

# Индucedированное подложкой спин-орбитальное расщепление квантовых и интерфейсных состояний в слоях Au, Ag и Cu различной толщины на поверхностях W(110) и Mo(110)

© А.М. Шикин<sup>1</sup>, А.Г. Рыбкин<sup>1</sup>, Д.Е. Марченко<sup>1</sup>, Д.Ю. Усачев<sup>1</sup>,  
В.К. Адамчук<sup>1</sup>, А.Ю. Варыхалов<sup>1,2</sup>, О. Rader<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Санкт-Петербургский государственный университет,  
Санкт-Петербург, Петергоф, Россия

<sup>2</sup> BESSY-II, Helmholtz Zentrum,  
Berlin, Germany

E-mail: shikin@paloma.spbu.ru

(Поступила в Редакцию в окончательном виде 3 декабря 2009 г.)

Методами фотоэлектронной спектроскопии с угловым и спиновым разрешением обнаружено индуцированное подложкой спин-орбитальное расщепление интерфейсных и квантовых состояний, формирующихся в слоях Au, Ag и Cu на поверхностях W(110) и Mo(110). Показано, что величина расщепления существенно образом зависит от атомного номера материала подложки и значительно больше для слоев данных металлов на поверхности W(110), т.е. элемента с большим атомным номером ( $Z_W = 74$ ), чем на поверхности Mo(110), т.е. элемента с меньшим атомным номером ( $Z_{Mo} = 42$ ), но в то же время слабо зависит от атомного номера адсорбируемого металла. При измерении дисперсионных зависимостей сформированных квантовых состояний с увеличением параллельной составляющей импульса фотоэлектронов величина индуцированного подложкой спин-орбитального расщепления увеличивается (что коррелирует с моделью Рашбы) для всех толщин напыляемых пленок (вплоть до 10 монослоев). Для интерфейсных состояний, формируемых при монослойных покрытиях Au, Ag и Cu на поверхностях W(110) и Mo(110), величина индуцированного спин-орбитального расщепления уменьшается с увеличением значения параллельной составляющей импульса возбуждаемого фотоэлектрона.

Работа выполнена в рамках гранта РФФИ № 07-02-00809.

## 1. Введение

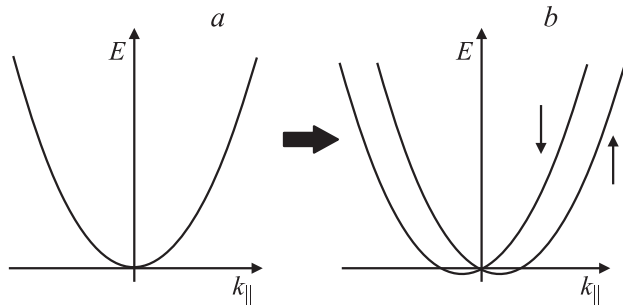
Известно, что такие физические явления, как осциллирующее обменное магнитное взаимодействие и гигантский магнитный резонанс сопротивления, проявляющиеся в слоистых магнитных системах на основе периодически расположенных слоев ферромагнитных и немагнитных (благородных) металлов [1–3], обусловлены индуцированной спиновой поляризацией квантовых состояний в слоях благородных металлов, формируемой при контакте с ферромагнитными металлами [4,5]. Резонансное взаимодействие между слоями магнитных металлов, приводящее к данным эффектам, осуществляется посредством формируемых спин-поляризованных квантовых состояний при условии их локализации на уровне Ферми. Эти состояния изменяют свое энергетическое положение относительно уровня Ферми при изменении толщины слоя благородного металла, модулируя тем самым магнитные свойства данных слоистых систем [4–6]. Однако помимо обменного магнитного взаимодействия существуют и другие пути, приводящие к спиновому расщеплению электронных состояний. Одной из таких возможностей энергетического расщепления спиновых состояний могут являться эффекты спин-орбитального взаимодействия. Однако для металлов, характеризующихся инверсной симметрией кристаллической структуры, спин-орбитальное расщепление валентных электронных состояний запрещено вследствие одновременного

выполнения условий инверсной симметрии и симметрии обращения времени (см., например, [7,8]). Тем не менее на поверхности таких металлов трехмерная инверсионная симметрия волновых функций нарушается и запрет на спин-орбитальное расщепление электронных состояний снимается. Экспериментально было показано, что на поверхности монокристаллов благородных металлов (Au(111) [9–12], Ag(111) [10,12]) действительно наблюдается расщепление *sp*-поверхностных состояний типа Шокли, обусловленное эффектами спин-орбитального взаимодействия. Расщепление таких поверхностных состояний может быть описано в рамках теории Рашбы, развитой для двумерного электронного газа [13,14].

В соответствии с теорией Рашбы для двумерного электронного газа спин-орбитальное взаимодействие приводит к расщеплению параболической дисперсии электронных состояний  $E(k)$  на две ветви (рис. 1), с характером дисперсии, описываемым выражением [13,14]

$$E(k_{\parallel}) = \frac{\hbar k_{\parallel}^2}{2m^*} \pm \alpha_R k_{\parallel}, \quad (1)$$

где  $\alpha_R$  — коэффициент Рашбы, пропорциональный градиенту поверхностного потенциала  $\Delta V = \frac{\partial V}{\partial r}$ , ограничивающего данный двумерный электронный газ,  $k_{\parallel}$  — величина параллельной составляющей волнового вектора в плоскости двумерного газа,  $m^*$  — эффективная масса электрона. Однако, как оказалось, в применении



**Рис. 1.** Дисперсионная зависимость для свободного электрона (а) и схематическая иллюстрация энергетического расщепления дисперсионных зависимостей для состояний с различным направлением спина по теории Рашбы для двумерного электронного газа (b).

к анализу спин-орбитального расщепления поверхностных состояний Au(111) и Ag(111) данная модель лишь качественно описывает дисперсии и соответствующую величину энергетического расщепления поверхностных состояний. Величина экспериментально измеренного спин-орбитального расщепления на уровне Ферми для поверхностных состояний Au(111) оказалась много больше величины, предсказываемой моделью Рашбы для свободных электронов (см., например, [9]). В связи с этим было предложено модифицировать модель Рашбы с учетом ряда положений приближения сильной связи, введя в выражение для коэффициента Рашбы ( $\alpha_R$ ) зависимость градиента внутриатомного потенциала тех атомов, из волновых функций которых строятся исследуемые валентные или поверхностные состояния, т.е.  $\alpha_R = f(\alpha_A, \alpha_V)$ , где  $\alpha_A$  и  $\alpha_V$  — градиенты внутриатомного и поверхностного потенциалов соответственно [7]. Подобная модификация модели Рашбы позволяет объяснить не только величину экспериментально наблюдаемого спин-орбитального расщепления поверхностных состояний, но и зависимость расщепления от атомного номера элемента (меньшая величина спин-орбитального расщепления для поверхностных состояний Ag(111) по сравнению с Au(111) коррелирует с разностью атомных номеров элементов).

В связи с зависимостью величины спин-орбитального расщепления электронных состояний от внутриатомного градиента потенциала было высказано предположение о возможности индуцированного влиянием подложки спин-орбитального расщепления электронных состояний поверхностного типа (квантовых, интерфейсных, поверхностных состояний) в тонких адсорбированных металлических слоях, вне зависимости от атомного номера элементов формируемых слоев [15]. В работах [15–18], посвященных изучению дисперсий квантовых и поверхностных состояний в тонких пленках Mg на поверхности W(110), было показано, что в энергетической области локализации запрещенной зоны в электронной структуре подложки измеряемые спектры характеризуются энергетически расщепленными состояниями. Формиро-

вание данных состояний приписывается авторами работы [15] спин-орбитальному расщеплению квантовых и поверхностных состояний Mg, обусловленному именно влиянием подложки. По мнению авторов работы [15], это происходит за счет того, что хвосты волновых функций Mg квантовых и поверхностных состояний проникают в область атомных ядер подложки, где испытывают влияние градиентов внутриатомного потенциала атомов подложки с высоким атомным номером. Однако сравнительный анализ величин энергетического расщепления электронных состояний, формируемых в слоях Mg различной толщины на поверхностях W(110) и Mo(110), характеризующихся подобной электронной и кристаллической структурой, но различным атомным номером элементов, показал приблизительно равную величину расщепления поверхностных и квантовых состояний на этих подложках [17,18]. На основании данных результатов в работах [17,18] было сделано заключение, что наблюдаемое расщепление квантовых и поверхностных состояний, изменяющееся по мере роста толщины слоя магния, не связано с эффектами индуцированного спин-орбитального взаимодействия, а скорее обусловлено отщеплением соответствующих гибридных состояний от границ запрещенной зоны в электронной структуре подложки.

