

Анализ возможности спин-орбитальной природы расщепления поверхностных состояний в тонких слоях Mg(0001) на поверхности W(110) и Mo(110)

© А.М. Шикин, Д.Е. Марченко, Н.А. Виноградов, Г.В. Прудникова,
А.Г. Рыбкин, В.К. Адамчук, О. Rader*

Санкт-Петербургский государственный университет,
Санкт-Петербург, Петергоф, Россия

* BESSY, Berlin, Germany

E-mail: marchenko.dmitry@gmail.com

(Поступила в Редакцию в окончательном виде 23 мая 2008 г.)

В системе магниевых пленок с толщинами от субмонослойных до нескольких десятков атомных слоев на монокристалле W(110) наблюдается зависящее от толщины пленки расщепление состояний, локализованных энергетически вблизи поверхностного состояния магния. В литературе имеется несколько моделей, описывающих природу данного расщепления: в одном случае как индуцированное подложкой спин-орбитальное расщепление, в другом — как формирование невырожденных пар поверхностных четных и нечетных состояний за счет их глубокого проникновения в объем пленки. Предлагаемые модели основаны на исследованиях пленок с толщиной более пяти монослоев. Проведено сравнительное исследование систем Mg/W(110) и Mg/Mo(110) для пленок магния различной толщины, начиная с субмонослойных, которое не подтвердило спин-орбитальной природы данного расщепления и позволило сделать вывод о формировании на границе подложка–пленка гибридных межфазных состояний, а их изменение с толщиной объяснить как обусловленное изменением вклада магниевых поверхностных состояний.

Работа выполнена в рамках проектов РФФИ (№ 06-02-04008, 07-02-00809) и поддержана ФЦНТП Роснауки (контракты № 02.518.11.7029 и 02.513.11.3355).

PACS: 71.70.Ej, 73.20.At, 75.70.Ak

1. Введение

Эффекты спинового расщепления или спиновой поляризации электронных состояний вызывают в последнее время повышенный интерес исследователей вследствие существенной роли этих эффектов и их возможного применения в новой области электроники — так называемой спинтронике, основанной на разделении электронных состояний с различными направлениями спина [1]. В настоящее время существуют два пути, которые ведут к формированию спин-зависимых энергетически разделенных состояний в электронной структуре твердого тела. Первый из них обусловлен принципом Паули (и, как следствие, правилом Хунда), приводящим к образованию нескомпенсированных или непарных $3d$ - или $4f$ -спиновых состояний, заполняемых в различной степени, как например это имеет место в магнитных переходных и редкоземельных металлах. Эффекты осциллирующего обменного магнитного взаимодействия с их применением в спинтронике, эффекты гигантского магнитного резонанса с возможностью их использования в магнитных устройствах памяти являются примерами подобного типа разделения спиновых состояний и успешного использования этих эффектов [2].

Другой путь разделения спиновых состояний — это эффекты спин-орбитального взаимодействия, т.е. взаимодействия спина электрона и его орбитального момента. В полупроводниковых структурах с инверсной

асимметрией кристаллической структуры эти эффекты приводят к спиновому расщеплению (поляризации) состояний зоны проводимости. Особый интерес в плане возможного применения в спинтронике привлекают эффекты спин-орбитального взаимодействия, индуцированные градиентом электрического поля, обусловленного обрывом кристаллического потенциала на поверхности или межфазной границе. Возникающее при этом спин-орбитальное расщепление зависит от величины потенциала (так называемый Рашба-эффект [3]), что допускает возможность его контроля при помощи электрического поля и лежит в основе базовых разработок спиновых нанoeлектронных устройств [4].

В последнее время в научной литературе появился целый ряд публикаций [4–9], где спин-орбитальное расщепление наблюдалось для поверхностных состояний монокристаллов W(110), Mo(110), Au(111) и Ag(111). Это расщепление обусловлено поверхностным нарушением центральной симметрии объемной кристаллической структуры. Было найдено, что наблюдаемая величина спин-орбитального расщепления зависит от атомного номера исследуемых элементов. Наибольшая величина расщепления обнаружена для более тяжелых элементов с большим атомным номером (W(110), Au(110)) [4–8], а для более легких элементов (Mo(110), Ag(111)) [9,10] она была значительно меньше. В некоторых публикациях [11,12] также отмечается, что эффекты спин-орбитального расщепления электронных состояний мо-

гут наблюдаться и в тонких металлических пленках, например в пленках Mg(0001) на поверхности W(110). В работе [11], в частности, отмечалось, что в области локальной запрещенной зоны подложки имеет место расщепление соответствующих поверхностных и квантовых состояний магния, зависящее от толщины пленки магния. Авторы предположили, что вследствие глубокого проникновения волновой функции магниевых поверхностных состояний в глубь пленки и даже в подложку (в области запрещенной зоны подложки) имеет место влияние на эти состояния градиента внутриатомного потенциала вблизи W-остовов, что приводит к стимулированному подложкой спин-орбитальному расщеплению поверхностных состояний в самой магниевой пленке. В работе [12], где также наблюдалось расщепление поверхностных состояний в тонких пленках Mg(0001) на поверхности W(110), данному эффекту было дано другое объяснение. Авторы связали это расщепление с формированием невырожденных пар поверхностных четных и нечетных состояний, обусловленных взаимодействием волновых функций поверхностных состояний, локализованных на двух противоположных границах пленки.

Целью настоящей работы была попытка разрешить это противоречие и исследовать природу указанного расщепления поверхностных состояний магния, наблюдаемых в тонких пленках Mg(0001) на поверхности W(110). Так как в обеих отмеченных выше работах исследование было проведено для относительно толстых слоев магния (от 5 до 20 монослоев), то было решено исследовать более тонкие слои, начиная с субмонослойных покрытий. Если эффект расщепления поверхностных состояний магния обусловлен влиянием подложки, то его проявление должно быть максимальным именно для субмонослойных покрытий. Более того, если расщепление обусловлено спин-орбитальным взаимодействием с остовами подложки, то в случае выбора подложки с меньшим атомным номером (например, Mo) его проявление, т.е. величина наблюдаемого расщепления, будет меньше, чем в случае использования W-подложки. В настоящей работе мы провели сравнение особенностей электронной структуры тонких слоев магния, выращенных на различных подложках — W(110) и Mo(110). Данные подложки определяются подобием электронной структуры валентной зоны и кристаллической структуры, но W и Mo имеют различные атомные номера ($z = 74$ для W и $z = 42$ для Mo) и, следовательно, характеризуются существенным различием атомных параметров спин-орбитального расщепления (0.45 eV для W ($5d$) и 0.12 eV для Mo ($4d$) [10]). Поэтому если наблюдаемое расщепление обусловлено спин-орбитальным взаимодействием с остовами подложки, то величина расщепления ожидается существенно большей для системы Mg/W(110), чем для Mg/Mo(110). Помимо сравнительного анализа дисперсия электронных состояний на различных подложках в работе проанализированы также изменения поверхностных и объемных компонент внутренних уровней W и рассмотрены корреляции в их поведении с изменением

структуры валентных состояний вольфрама и магния по мере напыления Mg на W(110). Точная оценка толщины и качества формируемых слоев магния на поверхностях W(110) и Mo(110) проводилась по анализу энергии и интенсивности образующихся в пленке квантовых состояний [13] непосредственно в процессе напыления слоев магния.

2. Особенности эксперимента

Для анализа изменений спектров и построения дисперсии электронных состояний в исследуемых системах использовались методы фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением. Экспериментальные исследования фотоэлектронных спектров производились на российско-германском канале вывода синхротронного излучения на накопительном кольце BESSY (Берлин) с использованием полусферического энергоанализатора VG ESCA с угловым разрешением $1-1.5^\circ$ и общим энергетическим разрешением (фотоны плюс электроны) ~ 100 meV при энергиях фотонов $h\nu = 65$ eV. Измерения спектров внутренних уровней производились при угле захвата фотоэлектронов $\sim 15^\circ$ и энергии фотонов $h\nu = 110$ eV. Перед напылением Mg поверхности монокристаллов W(110) и Mo(110) первоначально отжигались в кислороде при давлении $5 \cdot 10^{-8}$ Torr и температуре 1100°C с последующим кратковременным прогревом (вспышкой) до температур $\sim 2000^\circ\text{C}$ в условиях сверхвысокого вакуума (не хуже 10^{-10} Torr). Ярко выраженные картины дифракции медленных электронов и отсутствие каких-либо загрязнений на поверхности (исходя из анализа фотоэлектронных спектров) свидетельствовали об атомной чистоте исследуемых поверхностей. Ультратонкие слои магния напылялись путем разогрева электронной бомбардировкой конца магниевых стержней. Оценка скорости напыления магния на поверхность образцов проводилась при помощи кварцевого резонатора, расположенного в эквивалентных с образцом условиях. Точное значение толщины напыленных слоев определялось на основании полученных спектров квантовых состояний, их энергетического положения и интенсивности (см. [13]). Базовое давление в исследовательской камере в процессе эксперимента было на уровне $1-2 \cdot 10^{-10}$ Torr.

