



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

**Efektu erlatibistak gainazalen
erantzun propietateetan: Karga eta
spin oszilazio kolektiboak**

*Jon Lafuente-Bartolome,
Idoia G. Gurtubay eta Asier Eiguren*

146-151 or.

<https://dx.doi.org/10.26876/ikergazte.ii.05.21>

ANTOLATZAILEA:



ELKARLANEAN:



LAGUNTZAILEAK:



Efektu erlatibistak gainazalen erantzun propietateetan: Karga eta spin oszilazio kolektiboak

Jon Lafuente-Bartolome^{1,2} eta Idoia G. Gurtubay^{1,2} eta Asier Eiguren^{1,2}

¹ Materia Kondentsatuaren Fisika Saila, Euskal Herriko Unibertsitatea. 644 Postakutxatila, 48080 Bilbo

² Donostia International Physics Center (DIPC). Manuel de Lardizabal ibilbidea 4, 20018 Donostia

Laburpena

Lan honetan spin elektronikoak solidoetako gainazalen erantzun propietateetan izan dezakeen zeregina aztertu da. Horretarako, efektu erlatibista nabarmenak erakusten dituen material batean zentratu gara, Tl/Si(111) gainazalean hain zuzen ere. Lehen-printzipioetan oinarritutako kalkuluak erabiliz, sistema honek energia baxuko kitzikapen kolektibo berezi bat erakusten duela frogatu dugu, ohiko karga oszilazioetaz gain spin oszilazioak ere dakartzana.

Hitz gakoak: Spin-orbita elkarrekintza, gainazal-plasmoia, lehen-printzipioetan oinarritutako kalkuluak.

Abstract

We study the role of the electronic spin in the response properties of solid surfaces. We focus on the Tl/Si(111) surface, which is a surface-system showing sizeable relativistic effects. Based on first-principles calculations, we demonstrate that a peculiar low-energy collective excitation emerges at this system, which is composed by spin oscillations together with the more usual charge oscillations.

Keywords: Spin-orbit coupling, surface plasmon, first-principles calculations.

1 Sarrera eta motibazioa

Spin-orbita elkarrekintza elektroien karga eta spin propietateak elkarlotzen dituen efektu erlatibista bat da. Atomoetan, egoera elektronikoak energia mailatan kuantifikatuta egonik, spin proiektzio desberdindun elektroien mailak spin-orbita akoplamenduaren eraginez banandu daitezkeela aspaldi jakina den fenomeno bat da (Cohen-Tannoudji *et al.*, 1978). Atomo ugari osatutako gorputz-anitzeko sistema batean, aldiz, egoera elektronikoek *banda* deituriko dispersioak eratzen dituzte, sistemaren simetriek zeregin garrantzitsua izaten dutelarik banda egitura hauetan. Honela, sisteman espazio-inbertsio-simetria eta denbora-inbertsio-simetria betetzen badira -ohiko sistema gehienetan betetzen direnak-, spin proiektzio desberdindun bi bandak tokioro endekatuta egon behar dira¹. Horregatik, gorputz-anitzeko sistema batean spinarekin lotutako efektuak ikusi nahi izatekotan, aipatutako bi simetrietatik bat apurtzea beharrezkoa da. Denbora-inbertsio-simetria apurtzean, eremu magnetiko bat aplikatuz egin daitekeena, aspaldi ezaguna den magnetismoaren fenomeno agertzen da. Espazio-inbertsio-simetria apurtzean, aldiz, duela gutxirarte ezagutzen ez ziren fenomeno bereziagoak azalaratzen dira, azken urteotan materia kondentsatuaren fisikaren arloan arreta nabarmena lortzen ari direnak.

Ohikoak diren gorputz-anitzeko sistemak solidoak dira, milaka atomoz osatuta daudenak. Atomo hauek era ordenatuan antolatzen badira kristal bat eratuko dute, eta antolaketa horretan espazio-inbertsio-simetria betetzen bada elektroiek endekatutako banda egiturak sortuko dituzte. Badago solidoaren zonalde bat, ordea, zeinetan definizioz inbertsio simetria apurtuko den: gainazala. Bertan dauden elektroiek, atomoak behar bezain pisutsuak badira, spin-banandutako bandak eratuko dituzte spin-orbita elkarrekintzaren eraginez. Beraz, gainazal hauetan propietate elektromagnetiko bitxiak ikustea espero dezakegu, zeintzutan elektroien kargak ez ezik, spinak ere zeregin zentrala izan dezakeen.

