



IKER  
GAZTE  
NAZIOARTEKO  
IKERKETA EUSKARAZ

## II. IKERGAZTE

NAZIOARTEKO IKERKETA EUSKARAZ

2017ko maiatzaren 10, 11 eta 12  
Iruñea, Euskal Herria

ANTOLATZAILEA:  
Udako Euskal Unibertsitatea (UEU)

### ZIENTZIAK ETA NATURA ZIENTZIAK

**Spin-orbita akoplamenduak  
eragindako elektroifonoi  
elkarrekintzaren ezabapena  
Ti/Si(111) gainazalean**

*Peio G. Goiricelaya,  
Idoia G. Gurtubay eta Asier Eiguren*

138-145 or.

<https://dx.doi.org/10.26876/ikergazte.ii.05.20>

ANTOLATZAILEA:



ELKARLANEAN:



LAGUNTZAILEAK:



UDALBILTZA



Universidad  
de Navarra

# Spin-orbita akoplamenduak eragindako elektroifonoi elkarrekintzaren ezabapena Tl/Si(111) gainazalean

Peio G. Goiricelaya eta Idoia G. Gurtubay eta Asier Eiguren<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Materia Kondentsatuaren Fisika Saila, Zientzia eta Teknologia Fakultatea, Euskal Herriko Unibertsitatea. Sarriena auzoa, z/g. 48080 Bilbo.

<sup>2</sup> Donostia International Physics Center (DIPC). Manuel Lardizabal Pasealekua 4. 20018 Donostia.

## Laburpena

Spin-orbita eta elektroifonoi akoplamenduen arteko elkarreagina aztertzen dugu Tl/Si(111) gainazalean, spinaren askatasun-gradua esplizituki kontsideratuz. Schrödingerren ekuazioaren zuzenketa erlatibista eskalarrak bakarrik aintzat hartzen ditugunean, gainazal elektroifonoak eta bibrazio-modoak bortizki akoplatuta daudela aurkitzen da. Aldiz, spin-espazioa elektroien uhin-funtzioen deskribapenean barnehartzean, elektroifonoi elkarrekintza txikiagotu daiteke, baita erabat ezabatu ere, hasiera eta amaierako spin-egoeren gainezarmenaren arabera.

**Hitz gakoak:** elektroifonoi elkarrekintza, spin-orbita akoplamendua, gainazalen fisika, lehen-printzipioetan oinarritutako kalkuluak

## Abstract

*We study the interplay between the spin-orbit and the electron-phonon coupling considering explicitly the spin degree of freedom at the Tl/Si(111) surface. It is found that the surface states are very strongly coupled to the surface vibrational modes when only scalar relativistic corrections of the Schrödinger equation are taken into account. However, when the spin space is included in the wave-function definition, the electron-phonon interaction appears strongly modulated, or even completely suppressed, depending on the overlap of the initial and final electron spin states.*

**Keywords:** electron-phonon interaction, spin-orbit coupling, surface physics, first-principles calculations

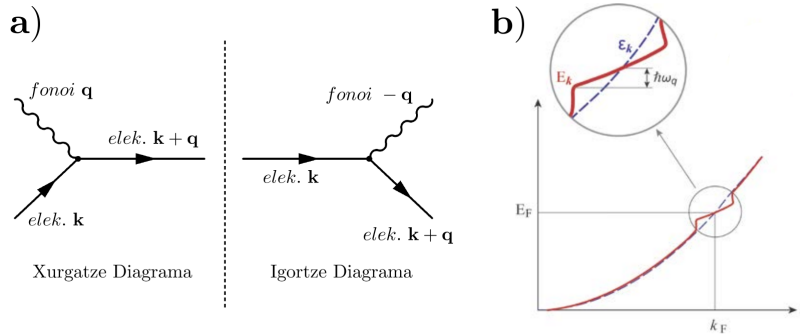
## 1 Sarrera eta motibazioa

Fonoiek kristal baten atomoen bibrazio kolektiboen kitzikapenak deskribatzen dituzte mekanika kuantikoaren ikuspuntutik (Ashcroft eta Mermin, 1976). Bibrazio kolektiboak, edo modu normalak, kristalaren osagaien higiduraren patroiak dira, zeinetan sistema baten partaide guztiek maiztasun berdin eta fase-erlazio finko batekin oszilatzen duten.

Fonoiek eta elektroiek elkarri eragin diezaizkete kristalean, batez ere Fermiren energiatik ( $E_F$ ) gertu, non karga-eramaileak kitzika daitezkeen bibrazio moduak xurgatuz edo igorrituz (Grimvall, 1981). 1(a) Irudian fonoiaren xurgatze eta igortze diagramak irudikatuta daude. Gorputz-anitzen elkarrekintza honen ondorioz, bai elektroiek bai fonoiak haien ingurua aldarazten dute, partikulak eta bibrazio kolektiboak kitzikatuz. Baina aldi berean, aldaketa hauek biek paraitzen dituzten indarrak aldatzen dituzte. Hortaz, elektroifonoi akoplamenduak karga-eramaileen zein bibrazio normalen egoerak perturbatzen ditu, haien dispertsio erlazioak eta bizidenborak aldatuz (Grimvall, 1981). 1(b) Irudian  $\omega_{\mathbf{q}}$  energiako fonoi batek eragindako egoera elektronikoen dispertsioaren birnormalizazioa erakusten da. Halaber, elektroifonoi elkarrekintzak kitzikatutako elektroifonoi nahiz fonoi egoeren bizidenborak finituak bihurtzen ditu. Zenbat erlazio izan akoplamendua, orduan eta laburragoa da bizidenbora.