3. Экспериментальные результаты

3.1. Калибровка толщины исследуемых пленок Mg, по спектрам квантовых состояний. На рис. 1, *a, b* представлены изменения фотоэлектронных спектров по мере напыления магния на поверхность W(110) и Mo(110), начиная от субмонослойных покрытий и до толщин пленок 8 и 10 монослоев соответственно. Спектры измерены в направлении, перпендикулярном поверхности, с угловым разрешением 1.5° .

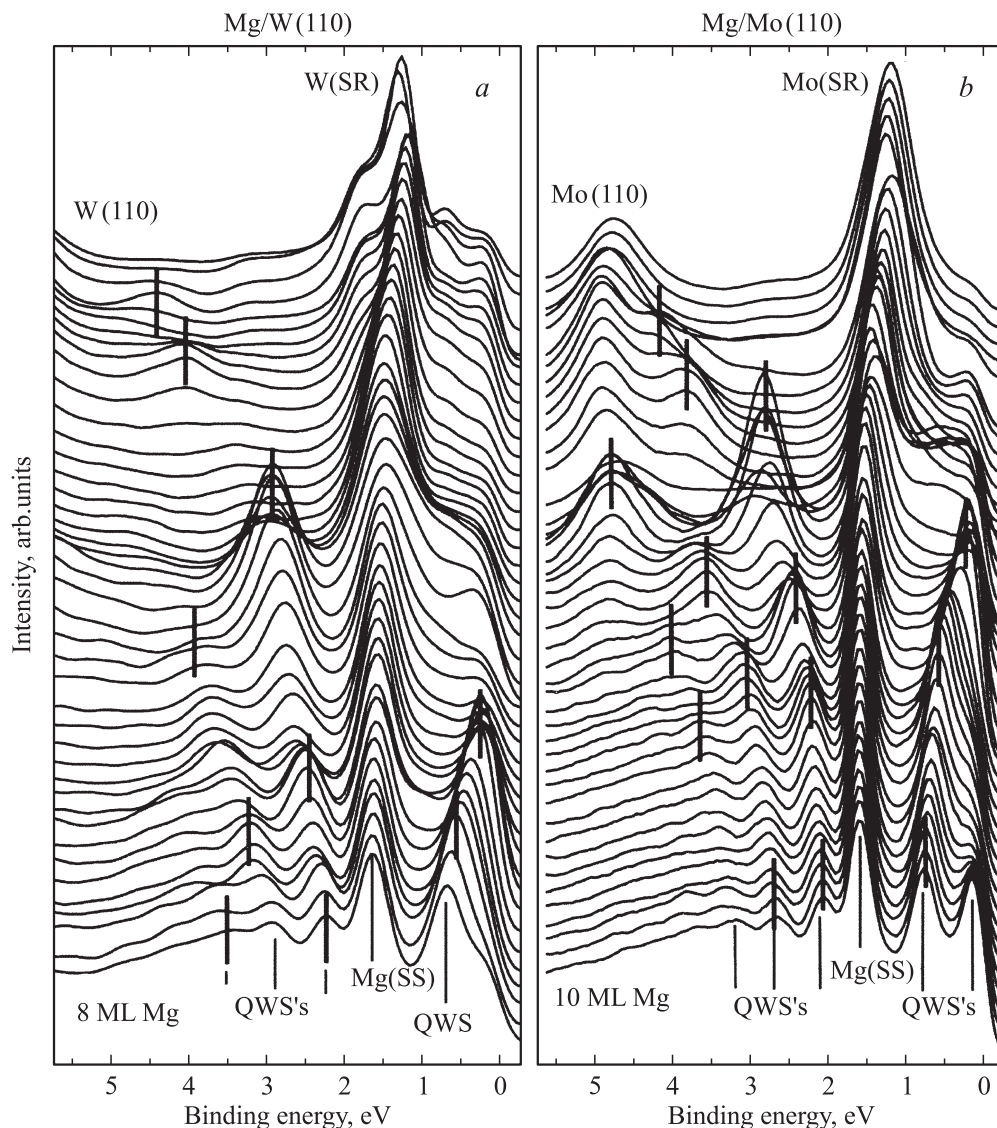


Рис. 1. Изменение фотоэлектронных спектров по мере напыления Mg на поверхность W(110) (a) и Mo(110) (b). Верхние спектры соответствуют атомарно-чистым поверхностям W и Mo, нижние — 8 и 10 монослоям Mg соответственно. При энергиях ~ 1.2 и 1.3 eV наблюдаются поверхностные резонансы W(SR) и Mo(SR). Спектры формируемых квантовых состояний в Mg-плёнке (обозначенные как QWS) расположены при энергиях связи более 1.8 eV и менее 1.25 eV.

Спектры чистых поверхностей W(110) и Mo(110) приведены в верхних частях рисунка. Поверхности W(110) и Mo(110) характеризуются ярко выраженными поверхностными резонансами при энергиях ~ 1.2 и 1.3 eV [14] соответственно и менее интенсивными пиками поверхностных состояний, локализованными при энергиях ~ 5 eV для Mo(110) и ~ 6 eV для W(110) [15] (эта область не показана на рис. 1, a), а также рядом особенностей в области энергий $0-2.5$ eV. По мере напыления магния интенсивности особенностей, связанных с подложкой, ослабевают, и в спектрах появляются особенности, связанные с образованием квантовых электронных состояний в формируемой плёнке Mg(0001), которые обозначены на рис. 1 как QWS. По мере увеличения толщины плёнки магния энергии этих осо-

бенностей сначала изменяются ступенчатым образом, затем более плавно. Поверхностные резонансы (обозначенные на рис. 1 как SR), характерные для чистых поверхностей W(110) и Mo(110), по мере напыления магния постепенно переходят в особенности, связанные с поверхностными состояниями магния, локализованными при энергиях ~ 1.6 eV (Mg(SS)). При максимальных толщинах магниевого слоя, представленных на рисунке, пик при энергии $1.5-1.6$ eV — это уже поверхностное состояние Mg(SS). По мере увеличения толщины слоя квантовые состояния, расположенные ниже по энергии, чем Mg(SS), движутся в сторону уменьшения энергии связи, а состояния, расположенные выше, чем Mg(SS), увеличивают свою энергию связи. Более подробно изменения энергий формируемых квантовых состояний