Настоящая работа посвящена анализу возможности индуцированного подложкой спин-орбитального расщепления квантовых и интерфейсных состояний в другой системе — тонких слоях Au, Ag и Cu, формируемых на поверхностях W(110) и Mo(110). Для выявления роли адсорбируемого металла и подложки в эффектах индуцированного спин-орбитального расщепления были выбраны металлы с аналогичной электронной и кристаллической структурой (отдельно для подложки и адсорбируемого металла), но характеризующиеся различным атомным номером. Для адсорбируемых металлов  $Z_{Cu} = 29$ ,  $Z_{Ag} = 47$ ,  $Z_{Au} = 79$ . Для металлов, используемых в качестве подложки,  $Z_{Mo} = 42$ ,  $Z_W = 74$ . Были измерены соответствующие дисперсионные зависимости для квантовых и интерфейсных состояний для различных комбинаций элементов адсорбируемого металла и подложки, а также выявлена зависимость наблюдаемых эффектов от толщины нанесенных слоев.

## 2. Эксперимент

Эксперименты были проведены в Центре синхротронного излучения BESSY II (Гельмгольц-центр, Берлин, Германия) на российско-германском канале вывода синхротронного излучения и канале UE112-PGM. Фотоэлектронные спектры со спиновым разрешением были измерены при помощи спектрометра „PHOENEXS“ с полусферическим анализатором и детектором Мотта, работающим при 26 keV [19,20]. Для эксперимента были использованы энергии возбуждающего излучения в диапазоне  $h\nu = 50–80$  eV. В качестве подложек использовались атомарно-чистые плотноупакованные мо-

нокристаллические поверхности W(110) и Mo(110), характеризующиеся аналогичной электронной и кристаллической структурой. Напыление слоев Au, Ag и Cu производилось путем термического испарения с капель металлов, наплавленных на W-Re-проволоку, которая прогревалась прямым пропуском тока.

Измерения фотоэлектронных спектров с угловым и спиновым разрешением и соответствующих дисперсий интерфейсных и квантовых состояний производились в направлении ГС зоны Бриллюэна для монокристаллов W(110) и Mo(110). Предварительный контроль потока испаряемого вещества осуществлялся при помощи кварцевого резонатора, расположенного рядом с образцом. Окончательная калибровка толщины напыляемых пленок Au, Ag и Cu производилась по спектрам квантовых состояний [20–25].

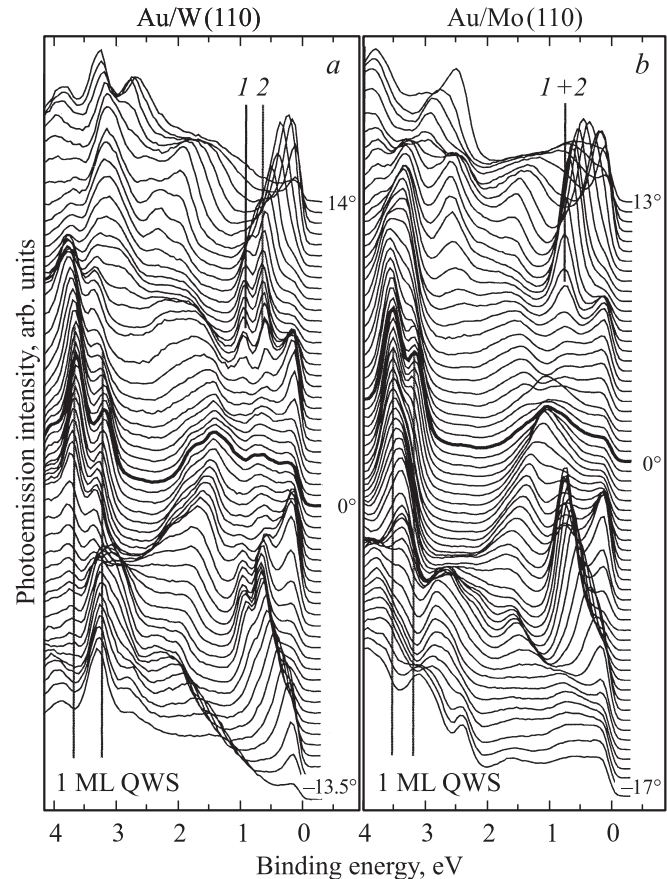
Очистка поверхностей W(110) и Mo(110) осуществлялась путем их предварительного окисления в атмосфере кислорода при давлении  $5 \cdot 10^{-8}$  Торг и температуре  $1200^\circ\text{C}$ , с последующим кратковременным прогревом („вспышкой“) до  $2000^\circ\text{C}$  в условиях сверхвысокого вакуума [17–25]. Базовое давление в исследовательской камере поддерживалось на уровне не хуже чем  $1 \cdot 10^{-10}$  Торг.

### 3. Экспериментальные результаты

На рис. 2, *a* приведена серия фотоэлектронных спектров с угловым разрешением для монослоя Au на поверхности W(110). Представленные спектры измерены в направлении ГС зоны Бриллюэна W(110) для различных полярных углов вылета фотоэлектронов относительно нормали к поверхности, которые связаны с величиной  $k_{\parallel}$  формулой