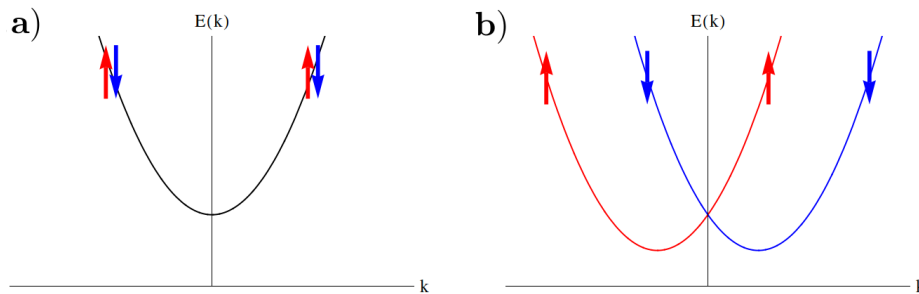
Izan ere, elektroifonoi arteko akoplamendua ezinbestekoa dugu hainbat fenomeno fisiko ulertzeko, esate baterako, beroaren edo elektroien garraioa edo supereroankortasuna (Grimvall, 1981). Bestalde, kristalaren dimentsioa txikitzen dugunean, solidoaren barnealdean debekatuta dauden elektroifonoak eta sareko bibrazio modu bereziak agertzen dira. Inguru berri horrek fonoiaren bitartez gauzatzen den

1 Irudia: (a) Elektroi-fonoi akoplamenduaren bidez ematen diren sakabanaketa-prozesuak. Xurgatze (ezkerrean) eta igortze (eskuinean) diagramak.  $\mathbf{k}$  momentuko elektroiek  $\mathbf{q}$  ( $-\mathbf{q}$ ) momentuko fonoiak xurgatzen (igortzen) du. Bietan bai momentua bai energia kontserbatzen dira. (b)  $\omega_{\mathbf{q}}$  energiako fonoi batek eragindako elektroien dispersioaren birnormalizazioa  $E_F$ -tik gertu.



elektroi-sakabanaketaren trantsizio berriak sor ditzake, eta elektroien elkarrekintza handiagoa. Azken bi hamarkadetan, horrelako joerak gainazalean ematen direla egiaztatuta da, bai alde teorikotik, bereziki lehen-printzipioetan oinarritutako kalkuluei esker (Eiguren *et al.*, 2003; Giustino, 2017), zein experimentalatik, batez ere angeluz bereizitako fotoemisio (ARPES ingelesez) teknikari esker (Hufner, 1995). Beraz, elektroien elkarrekintzak gainazalean eragin nabarmena izan dezake. Kasurako, bere barnealdean supererokorra ez den material bat gainazalean izan daiteke, aplikazio mundu zabal bati atea irekiz.

2 Irudia: (a) Elektroien dispersio erlazioa inbertsio-espazial eta inbertsio-denbora simetriki dituen inguru batean. (b) Inbertsio-espazial simetria apurtuz gero, spin-orbita akoplamenduak spin-proiektzio ezberdinak dituzten egoerak banantzen ditu.



Aldi berean, azken hamarkadatik hona, elementu astunak (zenbaki atomikoa  $Z > 72$ ) estalitako gainazalek jakingura piztu dute spintronikan, hau da spinaren askatasun-graduan oinarritutako elektronikan (Žutić *et al.*, 2004). Spintronikak karga-eramaileen spina erabiltzen du memoria unitate bezala, eta datuak transferitzeko edo biltegitzeko askoz eraginkorragoa da gaurko elektronikaren aldean. Spina oinarritutako partikulen berezko momentu angeluarra da eta momentu magnetikoa ematen die spindun partikulei. Halaber, kristaletan, elektroiek abiadura erlatibistetan eremu elektriko batekiko mugitzen direnez, eremu magnetiko efektibo bat sumatzen dute, zeina momentu angeluar orbitalarekin lotura duen. Argi dago eremu magnetiko hori eta elektroien berezko momentu magnetikoa akoplatzen direla. Elkarrekintza honi spin-orbita akoplamendua deitzen diogu (Sakurai, 1994).

2. Irudiak elektroien dispersio-erlazioa erakusten du. 2(a) Irudian, solidoen barnealdean inbertsio-espaziala eta inbertsio-denbora simetrikiak betetzen direnez, elektroien egoerak spin-endeakaturik daude. 2(b) Irudian, haatik, inbertsio-espaziala apurtzean momentu berdina baina spin proiektzio ezberdinak dauzkatelako elektroien egoerak banantzen daude, spin-orbita akoplamenduaren eraginez. Gainazalean inbertsio-espaziala apurtuta dagoenez, horrelako fenomenoak ematen dira. Izan ere, gertakari hau oso interesgarria da spinean oinarritutako aplikazioetarako, kanpoko eremu magnetikorik ez dagoen arren aurkako spin-polarizazioak bereizteko gai garelako.

Spin-orbita akoplamenduak sortutako egoera-banantzea energiako eskalarik txikiena izaten da ( $\sim 1-10$  meV) (Ast *et al.*, 2007). Hortaz, horrek ez du eragin handirik izaten elektroifonoi elkarrekintza aztertzen denean. Halatan, spin-orbita terminoa aintzat hartzea ez da ohikoa izan kalkulu teorikoetan. Elementu astunek estalitako gainazaletan berriz, spin-orbita akoplamendua “erraldoia” izaten da eta fonoi-energien ordenekoa izan daiteke ( $\sim 100$  meV), edo are handiagoa. Beraz, gainazal horietan gertatzen den elektroifonoi elkarrekintza zeharo aztertu nahi izanez gero, spin-orbita akoplamendua esplizituki kontuan hartu behar dugu.