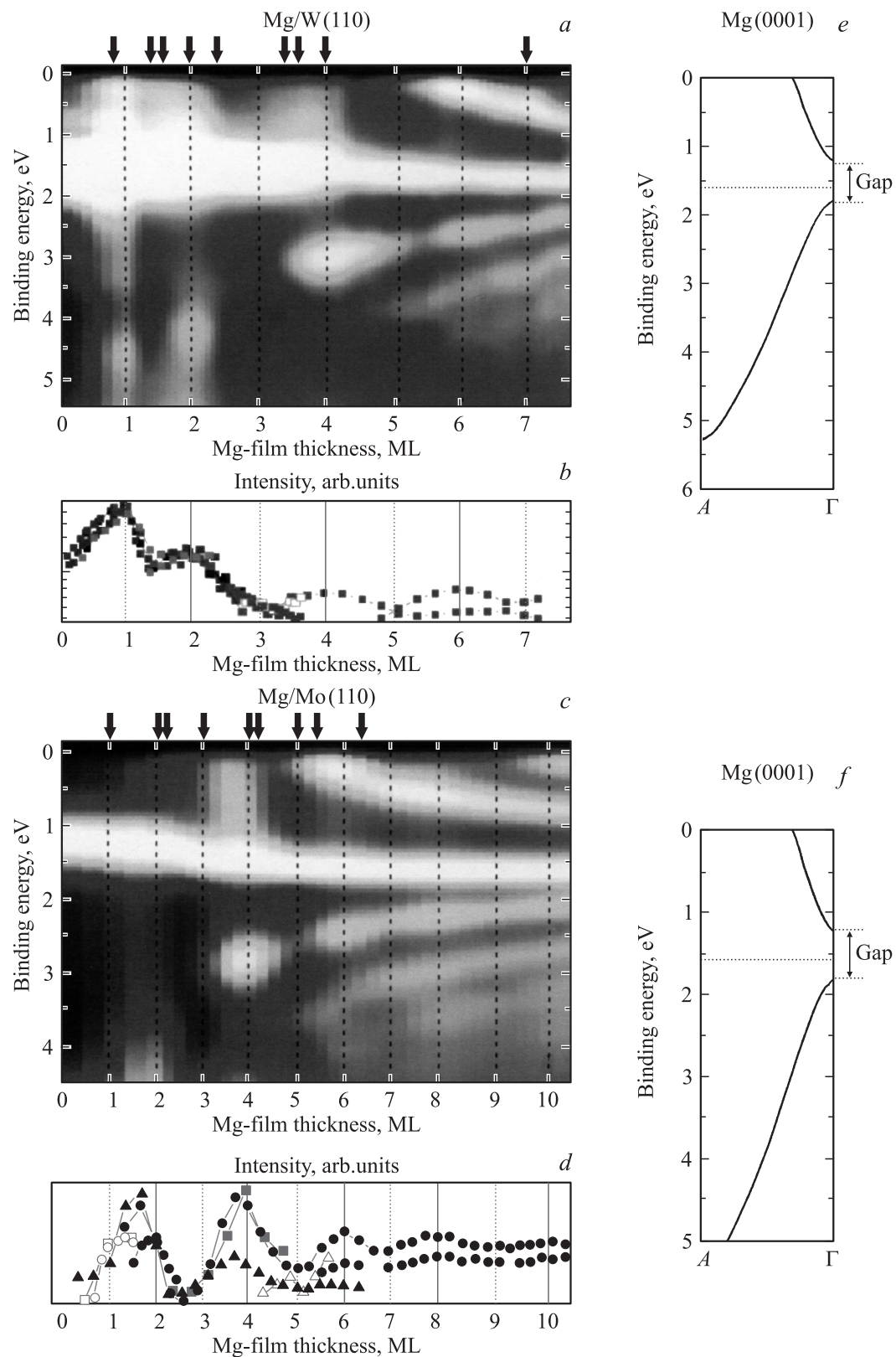


Рис. 2. Изменение энергий формируемых квантовых состояний в зависимости от толщины напыленного Mg-слоя на поверхности W(110) (a) и Mo(110) (c). Светлые области соответствуют большей интенсивности фотоэлектронной эмиссии, темные — меньшей. Стрелками показаны толщины слоев Mg, при которых производилось измерение дисперсионных соотношений $E(k)$. На частях b и d представлены интенсивности пиков квантовых состояний, формируемых в зависимости от толщины пленки. На частях e и f показаны зоны Mg(0001), в том числе отмечена запрещенная зона (gap) и энергия поверхностного состояния Mg(SS) (пунктирная линия). Различные символы соответствуют разным экспериментам.

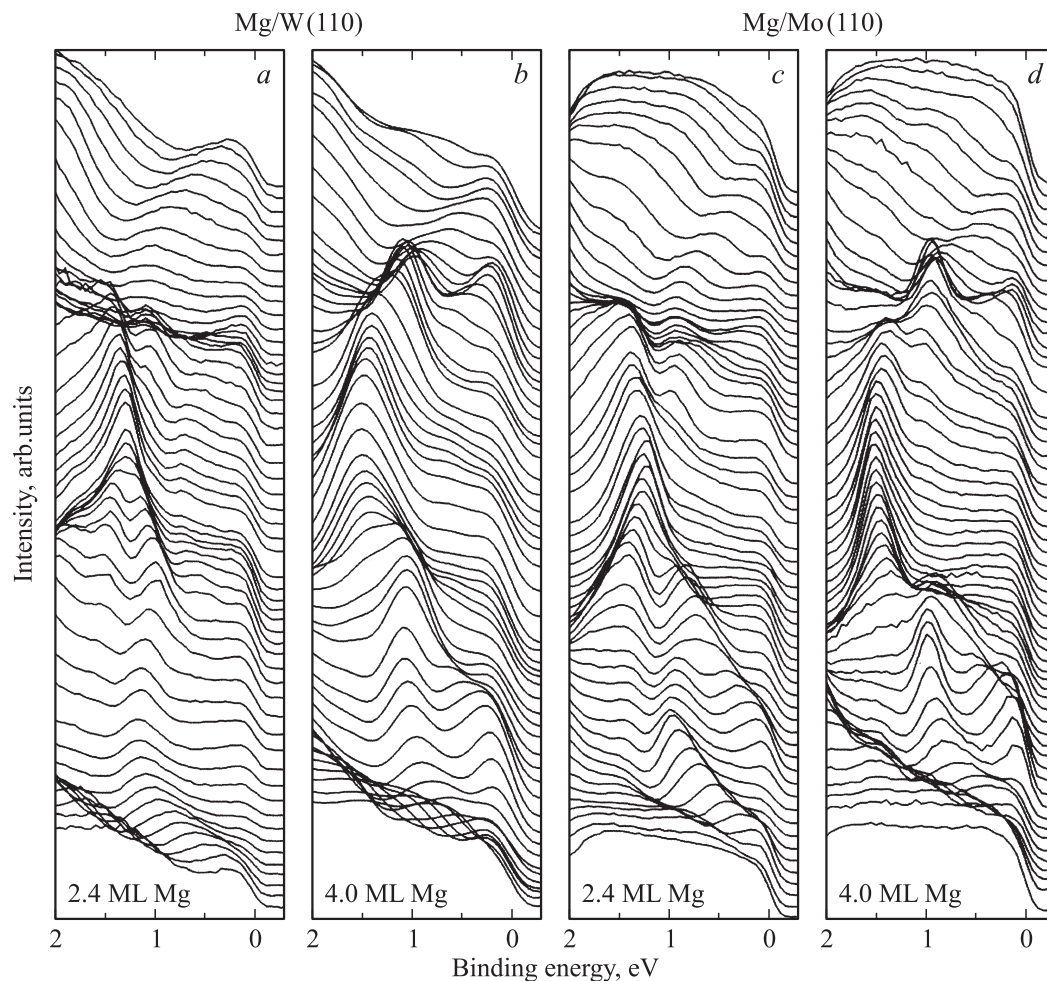


Рис. 3. Фотоэлектронные спектры в зависимости от угла вылета фотоэлектронов относительно нормали к поверхности для систем Mg/W(110) (*a, b*) и Mg/Mo(110) (*c, d*) для толщин пленок Mg ~ 2.4 и ~ 4.0 монослоя. Центральная часть соответствует области нормальной эмиссии. Спектры в верхней части рисунка соответствуют отрицательным полярным углам, в нижней — положительным полярным углам. Область изменения полярных углов $\pm 12^\circ$.

в зависимости от толщины напыленного слоя магния на поверхностях W(110) и Mo(110) представлены на рис. 2, *a, c* соответственно. Здесь уже более явно видно ступенчатое изменение энергий квантовых состояний с изменением толщины пленки. На рис. 2, *b, d* приведены изменения интенсивности формируемых квантовых состояний. При завершении строительства каждого нового монослоя интенсивность соответствующего квантового состояния достигает своего максимума, а затем по мере роста нового монослоя пик данного состояния уменьшается и исчезает из спектров, уступая место новому квантовому состоянию. Это состояние достигает своего максимума интенсивности уже при формировании следующего монослоя и т.д. При этом все формируемые квантовые состояния остаются в области локализации соответствующих состояний в электронной структуре Mg(0001) (рис. 2, *e, f*). Таким образом, каждой толщине формируемой магниевого пленки соответствует свой набор квантовых состояний (см. более подробно [13]), что было использовано в настоящей работе для точной оцен-

ки толщины формируемых пленок магния. При этом, как отмечалось ранее, каждой толщине слоя магния соответствует и свой набор дисперсионных соотношений $E(k)$ для формируемых квантовых и поверхностных состояний. Основной целью настоящей работы было проанализировать изменение возникающих дисперсионных соотношений и соответствующих расщеплений ветвей формируемых состояний для различных толщин магниевого пленки (см. далее). При этом при анализе использовалась калибровка толщины магневых слоев, произведенная именно по спектрам квантовых состояний, измеренных при нормальной эмиссии (перпендикулярно поверхности) (рис. 1 и 2). Толщины слоев, для которых производились измерение и анализ дисперсионных соотношений $E(k)$, показаны на рис. 2 стрелками.