$$k_{\parallel} = 0.51 \sqrt{E_{\text{kin}} \sin \theta}, \quad (2)$$

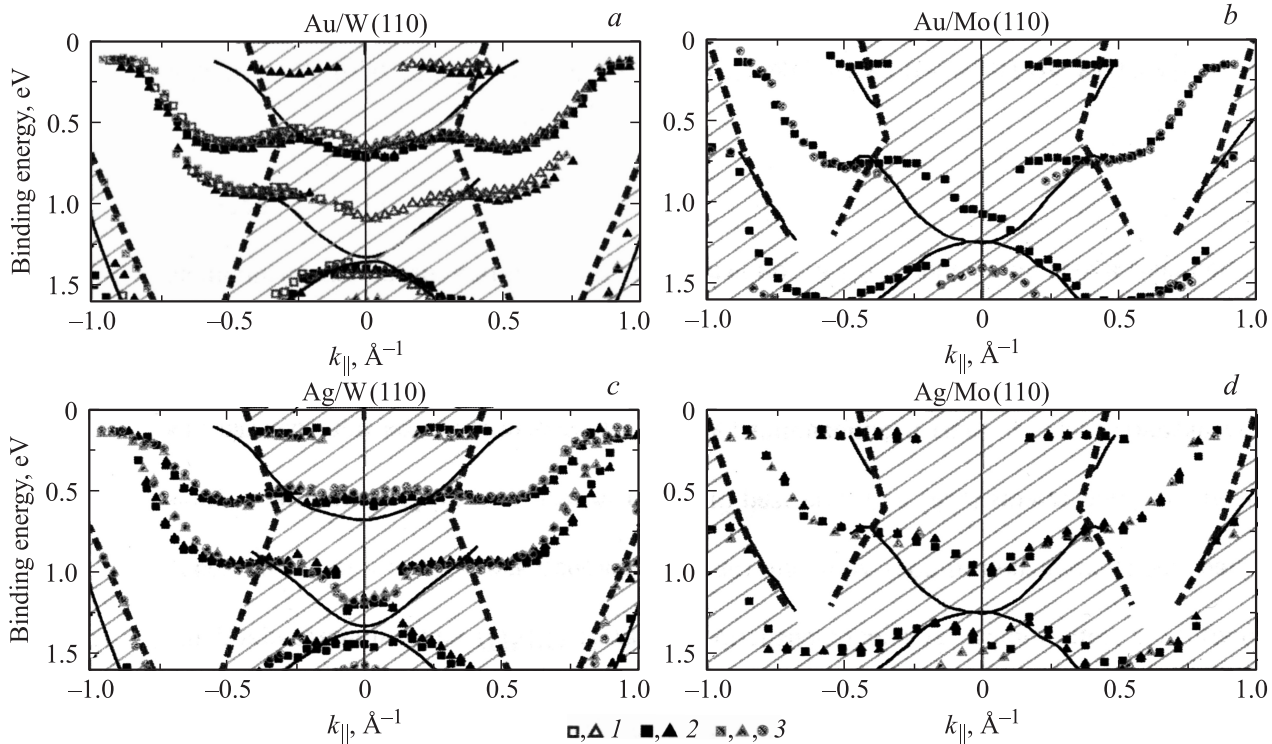
где  $\theta$  — величина полярного угла. Спектры, измеренные по нормали к поверхности, показаны жирными линиями в центре рисунков. На рис. 2, *b* приведена аналогичная серия фотоэлектронных спектров с угловым разрешением, измеренных для монослоя Au на поверхности Mo(110). Все представленные спектры характеризуются наборами пиков квантовых состояний (обозначенных на рисунке как 1 ML QWS), характерными для монослойных покрытий Au (3.7 и 3.1 eV) [22–25]. (Аналогичные серии фотоэлектронных спектров с угловым разрешением были измерены для монослоев Ag на поверхности W(110) и Mo(110) с соответствующими пиками квантовых состояний, локализованных при энергиях 4.15 и 4.6 eV [21,23–25]). Данные особенности спектров квантовых состояний были использованы для прецизионной калибровки толщины формируемых покрытий с точностью  $\pm 0.1$  монослоя [24,25]. Помимо отмеченных квантовых состояний представленные спектры характеризуются также ярко выраженными пиками состояний, которые не могут быть приписаны ни квантовому состоянию, соответствующим монослойному покрытию Au и Ag, ни состояниям, соответствующим чистой поверхности



**Рис. 2.** Серии фотоэлектронных спектров с угловым разрешением, измеренные для монослоев Au на поверхности монокристаллов W(110) (*a*) и Mo(110) (*b*). Спектры измерены в направлении ГС зоны Бриллюэна W(110) и Mo(110) для различных положительных и отрицательных полярных углов относительно нормали к поверхности с шагом  $0.5^\circ$ . Спектры, измеренные по нормали к поверхности, показаны жирными линиями в центре. Пики, соответствующие квантовым состояниям, формируемым при монослойных покрытиях, обозначены как 1 ML QWS, а пики соответствующих интерфейсных состояний — цифрами 1 и 2.

W(110). Эти состояния обозначены на рисунке цифрами 1 и 2. Они локализованы в области запрещенной зоны в электронной структуре W(110) и Mo(110) и формируются только при монослойных покрытиях Au и Ag (локализация энергетических запрещенных зон в электронной структуре атомарно-чистых поверхностей W(110) и Mo(110) показана на рис. 3 штриховыми линиями).

На рис. 3 представлены соответствующие дисперсионные зависимости электронных состояний, формируемых при монослойных покрытиях Au и Ag поверхностей монокристаллов W(110) и Mo(110), построенные с использованием спектров, показанных для монослоя Au на рис. 2, и аналогичных спектров для монослоя Ag на данных поверхностях. На рис. 3, *a,b* приведены дисперсии электронных состояний для монослоев Au, а на



**Рис. 3.** Дисперсии электронных состояний в направлении  $\Gamma S$  зоны Бриллюэна для монослоев Au на поверхности W(110) (a) и Mo(110) (b) и монослоев Ag на поверхности W(110) (c) и Mo(110) (d). Дисперсионные зависимости  $E(k_{\parallel})$  измерены при различных энергиях возбуждающего излучения, eV: 1 — 62, 2 — 65, 3 — 80. Незаштрихованные области, ограниченные штриховыми линиями, соответствуют положениям локальных запрещенных зон в электронной структуре подложек W(110) и Mo(110). Различные символы соответствуют данным разных экспериментов.

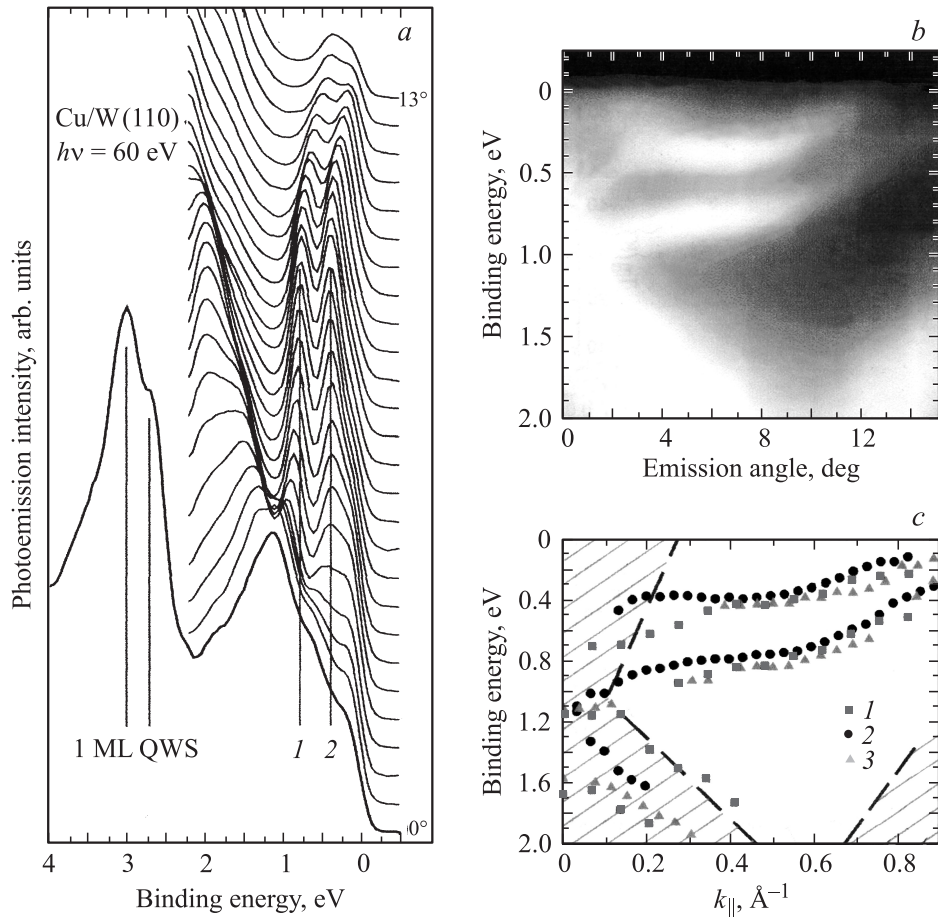
рис. 3, c,d — для монослоев Ag на поверхности W(110) и Mo(110) в зависимости от величины параллельной составляющей импульса ( $k_{\parallel}$ ), измеренные для различных энергий возбуждающего излучения ( $h\nu$ ). Границы запрещенной зоны в электронной структуре W(110) и Mo(110) показаны на рис. 3 штриховыми линиями, а сами области, соответствующие запрещенной зоне, остаются незаштрихованными. Как видно из представленных на рис. 3 зависимостей, при напылении монослоев Au и Ag на поверхность W(110) и Mo(110) в областях запрещенных состояний в электронной структуре подложки формируются дополнительные ветви электронных (интерфейсных) состояний, локализованных в диапазоне энергий связи от 1.0 eV и до уровня Ферми.