## 2 Arloko egoera eta ikerketaren helburuak

Lehen-printzipioetan oinarritutako lan oso gutxik izan dute interesa elektroifonoi eta fonoiaren arteko elkarrekintzan spin-orbita akoplamenduak duen paperan (Sklyadneva *et al.*, 2013; Alcántara Ortigoza *et al.*, 2014), eta izan dutenek ez diote arreta jarri spin-espazioa esplizituki barnehartzeak duen ondorioari. Hala eta guztiz ere, Holstein eta Fröhlich hamiltondar eredu hurbilduetan oinarritzen diren lan batzuek bai ekin diote ikergai honi, baina, spin-orbita akoplamendua kontuan hartzean ere Rashba eredu sinplifikatua erabiltzen dute.

Horren harira, baldin eta Fermiren maila elektroifonoi baten muturretan badago, spin-orbita akoplamendua aintzat hartzean, elektroifonoi elkarrekintza areagotzen dela behatu dute (Cappelluti *et al.*, 2007). Antzerako emaitzak experimentalki ere lortu dira (Ast *et al.*, 2007). Beste lanek, ordea, spin-orbita akoplamenduak elektroifonoi elkarrekintza txikitzen duela egiaztatu dute, elektroifonoi elkarrekintza bera ere handia denean (Li *et al.*, 2011). Beraz, nahiz eta lan hauek oso esanguratsuak eta ildo honen abiapuntua izan, gaur egun ez dago argi zein den spin-orbita terminoaren eragina elektroifonoi elkarrekintzaren gainean. Bestalde, txosten hauek, hamiltondar eta spin-orbita akoplamendu eredu hurbilduetara mugatzen dira, eta dispertsiorik gabeko fonoiak erabiltzen dituzte. Izan ere, benetako materialak irudi hurbildu horretatik oso urrun daude.

Ikerketa honen helburu nagusia benetako gainazal batean spin-orbita eta elektroifonoi akoplamenduen arteko elkarrekintza aztertzea da, lehen-printzipioetan oinarritutako kalkuluak erabiliz. Honetarako, spin-orbita akoplamendu oso handia duen Talio (Tl Z=81) atomoak estalitako silizio (Si Z=14) erdieroalearen gainazal bat aukeratu dugu.

Propietate elektroniko eta bibrazionalen azpiatalean erakusten den moduan, Tl/Si(111) gainazalak bolumentetik oso garbiki azaltzen diren elektroifonoi zein fonoi egoerak ditu, eta, hortaz, gainazal elektroifonoiaren eta bibrazioen arteko akoplamendu handia aurreikus daiteke. Era berean, fonoirik baxuenek dituzten energiak spin-orbita elkarrekintzak sortutako egoera-banantzearen energia baino txikiagoak dira; hori dela eta, lehenago aipatu bezala, akoplamendu hori ezinbestekoa izango dugu elektroifonoi elkarrekintza fidagarriki aztertzeko. Beraz, Tl/Si(111) gainazala aukeratu dugu aipatutako bi akoplamenduen arteko elkarrekintza dagoen behatzeko hautagai bikaina delako. Bestalde, sistema hau, spin-orbita akoplamendua “erraldoia” eta spin-polarizazio berezia duela egiaztatu zutenetik (Sakamoto *et al.*, 2009), ikergai erakargarri bihurtu da eta berarekin lotutako publikazioen kopurua ugartu da.

## 3 Ikerketaren muina

### 3.1 Oinarri teorikoa

Detalle handitan sartu gabe, azpiatal honetan erabili dugun oinarri teorikoa aipatzen dugu. Gure kalkuluak lehen-printzipioetan oinarrituta daudenez, Schrödingerren ekuazioa erabiltzen dugu, jakinda ioi eta elektroiek elkar eragiten diotela Coulomb-en elkarrekintzaren bitartez. Hala ere, honelako problema ez da inolaz ere maneiagarria eta hainbat hurbilketa beharrezkoak dira. Horretarako, Born-Oppenheimer, Hohenberg-Kohn eta Kohn-Sham hurbilketak erabiltzen ditugu (Martin, 2004). Honela, elektroifonoi eta ioien problemak bereiztu ahal izateaz gain, elkar eragiten dioten gorputz-anitzen problema, numerikoki ebazti daitezkeen partikula bakarraren hainbat ekuaziotan eraldatzen da. Teoria honi guztiari dentsitate funtzioanalaren teoria (DFT ingelesez) deitzen zaio. Bestalde, ioiek sortzen duten potentzial elektrosztatikoa pseudopotenzial hurbilketarekin modelizatzen dugu eta uhin-lauak erabiltzen ditugu elektroifonoi uhin-funtzioen oinarri gisa.

Alde ionikorako, hurbilketa harmonikoa erabiltzen dugu. Problema honen matrize dinamikoa lortzeko, DFT-en bidez lortutako dentsitate elektronikoa eta potentzial efektiboa perturbatu behar dira. Ondorioz,

kristalaren propietate bibrazionalak kalkulatzeko erabiltzen dugun metodoari dentsitate funtzioanalaren perturbazio teoria (DFPT ingelesez) deitzen diogu (Baroni *et al.*, 2001).