3.2. Изменения дисперсионных соотношений для поверхностных и квантовых состояний в зависимости от толщины пленки магния. На рис. 3 представлены серии фотоэлектронных спектров в зависимости от угла вылета фотоэлек-

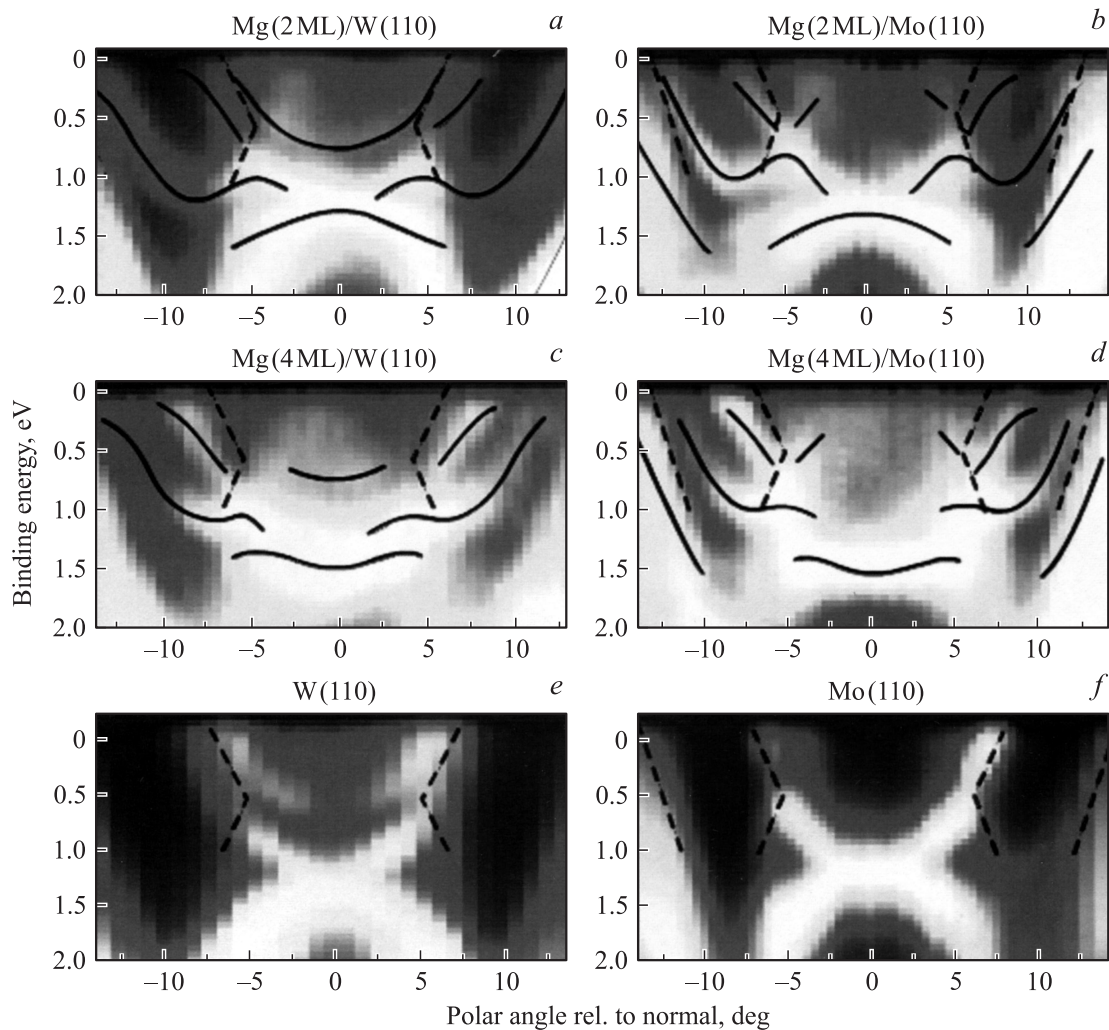


Рис. 4. Изменение дисперсионных зависимостей формируемых электронных состояний для систем Mg/W(110) (*a, c*) и Mg/Mo(110) (*b, d*) для толщин пленок Mg ~ 2 и ~ 4 монослоя. На частях *e* и *f* представлены аналогичные зависимости для атомарно-чистых поверхностей W(110) и Mo(110). Светлые области соответствуют большей интенсивности фотоэлектронной эмиссии, темные — меньшей. Штриховыми линиями отмечены края поверхностно-проектированных запрещенных зон вольфрама и молибдена.

тронов относительно нормали к поверхности для систем Mg/W(110) (рис. 3, *a, b*) и Mg/Mo(110) (рис. 3, *c, d*) для некоторых из анализируемых толщин, показанных на рис. 2, *a, c* стрелками. Для представленных серий фотоэлектронных спектров толщины пленок составляют 2.4 и 4.0 монослоя. Из анализа видно, что представленные спектры характеризуются наличием ветвей состояний, локализованных в области между ~ 1 eV и уровнем Ферми, которые наблюдаются при углах вылета фотоэлектронов в области $\sim 5-10^\circ$ относительно нормали к поверхности. Эти ветви состояний отсутствуют в спектрах для чистых поверхностей W(110) и Mo(110), появляются при напылении магния уже с толщины ~ 1 монослоя и изменяют свое энергетическое положение при изменении толщины слоя. Именно эти состояния являются предметом анализа в связи с эффектами индуцированного подложкой спин-орбитального

расщепления в работах [11,12]. Данные наборы спектров представлены на рис. 4 в виде зависимостей энергий особенностей от полярного угла вылета фотоэлектронов относительно поверхности. Представленные зависимости (диаграммы) могут рассматриваться как аналог дисперсионных соотношений, но не в зависимости от величины $k_{||}$, а в зависимости от величины полярного угла, отсчитываемого от нормали к поверхности. На рис. 4, *e, g* представлены экспериментальные зависимости для чистых поверхностей W(110) и Mo(110). Границы поверхностно-проектированных запрещенных зон для W(110) и Mo(110) показаны на рис. 4 штриховыми линиями. Видно, что для чистых поверхностей W(110) и Mo(110) никаких ветвей состояний, локализованных в запрещенной зоне, не существует. Но при напылении магния (уже при толщинах 1–2 монослоя) в области запрещенной зоны появляются ветви описанных выше

состояний. Эти состояния характеризуются существенной дисперсией энергии состояний в зависимости от величины полярного угла. При углах $5-8^\circ$ относительно нормали к поверхности они имеют энергию связи ~ 1 eV, а при увеличении полярного угла движутся в сторону уровня Ферми. В верхней части запрещенной зоны (при энергиях ~ 0.5 eV) при напылении магния также появляются дополнительные состояния. При увеличении толщины магниевого пленки состояния обоих типов движутся навстречу друг другу. Как видно из сравнения, при толщине в 2 монослоя (рис. 4, *a, b*) энергетическое расстояние между ними больше, чем для пленки с толщиной 4 монослоя (рис. 4, *c, d*).