Из анализа как самих фотоэлектронных спектров (рис. 2), так и дисперсий электронных состояний (рис. 3) для данных систем видны явное расщепление ( $\sim 0.35\text{--}0.45\text{ eV}$ ) формируемых интерфейсных состояний для монослоев Au и Ag на поверхности W(110) и существенно меньшее расщепление соответствующих состояний для монослоев Au и Ag на поверхности Mo(110). В пределах энергетического разрешения в данном эксперименте состояния 1 и 2 на рис. 2 для систем Au/Mo(110) и Ag/Mo(110) не могут быть разрешены.

Зависимость величины расщепления от атомного номера элемента подложки свидетельствует о том, что

расщепление индуцировано подложкой и обусловлено спин-орбитальным взаимодействием. Величина расщепления для монослоев Au и Ag на поверхности W(110) оказывается приблизительно одинаковой, т.е. не зависит от атомного номера адсорбируемого металла. Отсюда можно заключить, что величина расщепления в основном определяется влиянием подложки или соответствующей величиной градиента внутриатомного потенциала, характерного для атомов подложки.

Для того чтобы подтвердить исключительную зависимость величины расщепления формируемых интерфейсных состояний от атомного номера элемента подложки и независимость от атомного номера адсорбируемого металла, в настоящей работе были проведены аналогичные измерения для монослоев Cu на поверхности W(110). Медь характеризуется существенно меньшим атомным номером и соответственно меньшим атомным спин-орбитальным расщеплением  $3p$ -состояний. На рис. 4, a приведена серия фотоэлектронных спектров с угловым разрешением, измеренных для монослоя Cu на поверхности W(110) в направлении  $\Gamma S$  зоны Бриллюэна. На данном рисунке показаны спектры только положительных значений полярных углов относительно нормали к поверхности. Состояния, локализованные при энергиях  $\sim 2.7$  и  $\sim 3.0\text{ eV}$ , являются квантовыми состояниями, характерными для монослоя Cu. Как и в случае

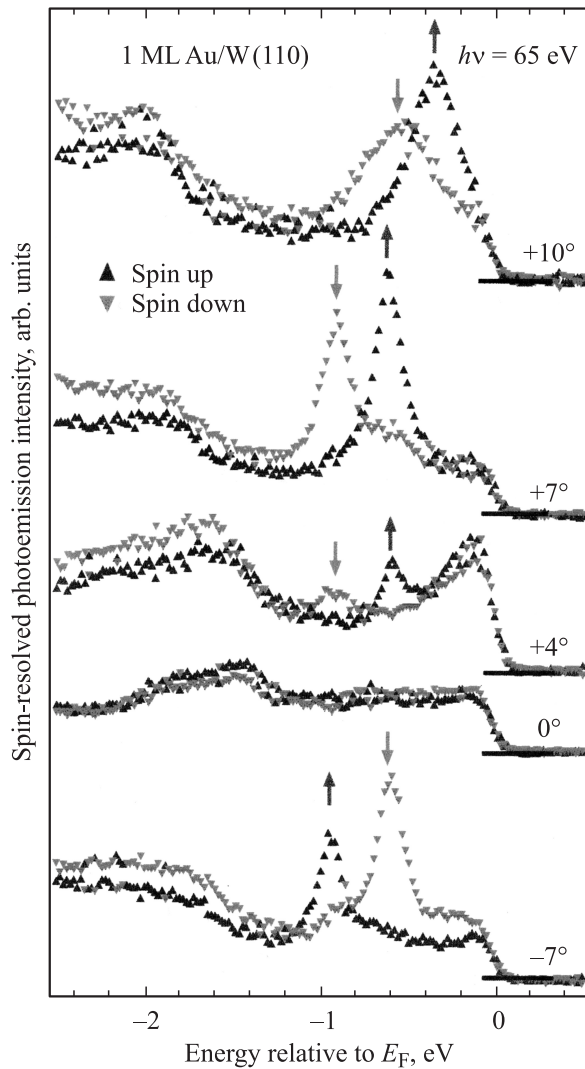


**Рис. 4.** Фотоэлектронные спектры с угловым разрешением, измеренные для монослоя Cu на поверхности монокристалла W(110) в направлении  $\Gamma S$  зоны Бриллюэна с шагом  $0.5^\circ$  для различных положительных полярных углов относительно нормали к поверхности (пики квантовых состояний обозначены как 1 ML QWS, а пики формируемых интерфейсных состояний — цифрами 1 и 2) (a), и соответствующие дисперсии интерфейсных состояний в направлении  $\Gamma S$  зоны Бриллюэна в зависимости от величины полярного угла относительно нормали к поверхности (b) и параллельной составляющей импульса в данном направлении (c). Дисперсионные зависимости  $E(k_{\parallel})$  измерены при различных энергиях возбуждающего излучения, eV: 1 — 65, 2 — 80, 3 — 60. Незаштрихованная область, ограниченная штриховыми линиями, соответствует положению локальной запрещенной зоны в электронной структуре W(110).

монослоев Au и Ag, спектры также характеризуются дополнительными интерфейсными состояниями, обозначенными на рисунке как 1 и 2, формируемыми в области локальной запрещенной зоны в электронной структуре W(110). На рис. 4, b, c представлены соответствующие дисперсии формируемых интерфейсных состояний, измеренные для различных полярных углов относительно нормали к поверхности (b) и в зависимости от величины параллельной составляющей импульса ( $k_{\parallel}$ ) (c), измеренные при различных энергиях возбуждающего излучения ( $h\nu$ ). Границы областей запрещенной зоны в электронной структуре подложки показаны на рисунке штриховыми линиями. Как и в случае Au и Ag, ветви формируемых интерфейсных состояний для монослоев Cu на поверхности W(110) характеризуются аналогичным поведением и той же величиной расщепления  $\sim 0.35\text{--}0.45\text{ eV}$ , т.е. не зависящей от величины атомного номера элемента адсорбируемого металла.

Это подтверждает вывод, что величина расщепления формируемых интерфейсных состояний для монослоев Au, Ag, Cu на поверхности W(110) целиком определяется эффектами индуцированного подложкой спин-орбитального взаимодействия.

Для подтверждения того, что формируемые интерфейсные состояния характеризуются различными направлениями спина, были проведены измерения фотоэлектронных спектров со спиновым разрешением. На рис. 5 представлена серия фотоэлектронных спектров со спиновым и угловым разрешением для монослоя Au на поверхности W(110) для различных полярных углов относительно нормали к поверхности. Состояния „spin-up“ и „spin-down“ обозначены разнонаправленными треугольниками. Из представленных спектров со спиновым разрешением хорошо видно, что формируемые энергетически расщепленные интерфейсные состояния действительно характеризуются различным направлением



**Рис. 5.** Фотоэлектронные спектры со спиновым разрешением, измеренные для монослоя Au на поверхности W(110) в направлении  $\Gamma S$  зоны Бриллюэна ( $h\nu = 65$  eV) для различных полярных углов относительно нормали к поверхности, показывающие спин-орбитальное расщепление формируемых интерфейсных состояний. Состояния, отвечающие различным спинам, показаны разнонаправленными треугольниками и соответствующими стрелками.