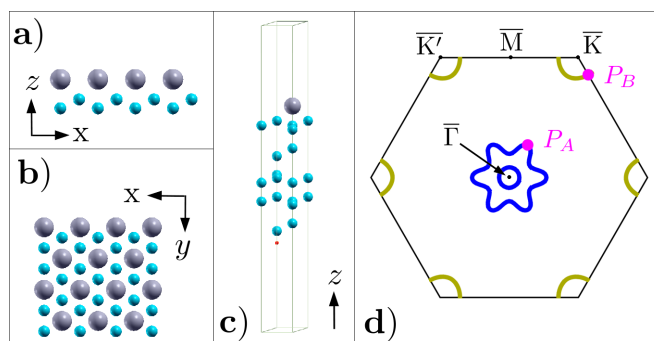
Azkenik, bi kalkulu mota egin ditugu: elektroi-fonoi elkarrekintza aztertu, alde batetik, spin-orbita akoplamendua arbuiauz, eta beste aldetik, akoplamendu hori aintzat hartuz. Gure kalkuluetan spin-orbita terminoa sartu ahal izateko, spinaren askatasun-gradua esplizituki adierazi behar dugu. Honetarako, elektroiaren uhin-funtzioak ( $\psi$ ) posizio-espazioan ( $\phi$ ) nahiz bi dimentsiotako spin-momentu angeluarren espazioan ( $\chi$ ) definitu behar ditugu:

$$\psi = \phi \otimes \chi \quad (1)$$

Hau da, elektroiaren uhin-funtzioa eskalar (zenbaki) bat izatetik egoera bat izatera pasatzen da. Beraz, spin-espazioan gertatzen diren egoera-gainezarmenak ere kontuan izan beharko ditugu fonoiaren bidez emandako elektroi-sakabanaketa aztertzerakoan, eta, jakina, trantsizioen probabilitateak eraldatu dituzte.

### 3.2 Tl/Si(111) gainazala

3 Irudia: Tl/Si(111) gainazalaren ilustrazio eskematikoak (a) albotik eta (b) goitik begiratuta. (c) Aztertutako sistemaren eredu: Tl geruza bat (esfera gris handia), 10 Si geruza (esfera urdin ertaina) eta H geruza bat (esfera gorri txikia). (d) Gainazalaren duen gelaxka elkarriko espazioan (Gainazaleko Brillouin eremua), momentuen espazioan, alegia. Gainazalaren simetria altuko puntuak agertzen dira, baita  $\mathbf{k} = P_A$  eta  $\mathbf{k} = P_B$  momentuei dagozkien energia konstanteko lerroak ere.



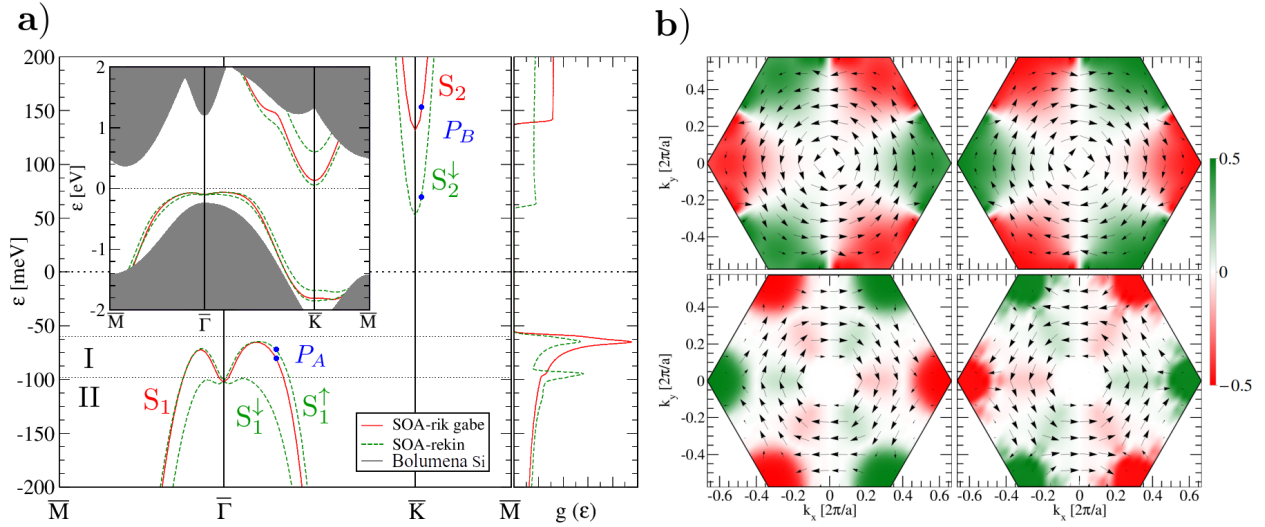
3(a) eta 3(b) Irudiek Tl/Si(111) gainazalaren alboko eta goitiko bistak erakusten dituzte, hurrenez hurren. Kristalak planoan simetria hexagonalak du. 3(c) Irudian gure lehen-printzipioetan oinarritutako kalkuluetan erabiltutako gelaxka adierazi da. Izan ere, Tl/Si(111) gainazala espazioko hiru dimentsioetan hedatzen den xafra periodiko batekin simulatu dugu. Xafra hori alde batean Tl atomo bat, barnealdean hamar Si atomo eta beste aldean hidrogeno (H Z=1) atomo batekin osatzen dute. Tl atomoa ez dagoen amaieragunean ezartzen dugu H atomoa, aske geratzen den Si-ren lotura elektronikoa ase dadin. Horrela, gainazal hori elektririkoki neutroa izango da. 3(d) Irudian Tl/Si(111) gainazaleko Brillouin eremua agertzen da, baita  $P_A$  eta  $P_B$  momentuei dagozkien energia konstanteko lerroak.