Как указано выше, подобные дисперсионные зависимости были измерены при целом наборе толщин (обозначены на рис. 2, *a, c* стрелками), начиная от 1 монослоя и до толщин $\sim 8-10$ монослоев. На рис. 5, *a* и 6, *a* дисперсионные зависимости, измеренные при различных толщинах слоев магния на поверхностях W(110)

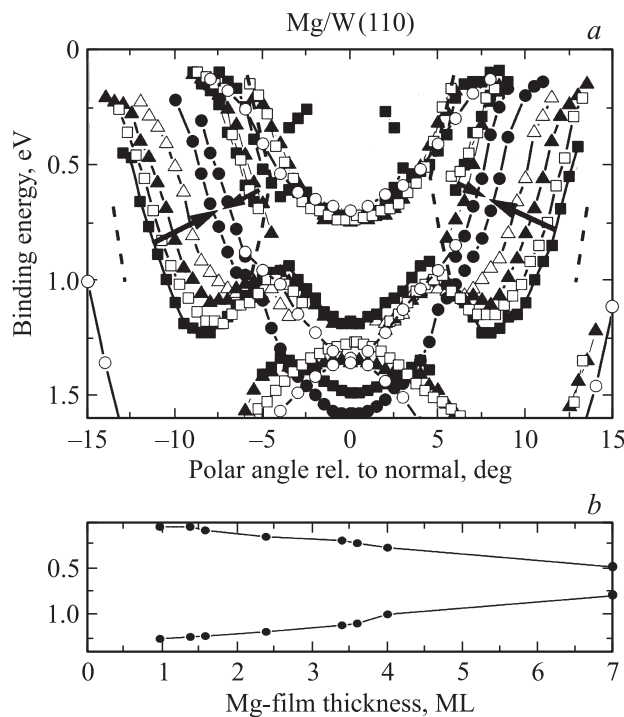


Рис. 5. *a*) Изменение дисперсий формируемых электронных состояний по мере увеличения толщин пленки в системе Mg/W(110). Направление, соответствующее увеличению толщины пленки, отмечено стрелками. Максимальные толщины обозначены темными кружками. Разность энергий между состояниями для толстых пленок Mg заметно меньше таковой в случае малых толщин. *b*) Изменение энергии формируемых состояний, измеренных при полярных углах $\pm 7^\circ$ относительно нормали к поверхности, в зависимости от толщины напыляемой пленки Mg. Различные символы на части *a* соответствуют разным толщинам пленок: темные квадраты — 1.6 монослоя, светлые квадраты — 2.4 монослоя, темные треугольники — 3.4 монослоя, светлые треугольники — 4.0 монослоя, темные кружки — 7.0 монослоев. Светлые кружки соответствуют чистой поверхности W(110).

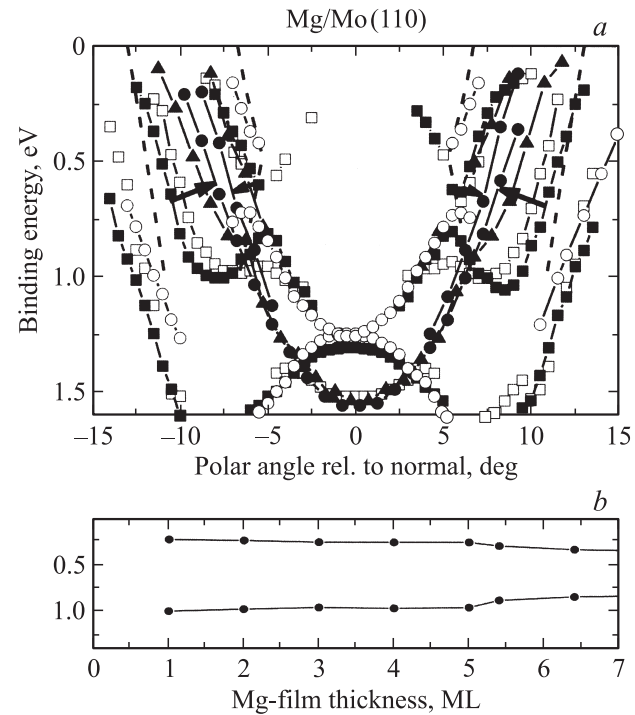


Рис. 6. То же, что на рис. 5, для системы Mg/Mo(110). Различные символы соответствуют разным толщинам пленок: темные квадраты — 2.0 монослоя, светлые квадраты — 4.0 монослоя, темные треугольники — 6.4 монослоя, темные кружки — 18 монослоев. Светлые кружки соответствуют чистой поверхности Mo(110).

и Mo(110), сведены вместе. При сравнительном анализе зависимостей, соответствующих различным толщинам магниевого пленки, видно, что отмеченные выше ветви состояний (которые сформированы на начальных стадиях напыления магния вблизи краев зоны запрещенных состояний) по мере роста пленки магния действительно движутся навстречу друг другу. Направление движения показано на рис. 5, *a* и 6, *a* стрелками. На рис. 5, *b* и 6, *b* представлены изменения энергий состояний, формируемых в запрещенной зоне в области полярных углов 7.5° относительно нормали к поверхности, по мере увеличения толщины пленки магния. Из анализа представленных зависимостей видно, что если при 1–2 монослоях Mg энергетическое расстояние между формируемыми состояниями составляет величину 0.8–1.2 eV, то при толщинах пленок 6–7 монослоев оно уменьшается до значений 0.35–0.5 eV. А при толщинах более 10 монослоев данные состояния уже можно представить себе как расщепленные поверхностные состояния пленки Mg(0001), что и было предположено в работах [11,12] при анализе природы этого расщепления. На рис. 5, *a* и 6, *a* дисперсионные зависимости для максимальных толщин, изученных в настоящей работе, показаны темными кружками. При сравнении результатов, полученных для систем Mg/W(110) и Mg/Mo(110), можно отметить, что как поведение зависимостей с увеличением

толщины слоя магния, так и величина наблюдаемого энергетического расщепления между формируемыми состояниями приблизительно одинаковы на обеих подложках. Исходя из большой величины энергетического расстояния между формируемыми состояниями при толщинах пленок $\sim 1-2$ монослоев ($0.8-1.2$ eV), можно сделать вывод, что интерпретация данных состояний как расщепленных поверхностных состояний магния Mg(SS) не может являться верной.

Для подтверждения данного предположения, с одной стороны, были проведены исследования перехода поверхностных резонансов подложки W(SR) и Mo(SR) в поверхностное состояние магниевой пленки Mg(SS) — с целью идентификации природы состояний при различных толщинах пленки магния, а с другой стороны — сравнительный анализ формируемых спектральных компонент внутреннего уровня $W(4f_{7/2})$. На рис. 7, а представлены изменения спектров валентной зоны в области поверхностного резонанса W(SR), измеренных в направлении нормали к поверхности. Можно выделить области, различающиеся энергией пика и поведением различных компонент в структуре пика по мере напыления магния. Детальные изменения энергий соответствующих пиков (компонент) при напылении магния на поверхность W(110) и Mo(110) представлены на рис. 7, б, с. Видно, что для обеих систем можно выделить три области изменения энергий пиков при переходе от W(SR) и Mo(SR) к Mg(SS). На рисунках эти области обозначены как I, II, III. Область I — это область толщин до 1 монослоя, в которой при напылении магния происходит ослабление интенсивности пиков W(SR) и Mo(SR) с небольшим увеличением (в пределах $0.05-0.1$ eV) энергии связи этих пиков. При толщинах более 1 монослоя спектры характеризуются появлением новой компоненты, сдвинутой в сторону увеличения энергий связи относительно первой на величину $\sim 0.1-0.15$ eV. Наблюдение данного энергетического смещения согласуется с результатами работы [16], в которой указывается на существование эффекта деполаризации атомов магния первого атомного слоя при напылении второго слоя. Из этого следует, что формирование пленки магния со структурой, соответствующей структуре объемного Mg(0001), происходит только при толщинах в два и более атомных слоя. По мере напыления магния энергия данной смещенной компоненты постепенно увеличивается, и она остается преобладающей в спектрах вплоть до толщины пленок 3–4 монослоя (область II). При толщинах более 3–4 монослоев в спектрах опять отмечается появление новой компоненты, энергетически сдвинутой относительно предыдущей. При дальнейшем напылении магния (область III) в спектрах наблюдается только данная компонента. Так как при толщинах слоя магния $\sim 7-8$ монослоев спектры характеризуются уже сформированным пиком Mg(SS), можно приписать компоненту, возникающую при толщинах более 3–4 монослоев, появлению поверхностного состояния Mg(SS), которое при дальнейшем напыле-