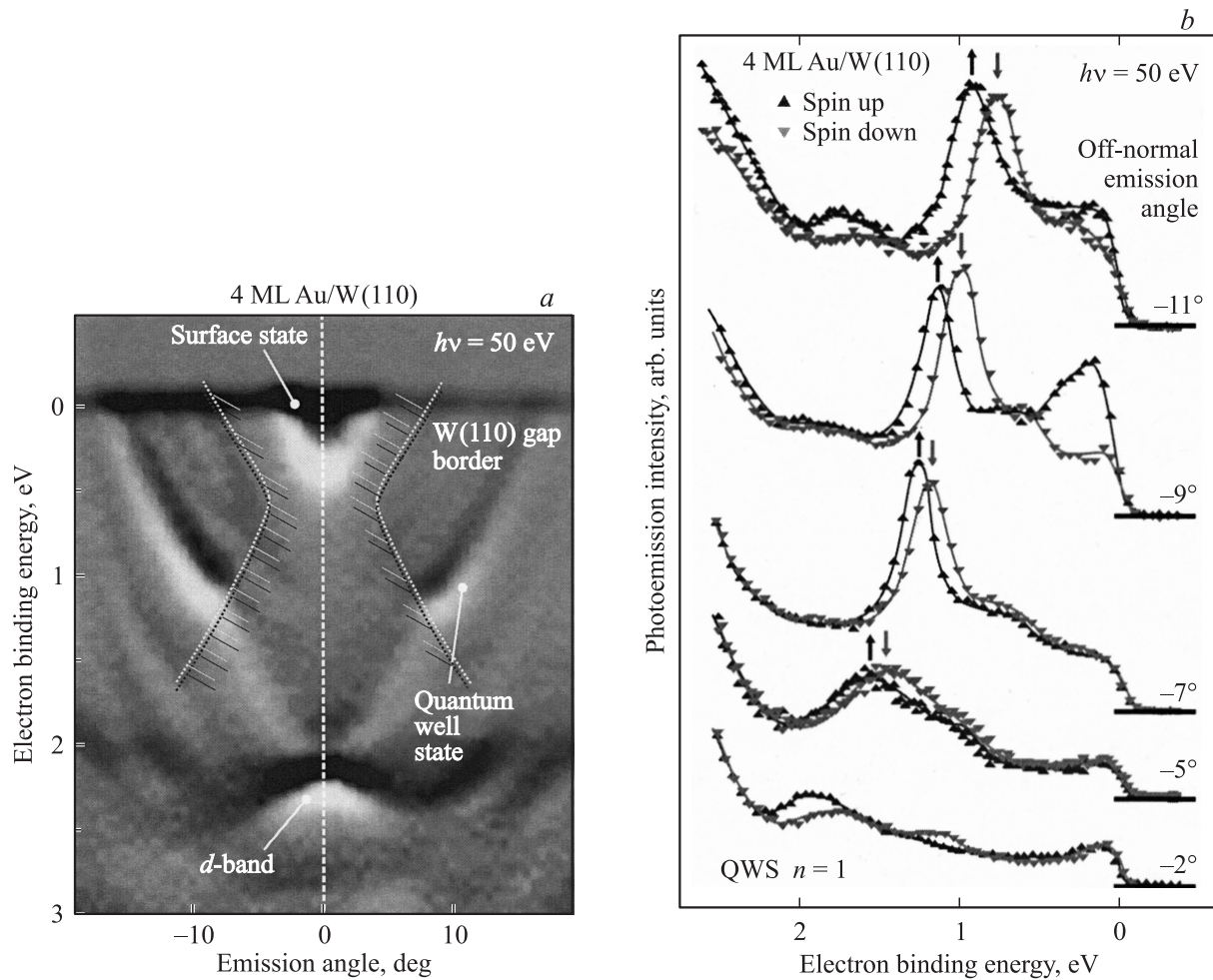
спина с практически полным разделением по энергии. Направления спинов ориентированы перпендикулярно направлению ( $k_{\parallel}$ ), и при переходе через нормаль к поверхности направления спинов инвертируются. Спектры при полярных углах относительно нормали к поверхности  $\pm 7^\circ$  практически повторяют друг друга, но с инвертированными направлениями спина.

Следует отметить, что формируемые интерфейсные состояния имеют максимум интенсивности при монослойной толщине адсорбируемых пленок Au, Ag, Cu. При увеличении толщины адсорбированного слоя эти состояния уменьшаются по интенсивности и при толщинах более двух монослоев исчезают из спектров [19].

Возникает вопрос: а возможны ли эффекты индуцированного подложкой спин-орбитального расщепления состояний, формируемых в более толстых слоях, и как эти эффекты изменяются с увеличением толщины напыленного слоя металла?

На рис. 6, *a* представлены дисперсии квантовых электронных состояний, формируемых в пленке Au толщиной 4 монослоя на поверхности W(110), измеренные методом спин-интегрированной фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением, в зависимости от полярного угла относительно нормали к поверхности. Данные дисперсионные зависимости (обозначенные как quantum well states) показаны в виде светлых линий с интенсивностью, пропорциональной интенсивности соответствующих пиков квантовых состояний в фотоэлектронных спектрах. Здесь же представлены дисперсионные зависимости для квантовых  $d$ -состояний (обозначенные как  $d$ -band) и поверхностных Au( $sp$ )-состояний (обозначенные как surface states). Границы запрещенной зоны в электронной структуре подложки показаны штриховкой и отмечены как W(110) gap border. Видно, что дисперсионные зависимости квантовых состояний испытывают скачок на границе запрещенной зоны, но явного расщепления ветви квантовых состояний не наблюдается. На рис. 6, *b* показана серия фотоэлектронных спектров для различных полярных углов, измеренных методом спин-разрешенной фотоэлектронной спектроскопии. На представленных спектрах явно видна спиновая поляризация фотоэлектронов, возбужденных из квантовых состояний. При этом величина энергетического расщепления для состояний с различным направлением спина увеличивается с ростом величины параллельной составляющей импульса, что находится в соответствии с теорией Рашбы для двумерного электронного газа (см. формулу (1)). На рис. 7, *a* представлены спин-разрешенные спектры квантовых состояний, измеренные для слоя Au с толщиной 5 монослоев на поверхности W(110) при положительных и отрицательных полярных углах относительно нормали к поверхности. Из представленных спектров явно видна инверсия направлений спина при изменении знака  $k_{\parallel}$ , что также находится в соответствии с теорией Рашбы.

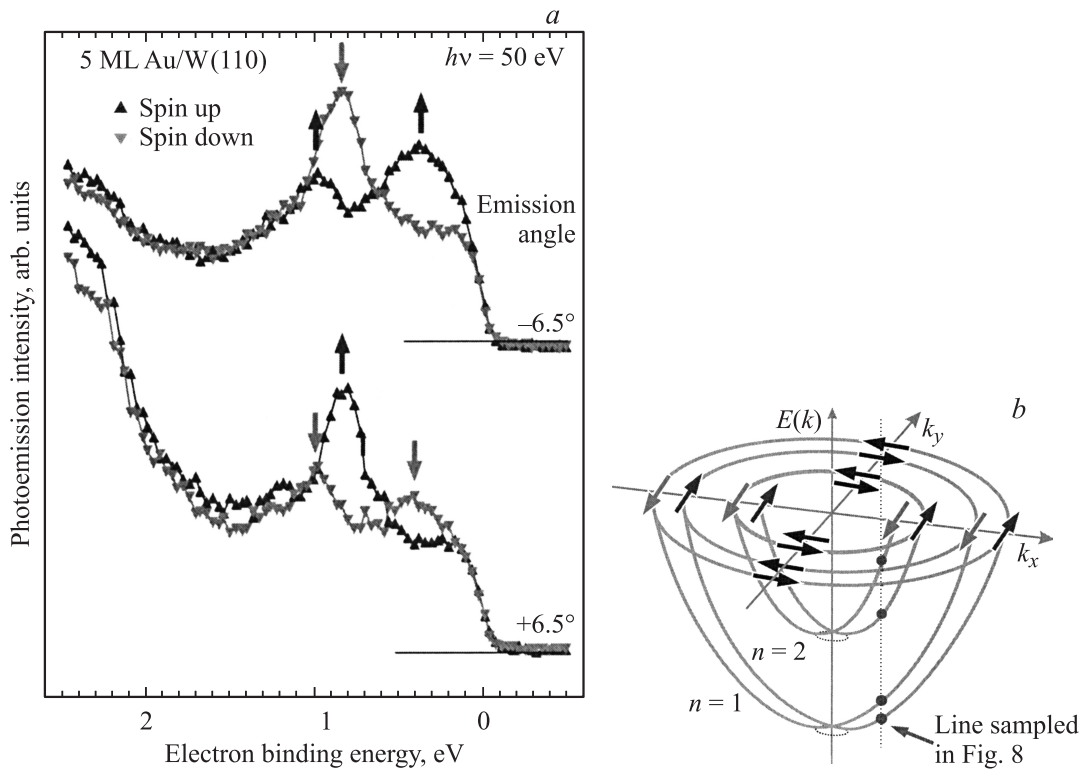
На рис. 8, *a* представлена серия спин-разрешенных фотоэлектронных спектров для слоев Au различной толщины на поверхности W(110), измеренных при фиксированном полярном угле ( $-7^\circ$  относительно нормали к поверхности) для состояний в области запрещенной зоны в электронной структуре подложки, что соответствует величине параллельной составляющей импульса, равной  $k_{\parallel} = -0.43 \text{ \AA}^{-1}$  (см. для сравнения спектр при полярном угле ( $-7^\circ$ ), представленный на рис. 6, *b*). На представленных спектрах (рис. 8, *a*) явным образом видна поляризация квантовых состояний по спину для всех измеренных толщин пленок Au (вплоть до 9 монослоев), причем для всех ветвей квантовых состояний, формирующихся при различных толщинах пленок. Величина