### 3.3 Propietate elektronikoa eta bibrazionalak

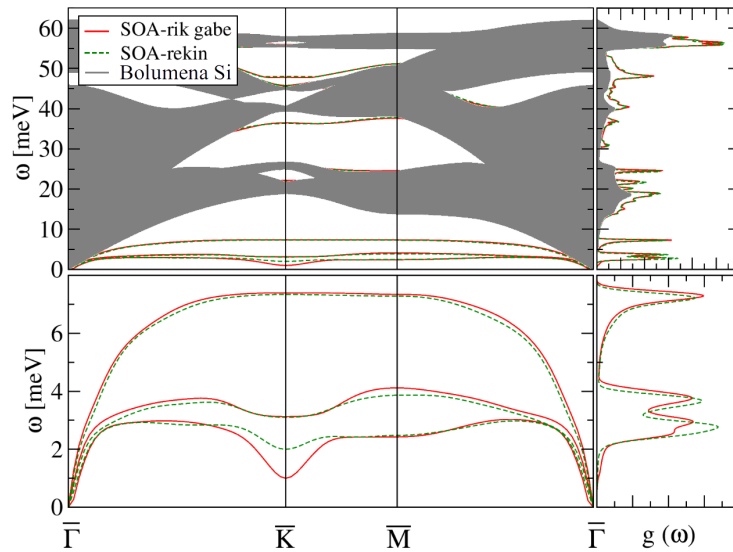
4(a) Irudiaren ezkerrean Tl/Si(111) gainazalaren elektroi-banda egitura irudikatzen dugu. Barneko panelean ikusten denez, bolumeneko Si banda-hutsartearen barruan,  $S_1$  gainazal egoera okupatuta (Fermi mailaren azpian,  $\varepsilon < 0$ ) eta  $S_2$  ez-okupatuta (Fermi mailatik gora  $\varepsilon > 0$ ) agertzen dira lerro gorri jarraituak irudikatuta, spin-orbita akoplamenduarik gabe eta spina eskalartzat hartzen badugu. Spin-orbita terminoa eta spin-espazioa esplizituki barne hartzean, aurrekoan azaldu dugun bezala, gainazal baten spinarekiko endekapena apurtzen da, spin-banantzea gertatuz (ikus marradun lerro berdea). Lau gainazal egoera aurkitzen ditugu kasu honetan:  $S_1^\downarrow$  eta  $S_1^\uparrow$  okupatuta daudenak eta  $S_2^\downarrow$  eta  $S_2^\uparrow$  okupatuta ez daudenak. Tl/Si(111) gainazala 100 meV energiako hutsartea duen erdieroale bat dela ere behatzen dugu. Halaber,  $\bar{K}$  puntuan gertatzen den spin-banda-banantzea 600 meV-koa da, eta  $\bar{\Gamma}$  puntuaren inguruarena 40 meV-koa.

4(a) Irudiaren eskualdeak Tl/Si(111) gainazalaren elektroiaren egoera-dentsitatea erakusten du. Honen energia eta bolumen unitatean egoera elektronikoa kopurua ematen du. Spina eskalarra den kasurako

4 Irudia: (a) Tl/Si(111) gainazalaren banda egitura elektronikoa eta dagokion egoera-dentsitatea. Barneko panelak energia tarte zabalagoa erakusten du.  $\varepsilon = 0$  puntukako lerroak Fermiren maila adierazten du. Spin-orbita terminoa kontuan hartu gabe eta kontuan hartutako kalkuluak lerro jarraitu gorriaz eta marradun lerro berdez adierazi dira, hurrenez hurren. Gune grisak bolumeneko silizioaren banda proiektatukoak dira. (b) Spin-banandutako gainazal-egoeren spin-polarizazioa momentuaren menpe. Gezi beltzek planoko osagaia erakusten dute, kolore kodeak, ordea, planoaren osagai perpendikularra.



5 Irudia: Tl/Si(111) gainazalaren fonioen dispertsio-erlazioa. Goiko panelak dispertsio osoa erakusten du, behekoan aldiz, Tl atomoarekin lotutako gainazalaren bibrazio normalak bakarrik agertzen dira, spin-orbita terminoa kontuan hartu gabe (lerro jarraitu gorria) eta kontuan hartuta (marradun lerro berdea). Gune grisak bolumeneko silizioaren barnealdeko bibrazio modoen proiektzioa erakusten du. Eskuma: Ezkerreko irudiei dagozkien fonioen egoera-dentsitateak.



(lerro jarraitu gorria) maximo bat aurkitzen dugu -70 meV energian. Spin-banantzea gertatzen denean (marradun lerro berdea), bi maximo agertzen dira: -70 meV eta -100 meV energietan. Izan ere, energia hauetan, elektroiko-egoera kopuru handiena dugu, beraz ahalik eta probabilitate handiena elektroiak sakabanatzeko fonoiak igorri edo xurgatuz. Hortaz, espero liteke ezaugarri honek elektroiko-fonoi akoplamendua handiagotzea.

Azkenik, spin-banandutako okupatuta dauden egoera elektronikoak hartzen baldin baditugu, elektroiko-banda egitura bi zatitan bereiztea komeni zaigu:

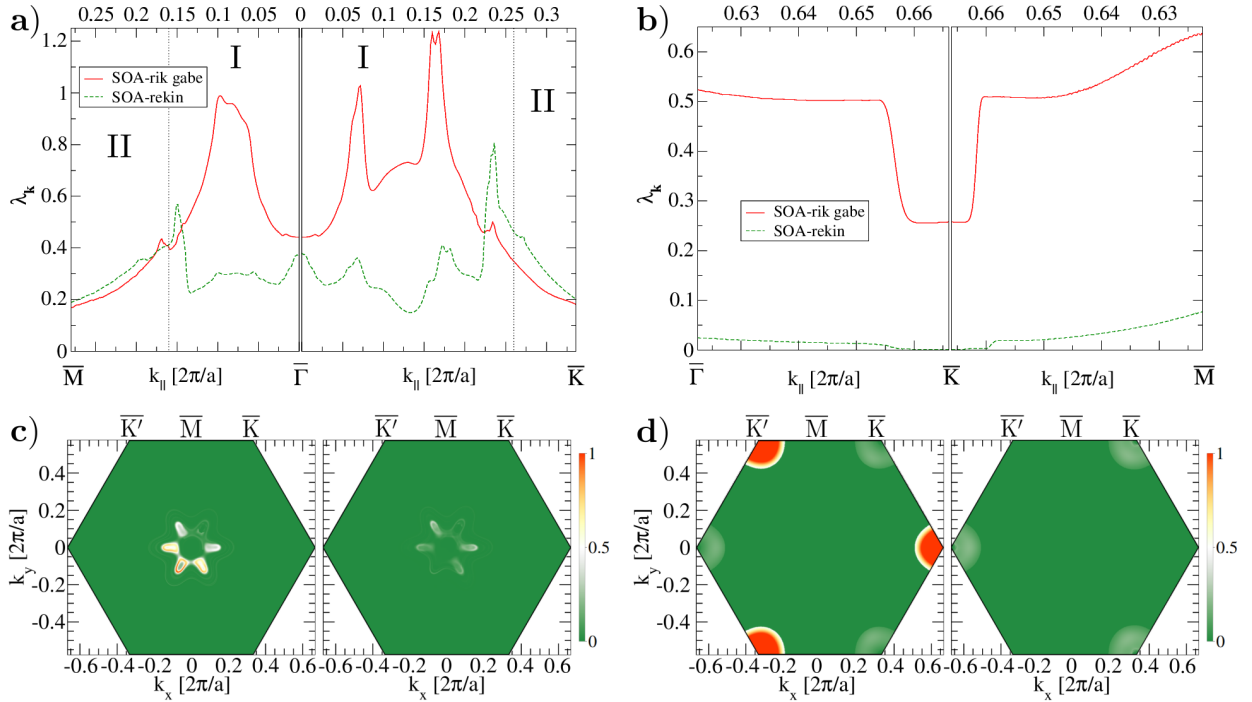
- I. zonaldea: bi banden maximoen artean (energia  $\varepsilon \in [-70; -100]$  meV), non spin-banandutako banda bakarra dagoenez fonoiek erangidako elektroi-sakabanaketa banda barneko trantsizioek osatuko duten.
- II. zonaldea: egoera sakonagoetarako (energia  $\varepsilon < -100$  meV), non bi bandak eskura daudenez, bai banda barneko eta bai bi banden arteko trantsizioak gertatzen diren.

4(b) Irudiak spin-banandutako gainazal-egoeren spin-polarizazioak erakusten ditu momentuaren arabera.  $\bar{\Gamma}$  puntuaren inguruan, spin-polarizazioak planoan biratzen du.  $\bar{\Gamma}$ -tik  $\bar{K}$ ( $\bar{K}'$ )-ra mugitzean spin-polarizazioak planoan duen osagaia txikitu eta osagai perpendikularra handitu egiten da,  $\bar{K}$  eta  $\bar{K}'$ -an spin-polarizazioa planoarekiko guztiz perpendikularra izanik. Gainera spin-polarizazioak  $\bar{K}$  eta  $\bar{K}'$  puntuetan aurkako noranzkoa du beti.

5 Irudiaren ezker aldean Tl/Si(111) gainazalaren fonoiaren dispersioa erakusten da. Goiko panelean energia tarte handiagoan, bolumeneko fonoiaren bandak ikusten dira (grisa). Beheko panela, aldiz, Tl atomoaren gainazal modo normalak agertzen dira energia tarte txikiagoan. Bi bandarik baxuenek “ahultze” bat sumatzen dute  $\bar{K}$  puntuan, zeina elektroi-fonoi akoplamendu handiaren aztarna izan daitekeen (Kohn, 1959). Hala ere, spin-orbita akoplamendua eta spin egoerak kontsideraturik, “ahultze” hori ez da hain nabarmena emnergia txikien duen adarrarentzat (marradun lerro berdea). Hau spin-orbita akoplamenduak elektroi-fonoi elkarrekintza txikitzen duelaren seinalea izan daiteke.

### 3.4 Elektroifonoi elkarrekintza

6 Irudia: Elektroifonoi elkarrekintzaren  $\lambda_{\mathbf{k}}$  parametroa  $\mathbf{k}$  elektroiegoeraren momentuaren menpe, spin-orbita teminoa kontuan hartu gabe (lerro jarraitu gorria) eta kontuan hartuta (marradun lerro berdea), hurrenez hurren. (a) Okupatuta dagoen bandarik altuenaren kasuan ( $S_1$  lerro jarraitu gorria, edo  $S_1^\uparrow$  marradun lerro berdea)  $\bar{\Gamma}$ -ren inguruan. (b) Ez-okupatuta dagoen bandarik baxuenaren kasuan ( $S_2$  lerro jarraitu gorria, edo  $S_2^\downarrow$  marradun lerro berdea)  $\bar{K}$ -ren inguruan.  $\mathbf{k} + \mathbf{q}$  momentuaren menpeko ekarpenak  $\lambda_{\mathbf{k}}$  parametroari Brillouin eremu barruan. (c) Okupatuta dagoen bandarik altuenaren kasuan ( $S_1$  ezkerrean, edo  $S_1^\uparrow$  eskuinean)  $\mathbf{k} = P_A$  puntuan. (d) Ez-okupatuta dagoen bandarik txikiaren kasuan ( $S_2$  ezkerrean, edo  $S_2^\downarrow$  eskuinean)  $\mathbf{k} + \mathbf{q} = P_B$  puntuan (ikus 3(c) eta 4(a) Irudia).



Behin sistemaren propietate elektroniko eta bibrazionalak ezagutzen ditugula, elektroifonoi elkarrekintza aztertzeko gai gara. Lan honetan, egoeraren menpeko akoplamenduaren ahalmen faktorea ( $\lambda_{\mathbf{k}}$ )

kalkulatzen dugu (Grimvall, 1981; Giustino, 2017). Parametro honek elektroifonoi elkarrekintzaren eraginararen neurria ematen du; horrela, zenbat eta altuago izan, orduan eta handiagoa izango da akoplamendua.

