соединений  $\text{REY}_2\text{Si}_2$  ( $X = \text{Co}, \text{Cu}, \text{Rh}, \text{Ag}, \text{Ir}$  и  $\text{Au}$ ;  $\text{RE} = \text{Eu}, \text{Gd}, \text{Tb}, \text{Dy}, \text{Ho}, \text{Er}$ ).

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Chikina A. et al. Strong ferromagnetism at the surface of an antiferromagnet caused by buried magnetic moments // Nature Communication. – 2014. – V. 5. – № 3171 – P. 1–5.
2. Güttler M. et al. Robust and tunable itinerant ferromagnetism at the silicon surface of the antiferromagnet  $\text{GdRh}_2\text{Si}_2$  // Scientific Reports. – 2016 – V. 6. – P. 24254.
3. Blöchl P. E. Projector augmented-wave method // Phys. Rev. B. – 1994. – V. 50. – P. 17953–17979.
4. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple // Phys. Rev. Lett. – 1996. – V. 77. – № 18. – P. 3865–3868.
5. Koelling D. D., Harmon B. N. A technique for relativistic spin-polarised calculations // Journal of Physics C: Solid State Physics. – 1977. – V. 10. – № 16. – P. 3107.