нии магния несколько изменяет свое энергетическое положение. Из изложенного выше анализа особенностей спектра валентной зоны можно заключить, что поверхностное состояние Mg(SS) проявляется в спектрах только при толщинах пленки более 3–4 монослоев. При этом состояния в областях I и II и их изменение следует связывать скорее с изменением поверхностных резонансов подложки W(SR) и Mo(SR) при напылении магния, чем с расщеплением поверхностных состояний магния. Чтобы проверить данное заключение, мы измерили спектры внутреннего уровня $W(4f_{7/2})$ для чистой поверхности W(110) и их изменение по мере напыления магния (представлены на рис. 8, а). Видно, что для чистой поверхности W(110) спектры характеризуются объемной компонентой (B) и интенсивной поверхностной компонентой (S), расположенной при меньших энергиях связи. Такая структура спектров $W(4f)$ типична для атомарно-чистой поверхности W(110) (см., например, [17]). По мере напыления магния компонента B переходит в компоненту B', а поверхностная компонента S ослабляется, и на ее месте появляется новая компонента I, сдвинутая энергетически относительно исходной компоненты S. Детальная картина изменений энергии и интенсивности отмеченных компонент представлена на рис. 8, б, с. Видно, что компонента S полностью затухает при толщинах ~ 1 монослоя магния. Компонента I также появляется при монослойных покрытиях магния. При этом ее энергия сдвинута относительно компоненты S на величину ~ 0.15 eV. При дальнейшем напылении компонента I несколько изменяет свою энергию, и разница в энергиях компонент S и I становится ~ 0.1 eV. Переход от компоненты B к компоненте B' также сопровождается некоторым изменением энергии. Интенсивность компоненты B не уменьшается до нуля при толщинах 1–2 монослоя, как ожидается при послойном росте, который в данном эксперименте подтверждается формированием соответствующих спектров квантовых состояний (см. для сравнения [13]). Компонента B постепенно переходит в B', которая уже не является чистым поверхностным резонансом, а, скорее, обусловлена (как и компонента I) взаимодействием на межфазовой границе между атомами W и Mg и соответствующими состояниями.

4. Обсуждение результатов

Представленные на рис. 8 изменения спектров внутреннего уровня $W(4f_{7/2})$ являются индикатором изменения состояния поверхностных атомов W при взаимодействии с Mg. При сравнении спектров внутренних уровней и валентной зоны (рис. 7 и 8) обращает на себя внимание то, что энергетический сдвиг особенностей спектров при переходе от W(SR) к Mg(SS) при толщинах слоя магния в 1 монослой имеет те же величину и направление (в сторону уменьшения величины связи), что и наблюдаемый сдвиг в $W(4f)$ спектрах при пере-

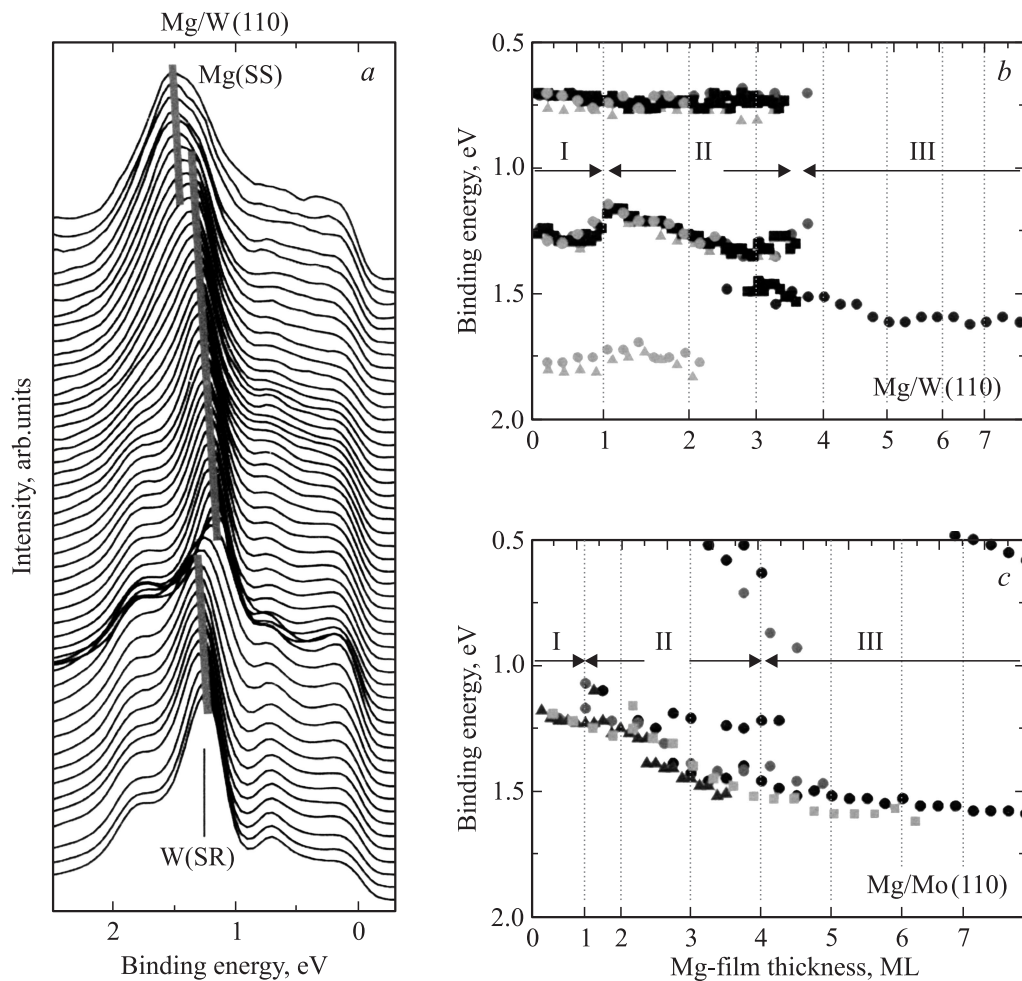


Рис. 7. Изменение спектров валентной зоны в области поверхностного резонанса W(SR) в процессе напыления Mg на поверхность W(110) (a), а также изменение энергий пиков при напылении Mg на поверхность W(110) (b) и Mo(110) (c) начиная с субмонослойных покрытий. Измерения проводились в направлении нормали к поверхности системы. Переход от W(SR) к Mg(SS) включает три отличные друг от друга области: I — до 1 монослоя, II — от 1 до 3–4 монослоев, III — более 3–4 монослоев. Различные символы соответствуют разным экспериментам.

ходе от *S*- к *I*-компоненте. Это может свидетельствовать о том, что наблюдаемые на рис. 7 (а также на рис. 5 и 6) изменения спектров валентной зоны и сами формируемые особенности при толщинах пленки ~ 1 –2 монослоя связаны именно с влиянием подложки и изменением состояния поверхностных атомов вольфрама (или молибдена) при адсорбции атомов магния. Таким образом, для таких толщин поверхностные состояния в магниевой пленке еще не сформированы, и наблюдаемое „расщепление“ состояний никак не может являться расщеплением поверхностных состояний Mg под действием спин-орбитального взаимодействия, индуцированного подложкой (как предполагалось в работах [11,12]). Скорее, это связано с формированием соответствующих межфазных гибридных (W–Mg)- и (Mo–Mg)-состояний и их изменением по мере увеличения концентрации атомов магния на поверхности. Именно таким изменяющимся взаимодействием и обусловлено изменение „расщепления“ состояний, наблюдаемое в области II,

при толщинах от 1 монослоя до 3–4-монослоев. Именно оно обуславливает формирование компоненты *I* в спектрах W($4f_{7/2}$), а также переход от компоненты *B* к *B'*. Особенности спектров валентной зоны, которые можно приписать поверхностному состоянию Mg(SS), формируются только при толщинах магневых пленок более 3–4 монослоев. На это указывает то, что новая энергетическая компонента, которая плавно переходит в поверхностное состояние Mg(SS), характерное для толстого слоя Mg(0001), появляется в спектрах только при этих толщинах. На основании данного анализа можно сделать вывод, что наблюдаемые в экспериментах изменения валентной зоны, заключающиеся в формировании ветвей состояний в области запрещенной зоны вблизи ее краев при толщинах слоя магния менее 3–4-монослоев, не могут быть обусловлены расщеплением поверхностных состояний магния в результате спин-орбитального взаимодействия, индуцированного подложкой. Они органически связаны, скорее, с состо-