**Рис. 6.** *a*) Дисперсионная зависимость квантовых  $sp$ -состояний (quantum well states), формируемых в пленке Au толщиной 4 монослоя на поверхности W(110), измеренная методом спин-интегральной фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением; дисперсионные зависимости для квантовых  $d$ -состояний ( $d$ -band) и поверхностных Au( $sp$ )-состояний (surface states). Зависимости показаны светлыми линиями с интенсивностью, пропорциональной интенсивности соответствующих пиков квантовых состояний в фотоэлектронных спектрах. Границы запрещенной зоны (W(110) gap border) в электронной структуре W(110) отмечены линиями со штриховкой. *b*) Серия фотоэлектронных спектров, измеренных методом спин-разрешенной фотоэлектронной спектроскопии при различных полярных углах относительно нормали к поверхности. Состояния, отвечающие различным спинам, показаны разнонаправленными треугольниками и соответствующими стрелками.

энергетического сдвига между состояниями, характеризующимися различными направлениями спина, увеличивается по мере уменьшения их энергии связи. Резко структурированные состояния, формируемые при толщине в 1 монослой, при увеличении толщины слоя Au уменьшают свою интенсивность, и на их месте при толщинах слоя Au более 2 монослоев формируются другие состояния, также расщепленные по спину, но меньшей интенсивности и с большей величиной расщепления. Эти состояния генетически связаны с состояниями в области уровня Ферми (рис. 2, 3 при полярных углах относительно нормали  $\sim \pm 5^\circ$ ) и обусловлены соответствующими спин-поляризованными состояниями W, которые модифицируются при напылении золота. Энергетическое расщепление для квантовых состояний с различным направлением спина при данном полярном угле можно

увидеть при толщинах слоя Au более 3–4 монослоев. При этом когда квантовые состояния попадают в область запрещенной зоны в электронной структуре подложки (область энергий связи для данного полярного угла менее 2 eV), их интенсивность увеличивается вследствие хорошей пространственной локализации волновых функций внутри пленки золота, что обусловлено наличием запрещенной зоны в электронной структуре подложки. По мере увеличения толщины слоя Au расщепленные по спину ветви квантовых состояний сдвигаются в сторону уровня Ферми и пересекают его. Причем интенсивность каждой расщепленной ветви квантовых состояний по мере увеличения толщины Au-пленки не ослабляется. Таким образом, индуцированное подложкой спин-орбитальное расщепление квантовых состояний распространяется на всю толщину слоя адсорбированного



**Рис. 7.** *a*) Спектры квантовых состояний с разрешением по спину для слоя Au толщиной 5 монослоев на поверхности W(110), измеренные при отрицательных и положительных полярных углах ( $\pm 6.5^\circ$ ) относительно нормали к поверхности; состояния, отвечающие различным спинам, показаны разнонаправленными треугольниками и соответствующими стрелками. *b*) Распределение направлений спинов в импульсном пространстве ( $k_x, k_y$ ) для электронных состояний, расщепленных энергетически в соответствии с моделью Рашбы. Аналогичное спиновое распределение имеет место для ветвей квантовых состояний, формируемых в тонких слоях Au и Ag на поверхности W(110). Пунктирная линия соответствует полярному углу, при котором производились измерения спектров на рис. 8.

металла, по крайней мере для толщин, исследуемых в настоящей работе. Этот эффект наблюдается и для серебра, что демонстрируется на рис. 8, *b*, где представлены аналогичные спин-разрешенные фотоэлектронные спектры для различных толщин слоев Ag на поверхности W(110). Из сравнения спектров квантовых состояний, формируемых в пленках Ag и Au, видно, что величина энергетического расщепления квантовых состояний, характеризующихся различным направлением спина, при одинаковых толщинах слоев и одинаковых энергиях квантовых состояний приблизительно одинакова для этих металлов, т.е. не зависит от атомного номера элемента напыляемого металла. Отсюда можно сделать вывод, что величина индуцированного спинового расщепления квантовых состояний, так же как и для монослойных покрытий Au и Ag, обусловлена влиянием подложки с высоким атомным номером.