6(a) Irudiak  $\lambda_{\mathbf{k}}$  delakoa elektroifonoi-egoeraren momentuaren funtzioan erakusten digu  $\bar{\Gamma}$  puntuaren inguruan eta okupatuta dagoen bandarik altuenerako ( $S_1$ , lerro jarraitu gorria, edo  $S_1^\uparrow$ , marradun lerro berdea). Spin-orbita akoplamendurik gabe,  $\lambda_{\mathbf{k}}$  delakoaren maximoek elektroien egoera-dentsitatearen maximoarekin bat datoz, -70 meV energian. Izan ere, energia hauetan sakabanaketa-prozesua handien da, eta itxarotako emaitza lortzen da. Bestalde, aurkitutako maximoen balioak ( $\lambda_{\mathbf{k}} \in [1.0; 1.2]$ ) elektroifonoi elkarrekintza handiaren ezaugarri dira. Aldiz, spin-orbita terminoa eta spin-egoerak kalkuluan kontuan hartzen direnean, maximoen balioak lau aldiz txikiagotzen dira. Ikus daitekeenez, spin-orbitak sortutako aldaketak irudiaren I. zonaldeko (ikus 4(a) irudia) egoeretan nabarmenak dira, II. zonaldean, aldiz, ez dago aldaketa deigarriarik. II. zonaldean, alabaina, elektroiek banda barneko zein banden arteko sakabanaketak pairatzen dituzte, eta ondorioz bukaerako egoerekin gainezarmena ez da inoiz txikituko. I. zonaldean, haatik, bakarrik barneko sakabanaketa dugu. Beraz, spin-egoeren gainezarmenak trantsizio posibleak murrizten ditu, baita kasu batzuetan ezabatu ere. Adibide argi bat 6(c) Irudian ikus dezakegu, non  $\mathbf{k} = P_A$  momentuaren  $\lambda_{\mathbf{k}}$  delakoari dagozkion Brillouin eremu osoko ekarpenak irudikatzen diren, spin-orbita terminoarik gabe (ezkerrean) eta hori aintzat hartzen dugun kasuan (eskuman). Argi ikusten da spin-orbita terminoa barnehartzean,  $P_A$  puntuaren aurkako momentua duten egoeren ekarpena txikiagotu edo anulatu egiten dela, spin-egoeren biderketaren ondorioz. Bestalde, 6(a) irudian ikusten denez, spin-orbita kontsideratutako kasuan,  $\lambda_{\mathbf{k}}$ -ren maximo berriak ere agertzen dira ( $\lambda_{\mathbf{k}} \in [0.6; 0.8]$ ). Hortaz, elektroifonoi akoplamenduaren  $\lambda$  faktorea kasu eskalarrarekiko nabarmen gutxiagotzen bada ere, balioek handi samarrak izaten jarraitzen dute. Maximo hauek elektroien egoera-dentsitatearen -100 meV energian ikusitako den maximoarekin lotura dute.

6(b) Irudiak  $\lambda_{\mathbf{k}}$ -ren balioak elektroifonoi-egoeraren momentuaren menpe erakusten ditu  $\bar{K}$  puntuaren inguruan eta okupatuta ez dagoen bandarik baxuenerako ( $S_2$  lerro jarraitu gorria, edo  $S_2^\uparrow$  marradun lerro berdea). 6(d) Irudian ikus dezakegu Brillouin eremu osoko momentuen ekarpena  $\lambda_{\mathbf{k}}$  balioan,  $\mathbf{k} = P_B$  momentua izanik. Spin-orbita gabe, fonoi-energiek  $\bar{K}$ -tik gertu dauden momentuen arteko eta  $\bar{K} \rightarrow \bar{K}'$  puntuen arteko trantsizioak baimentzen dituzte. Kasu honetako  $\lambda_{\mathbf{k}}$ -ren balioak ertainak dira:  $\lambda \in [0.3; 0.6]$ . Hala ere, spin-orbita eta spin-espazioa kontuan hartzen dugunean, elektroifonoi akoplamenduaren ahalmena bortizki txikiagotzen da, are gehiago, esan genezake ia guztiz anulatzen dela, balioak oso txikiak baitira,  $\lambda < 0.1$ . Izan ere, 4(b) Irudiaren spin-polarizazio mapetan ikusten den moduan,  $\bar{K}$  eta  $\bar{K}'$  puntuen arteko trantsizioetan aurkako spin-egoerak biderkatzen dira, eta, honenbestez,  $\bar{K} \rightarrow \bar{K}'$  ekarpenak debekatuta daude (ikus 6(d) Irudia). Hala eta guztiz ere,  $\bar{K}$ -tik gertu dauden momentuen arteko sakabanaketa-prozesuak izaten jarraitzen dugu. Trantsizio horietan, berriz, momentu oso txikiak transferitzen dira ( $\mathbf{q} \rightarrow 0$ ), eta, definizioz (Grimvall, 1981; Giustino, 2017), dagozkien sakabanaketa-probabilitateak oso txikiak izaten dira beste prozesuekin konparatuta. Beraz, spin-orbita akoplamendua eta spin-espazioa aintzat hartzen baditugu, elektroifonoi elkarrekintza biziki murrizten dela esan dezakegu.