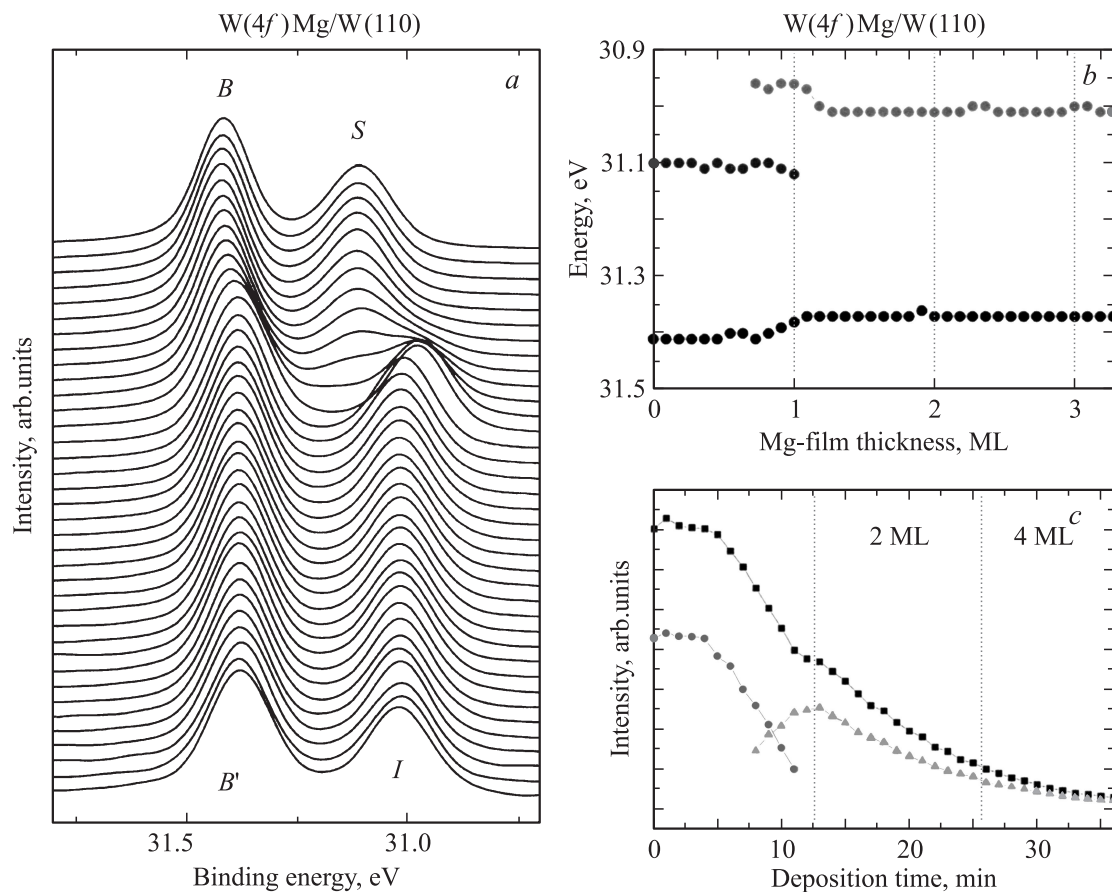


Рис. 8. Изменение спектров внутреннего уровня $W(4f_{7/2})$ (a), энергий (b) и интенсивностей (c) различных компонент спектра по мере увеличения толщины пленки Mg в системе Mg/W(110). Верхние спектры на части a соответствуют атомарно-чистой поверхности вольфрама, нижние — 3 монослоям Mg. На спектрах для чистого вольфрама показаны объемная (B) и поверхностная (S) компоненты. Отмечены также компоненты B' и I, формируемые при напылении Mg. Различные символы соответствуют разным экспериментам.

яниями, обусловленными подложкой и соответствующими межфазными гибридными состояниями W(Mo)–Mg. Более того, если сравнить соответствующие величины „расщепления“ состояний, формирующихся в области запрещенной зоны при напылении магния на поверхности W(110) и Mo(110), видно, что при одних и тех же толщинах они сравнимы и изменяются аналогичным образом. Вольфрам имеет больший атомный номер ($z = 74$), чем молибден ($z = 42$), что обуславливает существенно большую величину соответствующего атомного спин-орбитального расщепления. Так, например, для W(5d)-оболочек величина атомного спин-орбитального расщепления равна 0.45 eV, в то время как для Mo(4d)-оболочек величина расщепления равна 0.12 eV [10]. Если, как предполагалось в [11], расщепление состояний, формирующихся в запрещенной зоне при напылении магния, обусловлено индуцированным подложкой спин-орбитальным взаимодействием, в этом случае величина расщепления должна быть существенно больше чем для системы Mg/W(110). Однако, как видно из рис. 5 и 6, величина „расщепления“ между формируемыми состояниями приблизительно одинакова

для обеих систем — для всех толщин напыляемых слоев. Более того, величина „расщепления“ состояний, формируемых в области запрещенной зоны подложки, при толщинах слоя магния ~ 1 –2 монослоя достигает значений ~ 1 eV, что даже больше величины атомного спин-орбитального расщепления.

Таким образом, согласно нашим исследованиям, предположение об индуцированной подложкой спин-орбитальной природе данного расщепления, высказанное в работе [11], является неверным. С нашей точки зрения, как формирование данных состояний, так и изменение их энергетического положения с изменением толщины напыленного слоя магния обусловлено взаимодействием (гибридизацией) поверхностных резонансов подложки с состояниями, формируемыми при адсорбции магния. Состояния, формируемые при толщинах слоя магния в 1–2 монослоя, скорее отщепляются от верхнего и нижнего краев запрещенной зоны. Изменение их энергетического положения с толщиной напыленного слоя магния обусловлено перераспределением вкладов подложки и напыляемого металла в формируемые состояния.

Другое альтернативное объяснение наблюдаемого „расщепления поверхностных состояний“ в тонких пленках магния на поверхности $W(110)$ было предложено в работе [12]. Авторы данной работы предполагали, что отмеченные выше состояния являются невырожденной парой четных и нечетных состояний по отношению к отражению в направлении, перпендикулярном толщине пленки (z). Наличие такого расщепления поверхностных состояний требует значительного взаимодействия через пленку, которое возможно в предположении глубокого проникновения поверхностных состояний магния в объем пленки. Данное объяснение наблюдающегося расщепления было предложено на основании расчетов для свободного подвешенного (изолированного) слоя $Mg(0001)$ — для поверхностных состояний, локализованных в z -направлении, т.е. в направлении нормальной эмиссии. При этом величина расщепления, согласно расчетам [12], должна зависеть от толщины пленки и уменьшаться по мере ее увеличения. Однако данная интерпретация нам также представляется ошибочной по следующим причинам.

1) Никакого расщепления состояний и изменения величины расщепления по мере напыления Mg в направлении нормальной эмиссии ни для системы $Mg/W(110)$, ни для системы $Mg/Mo(110)$ не наблюдается (рис. 3–7). Более того, подобного расщепления не наблюдалось и для другой аналогичной системы $Mg/Si(111)$ [18], где все изменения спектров валентной зоны были описаны с других позиций.

2) Неясно, почему возможное z -расщепление, предсказанное для подвешенной изолированной пленки $Mg(0001)$ — без взаимодействия на границах с подложкой, должно оставаться таким же после нанесения этой пленки на поверхность вольфрамовой подложки, т.е. при внесении существенного взаимодействия с подложкой на границе пленки. Можно привести примеры систем, когда z -расщепление, получаемое в расчетах для свободного слоя, исчезает после введения каких-либо добавок на границах слоя, как например при размещении 1 моно-слоя атомов водорода на границе изолированного слоя $Bi(1000)$ [19].

3) Из рис. 4 видно, что для малых толщин слоя магния (по крайней мере меньше 2 монослоев) рассматриваемые состояния в области поверхностно-проектированной запрещенной зоны являются, скорее, вольфрамовыми состояниями, отщепленными от краев зоны, и их нельзя рассматривать как состояния, обусловленные поверхностным состоянием Mg .