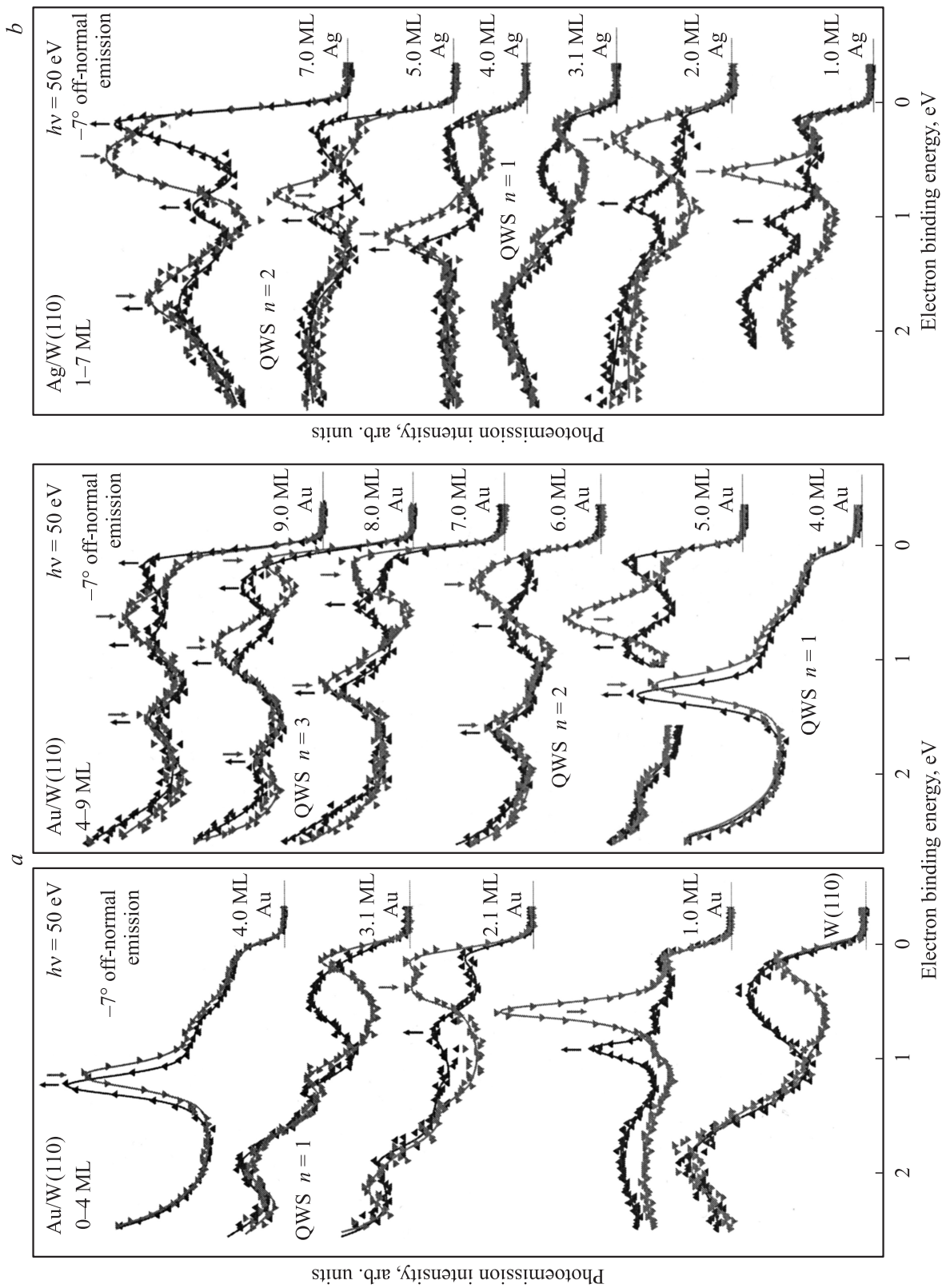
#### 4. Дискуссия

Из представленных выше экспериментальных результатов следует, что квантовые состояния, формируемые в слоях благородных металлов на поверхности W(110),

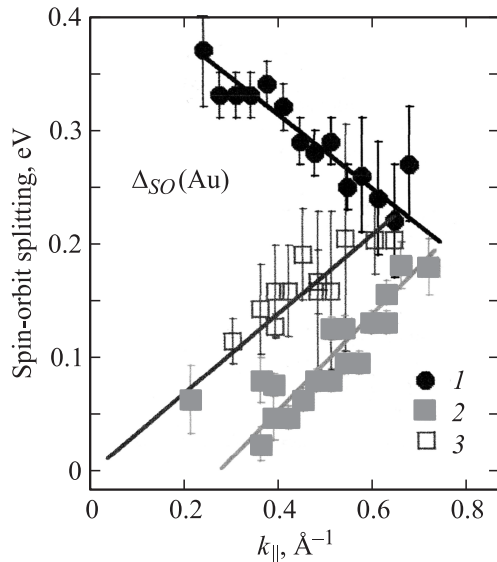
являются поляризованными по спину. Причем величина энергетического расщепления для квантовых состояний с различным направлением спина увеличивается с ростом  $k_{||}$ . На рис. 9 (кривые 2,3) приведена зависимость энергетического расщепления квантовых состояний, характеризующихся различным направлением спина, от величины параллельной составляющей импульса ( $k_{||}$ ) для слоев Au с толщиной 4 и 5 монослоев. Увеличение величины расщепления для состояний с различным направлением спина вкупе с инверсией направлений спинов при смене знака  $k_{||}$  является характерным для эффектов спин-орбитального взаимодействия, что находится в соответствии с модифицированной теорией Рашбы с учетом внутриаомного градиента потенциала, характерного для атомов подложки.

На рис. 7, *b* показано распределение спинов формируемых квантовых состояний в пространстве импульсов, которые характеризуются параболической дисперсией (подобно свободным электронам) для различных энергий квантовых состояний ( $n = 1, 2$ ). Здесь же показано сечение спин-поляризованных дисперсий квантовых состояний при фиксированном значении  $k_{||}$  (как на рис. 8). Представленное распределение спинов в пространстве импульсов, построенное на основании анализа





**Рис. 8.** Серия спин-разрешенных фотоэлектронных спектров квантовых состояний, измеренных при фиксированном полярном угле относительно нормали к поверхности  $-7^\circ$ , соответствующем значению  $k_{\parallel} = -0.43 \text{ \AA}^{-1}$ , для слоев Au (a) и Ag (b) различной толщины на поверхности W(110), показывающие спиновую поляризацию формируемых квантовых состояний. Состояния, отвечающие различным спином, показаны разнонаправленными треугольниками и соответствующими стрелками.



**Рис. 9.** Изменение величины энергетического спинового расщепления интерфейсных состояний (1), формируемых при монослойном покрытии Au на поверхности W(110), и квантовых состояний, формируемых в слоях Au на поверхности W(110) с толщиной 4 (2) и 5 монослоев (3), в зависимости от величины параллельной составляющей импульса  $k_{\parallel}$ .

экспериментальных результатов по спин-разрешенной фотоэмиссии (рис. 6, *b* и 7, *a*), хорошо совпадает с теоретическим, предполагаемым для двумерного электронного газа. Однако в отличие от простейшей теории Рашбы величина спин-орбитального расщепления квантовых состояний определяется градиентом внутриатомного потенциала, причем не атомов самого адсорбируемого металла, а атомов подложки. Можно предположить, что волновые функции квазидвумерных квантовых состояний проникают в область атомов подложки с высоким атомным номером, где испытывают влияние высокого внутриатомного градиента потенциала. Таким образом, данные эффекты можно описать как индуцированное подложкой спин-орбитальное расщепление квантовых состояний, формируемых в нанесенном на данную подложку слое металла.

Факт, что эффекты индуцированной спиновой поляризации квантовых состояний проявляются в наибольшей степени в области локальной энергетической запрещенной зоны в электронной структуре подложки, объясняется тем, что, с одной стороны, вследствие наличия запрещенной зоны имеют место большая локализация волновых функций квантовых состояний размерами пленки и формирование более ярко выраженных спектров квантовых состояний. С другой стороны, наличие запрещенной зоны приводит к существенному увеличению доли обратно рассеянных электронных волн (от атомов подложки), для которых величина возникающего спинового расщепления определяется градиентом внутриатомного потенциала атомов, от которых они отражаются подобно

эффектам спиновой поляризации дифрагированных рассеянных электронных волн от W(100) [26].

Исходя из анализа результатов по спин-разрешенной фотоэлектронной спектроскопии (рис. 8) для больших толщин слоев (в данном эксперименте  $\sim 9$  монослоев) индуцированная спиновая поляризация квантовых состояний простирается на всю толщину слоя. Это может иметь место вследствие того, что квантовые состояния являются состояниями стоячей волны, для которой любые изменения воздействуют на всю область существования стоячей волны, т.е. на толщину пленки. В этом случае если расположить на внешней границе нанесенного слоя другой материал со спиновой структурой (возможно, магнитный металл), то это может привести к резонансному возбуждению соответствующей спиновой поляризации электронных состояний в данном металле (подобно тому как это имеет место в слоистых системах на основе слоев магнитных и немагнитных металлов с эффектами осциллирующего обменного магнитного взаимодействия [4,5]), что может также приводить к модуляции свойств формируемых слоистых систем.