## 4 Ondorioak

Spin-orbita akoplamenduak elektroifonoi elkarrekintzari nola eragiten dion aztertu dugu Tl/Si(111) gai-zalean. Helburu honetarako, spin-espazioa elektroifonoi-uhin-funtzioen deskribapenaren barruan sartu dugu. Spina eskalartzat hartzen dugunean, gainazal elektroifonoi-egoerak eta fonoiak elkarrekin guztiz akoplatuta daude. Aldiz, spin-egoerak esplizituki hartuz gero, spin-egoeren gainezarmenaren eraginez fonoi birtarte gaiztatutako elektroifonoi-sakabanaketaren probabilitateak txikiagotu daitezke, baita ia guztiz anulatu ere.

Izan ere, fenomeno hau oso interesgarria izan liteke spinaren askatasun-graduan oinarritutako elektronikarako, orain arte lortu dena baino spin-egoera askoz egonkorragoa eta maneigarriagoa edukiko genukeelako. Azkenik, ikerketa hau guztiz teorikoa bada ere, lan honen emaitzak angeluz bereizitako fotoemisio teknika esperimentalaren bidez baliozta litezke.

## 5 Etorkizunerako planteatzen den norabidea

Lan honen ondorengo urratsa, gainazal berdinean elektroifonoi elkarrekintzarekin lotutako beste kalkulak egitea izango litzateke. Halaber, urte hauetan zehar gauzatu dugun kodigoa hobetu eta gehiago



garatu nahiko genuke. Horren ostean, Tl/Si(111) material-motako sistema gehiago aztertzeke ideia badaukagu, baita spinak paper garrantzitsua duen beste gainazalak ere. Azkenik, elektroifonoi gorputz-anitzen teoriar sakontzea ere gustatuko litzaiguke.

## Erreferentziak

- ALCÁNTARA ORTIGOZA, M., I. YU. SKLYADNEVA, R. HEID, E. V. CHULKOV, T. S. RAHMAN, K.-P. BOHNEN, eta P. M. ECHENIQUE. 2014. Ab initio. *Phys. Rev. B* 90.195438.
- ASHCROFT, N. W., eta N. D. MERMIN. 1976. *Solid State Physics*. BROOKS/COLE CENGAGE Learning.
- AST, CHRISTIAN R., JÜRGEN HENK, ARTHUR ERNST, LUCA MORESCHINI, MIHAELA C. FALUB, DANIELA PACILÉ, PATRICK BRUNO, KLAUS KERN, eta MARCO GRIONI. 2007. Giant spin splitting through surface alloying. *Phys. Rev. Lett.* 98.186807.
- BARONI, STEFANO, STEFANO DE GIRONCOLI, ANDREA DAL CORSO, eta PAOLO GIANNOZZI. 2001. Phonons and related crystal properties from density-functional perturbation theory. *Rev. Mod. Phys.* 73.515–562.
- CAPPELLUTI, E., C. GRIMALDI, eta F. MARSIGLIO. 2007. Electron-phonon effects on spin-orbit split bands of two-dimensional systems. *Phys. Rev. B* 76.085334.
- EIGUREN, A., S. DE GIRONCOLI, E. V. CHULKOV, P. M. ECHENIQUE, eta E. TOSATTI. 2003. Electron-phonon interaction at the Be(0001) surface. *Phys. Rev. Lett.* 91.166803.
- GIUSTINO, FELICIANO. 2017. Electron-phonon interactions from first principles. *Rev. Mod. Phys.* 89.015003.
- GRIMVALL, G. 1981. *The Electron-Phonon Interaction in Metals, Selected Topics in Solid State Physics*. North-Holland, New York.
- HUFNER, S. 1995. *Photoelectron Spectroscopy: Principles and Applications*. Springer, Berlin.
- ŽUTIĆ, IGOR, JAROSLAV FABIAN, eta S. DAS SARMA. 2004. Spintronics: Fundamentals and applications. *Rev. Mod. Phys.* 76.323–410.
- KOHN, W. 1959. Image of the Fermi surface in the vibration spectrum of a metal. *Phys. Rev. Lett.* 2.393–394.
- LI, ZHOU, L. COVACI, M. BERCIU, D. BAILLIE, eta F. MARSIGLIO. 2011. Impact of spin-orbit coupling on the Holstein polaron. *Phys. Rev. B* 83.195104.
- MARTIN, R. M. 2004. *Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods*. Cambridge University Press.
- SAKAMOTO, KAZUYUKI, TATSUKI ODA, AKIO KIMURA, KOJI MIYAMOTO, MASAHITO TSUJIKAWA, AYAKO IMAI, NOBUO UENO, HIROFUMI NAMATAME, MASAKI TANIGUCHI, P. E. J. ERIKSSON, eta R. I. G. UHRBERG. 2009. Abrupt rotation of the rashba spin to the direction perpendicular to the surface. *Phys. Rev. Lett.* 102.096805.
- SAKURAI, J. J. 1994. *Modern Quantum Mechanics*. Addison-Wesley Publishing Company.
- SKLYADNEVA, I. YU., R. HEID, K.-P. BOHNEN, P. M. ECHENIQUE, eta E. V. CHULKOV. 2013. Mass enhancement parameter in free-standing ultrathin pb(111) films: The effect of spin-orbit coupling. *Phys. Rev. B* 87.085440.

## 6 Eskerrak eta oharrak

Eusko Jaurlaritzaren Hezkuntza, Unibertsitate eta Ikerkuntzaren sailari, Euskal Herriko Unibertsitateari (UPV/EHU) (IT756-13) eta Espainiako Ekonomia eta Lehiakortasunaren Ministerioari (FIS2013-48286-c2-1-P eta FIS2016-75862-P) eskertu nahi diegu lan hau aurrera eramanez ahal izateko eman dizkiguten baliabide ekonomikoengatik. Baliabide konpontzialak Donostia International Physics Center-k (DIPC) eman dizkigu. P.G.-k UPV/EHU-ri (PIF/UPV/12/279) eta DIPC-ri eskertu nahi die babes ekonomikoa.