Таким образом, согласно нашему анализу, обе интерпретации появления „расщепленных“ состояний в области запрещенной зоны $W(110)$ и $Mo(110)$ при напылении магния и с энергией, близкой к энергии поверхностного состояния $Mg(SS)$, предложенные в работах [11,12], являются ошибочными. Мы предполагаем, что в основе наблюдаемых процессов лежит не расщепление поверхностных состояний магния, а их ги-

бридизация с состояниями подложки, локализованными первоначально вблизи края запрещенной зоны.

Формирование спин-орбитально расщепленных состояний, индуцированных влиянием подложки и локализованных в области запрещенной зоны, действительно наблюдалось, но только для тонких слоев Au и Ag на поверхности $W(110)$ [20]. Данные состояния наблюдались в области нижней ветви состояний, формируемой для системы $Mg/W(100)$. Только в случае пленок магния данная ветвь является нерасщепленной, а для пленок золота имеет место ее расщепление, обусловленное индуцированным спин-орбитальным взаимодействием с величиной спинового расщепления ~ 0.45 eV. Мы предполагаем, что отсутствие спин-орбитально расщепленных состояний в пленке магния на поверхности $W(110)$ как раз и обусловлено существенным взаимодействием состояний W , отщепляющихся от краев поверхностно-проектированной запрещенной зоны вольфрама, с появляющимися при адсорбции поверхностными состояниями Mg , которые также локализованы в данном энергетическом интервале. Для пленок $Au(111)$ и $Ag(111)$, формирующихся на поверхности $W(110)$, поверхностные состояния локализованы при энергиях связи ~ 0.35 и 0.1 eV соответственно. Таким образом, они расположены энергетически существенно дальше от верхнего края запрещенной зоны в электронной структуре $W(110)$ по сравнению с поверхностными состояниями пленки $Mg(0001)$. Поэтому поверхностные состояния Au и Ag не взаимодействуют с отщепляющимися состояниями вольфрама и не нарушают условий для проявления эффектов индуцированного подложкой спин-орбитального расщепления электронных состояний.

5. Заключение

Проведенные исследования электронных состояний, появляющихся при напылении магния на поверхности $W(110)$ и $Mo(110)$ в поверхностно-проектированной запрещенной зоне подложки, и их модификации по мере роста толщины пленки магния показали следующее.

1) Электронные состояния, локализованные в области запрещенной зоны $W(110)$ и $Mo(110)$, обнаруживаются в фотоэлектронных спектрах уже при толщинах слоя магния в 0.5 – 1 монослой. На этих стадиях напыления магния данные состояния локализованы в области верхнего и нижнего краев запрещенной зоны и проявляются, скорее, как состояния, отщепленные от краев запрещенной зоны в электронной структуре $W(110)$ и $Mo(110)$.

2) По мере напыления магния энергетическое расстояние между данными состояниями уменьшается. Если при толщинах слоев магния ~ 1 – 2 монослоя энергетическое расстояние между ними ~ 1 eV (при полярных углах относительно нормали к поверхности ~ 7 – 8° , где они наиболее ярко выражены), то при толщинах ~ 4 монослоев величина энергетического расстояния между

ними уменьшается до $\sim 0.5\text{--}0.6\text{ eV}$, и при толщинах $\sim 7\text{--}8$ монослоев достигает величины $\sim 0.3\text{ eV}$.

3) При напылении магния особенности, связанные с поверхностными резонансами подложки, локализованными при энергиях связи $\sim 1.2\text{ eV}$, постепенно переходят в поверхностное состояние магния, локализованное для толстых слоев Mg(0001) при энергиях $\sim 1.6\text{ eV}$. Детальный анализ показывает, что данный переход W(SR)–Mg(SS) можно разделить на три ступени: область I (0–1 монослоя), область II (1–4 монослоя), область III (свыше 4 монослоев). Аналогичным образом ведут себя поверхностные и объемные компоненты, которые можно выделить при анализе W_{4f} -спектров внутренних уровней. Сравнительный анализ энергетических сдвигов показал аналогичность поведения пика W(SR)–Mg(SS) в валентной зоне и W_{4f} -компонент внутренних уровней в областях I и II магниевых покрытий. Это позволило сделать вывод о том, что состояния, формирующиеся при малых толщинах слоя магния (менее 2 монослоев), происходят из состояний подложки, отщепленных в область запрещенной зоны. При толщинах более 4–5 монослоев наблюдаемые изменения энергии состояний, появляющихся в запрещенной зоне подложки (уменьшение энергетического расстояния между ними), можно объяснить формированием гибридных межфазных (W–Mg) состояний, а их изменения с толщиной — как обусловленные изменением (увеличением) вклада поверхностных состояний магния.

- [15] A.M. Shikin, A. Varykhalov, G.V. Prudnikova, V.K. Adamchuk, W. Gudat, O. Rader. Phys. Rev. Lett. **93**, 146 802 (2004).
- [16] L. Aballe, A. Barinov, A. Locatelli, T.O. Mentis, M. Kiskinova. Phys. Rev. B **75**, 115 411 (2007).
- [17] A. Varykhalov, O. Rader, V.K. Adamchuk, W. Gudat, B.E. Koel, A.M. Shikin. Phys. Rev. B **75**, 205 417 (2007).
- [18] L. Aballe, C. Rogero, P. Kratzer, S. Gokhale, K. Horn. Phys. Rev. Lett. **87**, 156 801 (2001); L. Aballe, C. Rogero, K. Horn. Phys. Rev. B **65**, 125 319 (2002).
- [19] Yu.M. Koroteev, G. Bihlmayer, J.E. Gayone, E.V. Chulkov, S. Blugel, P.M. Echenique, Ph. Hofmann. Phys. Rev. Lett. **93**, 046 403 (2004); J.I. Pascual, G. Bihlmayer, Yu.M. Koroteev, H.-P. Rust, G. Geballos, M. Hansmann, K. Horn, E.V. Chulkov, S. Blugel, P.M. Echenique, Ph. Hofmann. Phys. Rev. Lett. **93**, 196 802 (2004).
- [20] A.M. Shikin, A. Varykhalov, G.V. Prudnikova, D. Usachev, V.K. Adamchuk, Y. Yamada, J. Riley, O. Rader. Phys. Rev. Lett. **100**, 057 601 (2008).

Список литературы

- [1] Semiconductor spintronics and quantum computator / Eds D.D. Awschalom, D. Loss, N. Samarth. Springer-Verlag, Berlin (2002).
- [2] F.J. Himpsel, J.E. Ortega, G.J. Mankey, R.F. Willis. Adv. Phys. **47**, 511 (1998).
- [3] Е.И. Рашба. ФТТ **2**, 1224 (1960).
- [4] S. Datta, B. Das. Appl. Phys. Lett. **56**, 665 (1990).
- [5] S. LaShell, B.A. McDougall, E. Jensen. Phys. Rev. Lett. **77**, 3419 (1996).
- [6] M. Hoesch, M. Muntwiler, V.N. Petrov, M. Hengsberger, L. Patthey, M. Shi, M. Falub, T. Greber, J. Osterwalder. Phys. Rev. B **69**, 241 401(R) (2004).
- [7] E. Rotenberg, S.D. Kevan. Phys. Rev. Lett. **80**, 2905 (1998).
- [8] M. Hochstrasser, J.G. Tobin, E. Rotenberg, S.D. Kevan. Phys. Rev. Lett. **89**, 216 802 (2002).
- [9] G. Nicolay, F. Reinert, S. Hufner, P. Blaha. Phys. Rev. B **65**, 033 407 (2002).
- [10] E. Rotenberg, J.W. Chung, S.D. Kevan. Phys. Rev. Lett. **82**, 4066 (1999).
- [11] C. Koitzsch, C. Battaglia, F. Clerc, J. Despont, M.G. Garnier, P. Aebi. Phys. Rev. Lett. **95**, 126 401 (2005).
- [12] F. Schiller, R. Keyling, E.V. Chulkov, J.E. Orgega. Phys. Rev. Lett. **95**, 126 402 (2005).
- [13] Н.А. Виноградов, Д.Е. Марченко, А.М. Шикин, В.К. Адамчук, О. Радер. ФТТ **51**, 1, 167 (2009).
- [14] R.H. Gaylord, S.D. Kevan. Phys. Rev. B **36**, 9337 (1987); K. Jeong, R.H. Gaylord, S.D. Kevan. Phys. Rev. B **38**, 10 302 (1988).