В случае многослойных покрытий Au, Ag, Cu на W(110) физическая сущность эффектов индуцированного спин-орбитального расщепления существенно отличается. Для таких покрытий на поверхности W(110) формируются гибридные волновые функции с участием электронных состояний поверхностных атомов W (с сохранением структуры поверхности W(110)) и адсорбированных атомов Au. Структура поверхности Ферми при монослойном покрытии Au на W(110) имеет симметрию, характерную для поверхности W(110) [19]. Сформированные состояния, с одной стороны, не характеризуются центральной симметрией волновых функций, и поэтому, несмотря на то что они сформированы с участием волновых функций атомов W, условие спинового вырождения для них снимается, как и для поверхностных атомов W. Но данные гибридные состояния характеризуются большей анизотропией волновых функций, что влияет на величину соответствующего спин-орбитального расщепления. С другой стороны, сформированные связи включают атомы W, характеризующиеся высоким градиентом внутриатомного потенциала, и поэтому величина получаемого спин-орбитального расщепления существенным образом зависит от подложки, на которой данные состояния формируются. Но при этом сформированные электронные состояния не могут быть описаны с позиций свободного двумерного электронного газа и не должны описываться простейшей теорией Рашбы. На рис. 9 (кривая 1) показана зависимость величины спинового расщепления для состояний, сформированных при монослойных покрытиях Au, в зависимости от значения параллельной составляющей импульса  $k_{\parallel}$ . Видно, что величина расщепления уменьшается с увеличением  $k_{\parallel}$ , что принципиально отличается от хода зависимости, предсказываемой теорией Рашбы (рис. 1 и формула (1)).

## 5. Заключение

В результате проведенных исследований установлено следующее.

1) Тонкие слои Au, Ag, Cu с толщиной 0–9 монослоев, нанесенные на поверхность монокристалла немагнитного металла с высоким атомным номером (W(110)), характеризуются энергетическим спиновым расщеплением интерфейсных состояний, формируемых при монослойных покрытиях, и квантовых состояний — при более толстых слоях напыляемых пленок.

2) Величина энергетического расщепления для состояний с различным направлением спина (как интерфейсных, так и квантовых состояний) существенно зависит от атомного номера материала подложки. Сравнение величины энергетического расщепления спин-поляризованных интерфейсных состояний, формируемых при монослойных покрытиях Au, Ag, Cu на поверхности W(110) и Mo(110), показало существенно большее расщепление состояний (0.35–0.45 eV) для слоев данных металлов на поверхности монокристалла W, т.е. элемента с более высоким атомным номером ( $Z_W = 74$ ) по сравнению с Mo ( $Z_{Mo} = 42$ ).

3) Наблюдаемое энергетическое расщепление интерфейсных и квантовых состояний, формируемых в тонких пленках благородных металлов, обусловлено эффектами спин-орбитального взаимодействия, индуцированного подложкой, и определяется атомным номером материала подложки.

4) Величина индуцированного спин-орбитального расщепления для обоих типов состояний не зависит от материала адсорбируемого металла. Для монослоев Au, Ag и Cu с различными атомными номерами величина энергетического расщепления для состояний с различным направлением спина является практически одинаковой. Для квантовых состояний, формируемых в слоях Au, Ag на поверхности W(110), величина энергетического расщепления для состояний с различным направлением спина также практически одинакова при одинаковых толщинах слоев.

5) Зависимость величины индуцированного спин-орбитального расщепления интерфейсных и квантовых состояний от значения параллельной составляющей импульса  $k_{||}$  существенным образом различается для монослойных покрытий Cu, Ag, Au и пленок большей толщины. Для квантовых состояний данная зависимость может быть описана в рамках модифицированной теории Рашбы с учетом индуцированного характера спин-орбитального взаимодействия и соответствующего внутриатомного градиента потенциала атомов подложки. Для монослойных покрытий величина энергетического расщепления для состояний с различным направлением спина уменьшается с увеличением  $k_{||}$ . Эффекты энергетического расщепления состояний с различным направлением спина для данных покрытий можно связать с асимметричностью волновых функций формируемых

интерфейсных состояний и поверхностного градиента потенциала.

6) Для квантовых состояний эффекты индуцированного спин-орбитального взаимодействия и соответствующее энергетическое расщепление состояний с различным направлением спина наблюдаются для всех измеренных толщин пленок вплоть до максимальной толщины, измеренной в настоящей работе (~ 9 монослоев), и для всех формируемых ветвей квантовых состояний.

## Список литературы

- [1] F.J. Himpsel, J.E. Ortega, G.J. Mankey, R.F. Willis. *Adv. Phys.* **47**, 511 (1998).
- [2] J.E. Ortega, F.J. Himpsel. *Phys. Rev. Lett.* **69**, 844 (1992).
- [3] S.S.P. Parkin, R.F.C. Farrow, R.F. Marks, A. Cebollada, G.R. Harp, R.J. Savoy. *Phys. Rev. Lett.* **72**, 3718 (1994).
- [4] C. Carbone, E. Vescovo, O. Rader, W. Gudat, W. Eberhardt. *Phys. Rev. Lett.* **71**, 2805 (1993).
- [5] C. Carbone. *Поверхность* **8–9**, 187 (1998).
- [6] J.E. Ortega, F.J. Himpsel, G.J. Mankey, R.F. Willis. *Phys. Rev. B* **47**, 1540 (1993).
- [7] L. Petersen, D. Hedegard. *Surf. Sci.* **459**, 49 (2000).
- [8] J. Henk, A. Ernst, P. Bruno. *Phys. Rev. B* **68**, 165 416 (2003).
- [9] S. LaShell, B.A. McDougall, E. Jensen. *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3419 (1996).
- [10] F. Reinert, G. Nicolay, S. Schmidt, D. Ehm, S. Hüfner. *Phys. Rev. B* **63**, 115 415 (2001).
- [11] M. Hoesch, M. Muntwiller, V.N. Petrov, M. Hengsberger, L. Patthey, M. Shi, M. Falub, T. Greber, J. Osterwalder. *Phys. Rev. B* **69**, 241 401 (R) (2004).
- [12] G. Nicolay, F. Reinert, S. Hüfner, P. Blaha. *Phys. Rev. B* **65**, 033 407 (2002).
- [13] Э.И. Рашба. *ФТТ* **2**, 1224 (1960).
- [14] Ю.А. Бычков, Э.И. Рашба. *Письма в ЖЭТФ* **39**, 66 (1984).
- [15] C. Koitzsch, C. Battaglia, F. Clere, L. Despont, M.G. Garnier, P. Aebi. *Phys. Rev. Lett.* **95**, 126 401 (2005).
- [16] F. Schiller, R. Keyling, E.V. Chilkov, J.E. Ortega. *Phys. Rev. Lett.* **95**, 126 402 (2005).
- [17] А.М. Шикин, О. Rader. *Phys. Rev. B* **76**, 073 407 (2007).
- [18] А.М. Шикин, Д.Е. Марченко, Н.А. Виноградов, Г.В. Прудникова, А.Г. Рыбкин, В.К. Адамчук, О. Rader. *ФТТ* **51**, 572 (2009).
- [19] А.М. Шикин, А. Варыхалов, Г.В. Прудникова, Д. Усачев, В.К. Адамчук, Y. Yamada, J.D. Riley, O. Rader. *Phys. Rev. Lett.* **100**, 057 601 (2008).
- [20] A. Varykhalov, J. Sánchez-Barriga, A.M. Shikin, W. Gudat, W. Eberhardt, O. Rader. *Phys. Rev. Lett.* **101**, 256 601 (2008).
- [21] А.М. Шикин, D.V. Vyalikh, G.V. Prudnikova, V.K. Adamchuk. *Surf. Sci.* **487**, 135 (2001).
- [22] А.М. Шикин, О. Rader, G.V. Prudnikova, V.K. Adamchuk, W. Gudat. *Phys. Rev. B* **65**, 075 403 (2002).
- [23] А.М. Шикин, О. Rader, W. Gudat, G.V. Prudnikova, V.K. Adamchuk. *Surf. Rev. Lett.* **9**, 1375 (2002).
- [24] А.М. Шикин, В.К. Адамчук. *ФТТ* **50**, 1121 (2008).
- [25] А.М. Шикин, О. Rader, В.К. Адамчук. *Поверхность* **10**, 16 (2005).
- [26] J. Kirschner, R. Feder. *Phys. Rev. Lett.* **42**, 1008 (1979).