Lan honetan, efektu erlatibista nabarmenak dituzten gainazalen erantzun propietateak aztertzen dira, bereziki hauetan gerta daitezkeen kitzikapen kolektiboetan zentratuz. Beste hainbaten artean, metaletan gertatu daitezkeen kitzikapen kolektiboetako bat *plasmoia* da. Plasmoi bat kitzikatzean, elektroien guztiek

¹Matematikoki frogatu daitezkeen teorema honi *Kramers-en teorema* deritzo (Kramers, 1930).

modu kolektibo batean oszilatzen dute, karga-dentsitate uhinak sortuz. Sistema magnetikoetan, *magnoi* izeneko kitzikapen kolektibo desberdin bat gerta daiteke. Honetan, oreka konfigurazioarekiko era kolektiboan oszilatzen dutenak elektroien spinak dira, spin-dentsitate uhinak sortuz. Aurrerago ikusiko dugunez, spin-orbita elkarrekintzaren eraginez spin-banandutako egoerak dituzten gainazal ez-magnetikoetan, karga eta spin dentsitate oszilazioak konbinatzen dituen kitzikapen kolektibo berri bat gertatu daiteke, orain arte neurtu ez dena.

2 Arloko egoera eta ikerketaren helburuak

Sarreran aipatu bezala, solidoak milaka atomoz osatutako gorputz-anitzeko sistemak dira. Honegatik, historikoki solidoen ikerketa teorikoa eredu sinplifikatuetan oinarritu da gehienbat. Eredu hauek, fenomeno fisiko asko ulertzea ahalbidetu duten arren, neurketa esperimentalekin bat eginez eta erabilera teknologiko berriei atea zabalduz, aplikagarritasun mugatua daukate. Izan ere, aztertu nahi den problema bakoitzarako eredu bat eraikitzean sistemaren menpekoak diren parametro asko adostu behar dira, ikergai dugun sistemaren inguruko informazioa alde aurretik ezagutzera derrigortzen duena. Era honetara, fenomeno fisiko berriak aurrerako ahalmena nabarmen murrizten da. Azken urteotan burutu diren garapen teorikoek, ordenagailuek jasandako aurrerapen nabarmenarekin batera, solidoen fisika teorikoa egiteko modu berri bat sortzea ekarri dute: lehen-printzipioetan oinarritako kalkuluak. Mota honetako kalkuluetan, kristal egitura ditugun atomo mota desberdinak eta hauen posizioak soilik erabiltzen ditugu informazio sarrera bezala. Hemendik aurrera, sistemak betetzen dituen simetrietaz, mekanika kuantikoak emandako lege orokorretaz², eta ordenagailu kodeetatik baliatzen gara interesekoa dugun sistemaren egitura elektronikoa eta propietate dinamikoak kalkulatzeko.

Gainazalen kitzikapen kolektiboen ikerketari dagokionez, lehen-printzipioetako kalkuluaren erabilera azken hamarkadara mugatzen dela esan dezakegu. Teknika hauen erabilerak emandako ekarpenak ugari eta nabariak izan dira, eta beranduago esperimentalki neurtu diren kitzikapen kolektibo mota berriak aurrerako era iritsi dira kasu batzuetan, hala nola gainazaleko plasmoi akustikoa³ (Silkin *et al.*, 2004; Diaconescu *et al.*, 2007). Spin-orbita elkarrekintza kontuan hartzean, aldiz, eredu sinplifikatuak soilik erabili dira orain arte. Eredu hauek jada erlatibitateak eragindako efektu interesgarriak aurreratu badiutuzte ere (Maiti *et al.*, 2015), sistema oso sinpleetara eta idealizatuera mugatu dira, eta ezin izan dira esperimentuekin baieztatu kasu gehienetan.

Lan honetan, lehen-printzipioetan oinarritutako tratamendu teoriko bat jorratzen dugu, gainazal solido batek kanpoko eremu elektromagnetiko batekiko duen erantzuna aztertzean karga eta spin aldagaiak era berean barneratzen dituen, spin-orbita elkarrekintza kontuan hartuz. Honen helburua, spin elektronikoa efektu erlatibista nabarmenak dituzten gainazalen erantzun propietateetan duen zeregina ikertzea da, potentzialki kitzikapen kolektibo mota berriak topatuz.

3 Ikerketaren muina

Artikuluaren muina bi ataletan banatuko dugu. Lehenengoan, garatutako oinarri teorikoa laburki azalduko dugu. Bigarrenetan, garapen teoriko hau Tl/Si(111) sisteman aplikatuko dugu, gainazal honek spin eta karga oszilazioak konbinatzen dituen kitzikapen kolektibo bat erakusten duela frogatuz.

3.1 Garapen teorikoa

Hasieran aipatu bezala, lan honetan solidoetako gainazalek kanpo-perturbazio batekiko erakusten duten erantzuna aztertuko dugu. Honelako prozesuak deskribatzeko zentrala den kantitate bat materialen dentsitate-dentsitate erantzun funtzioa dugu, hemendik aurrera χ letra grekoaz adieraziko duguna. Funtzio honek, kanpo-potentzial jakin baten ($\delta V^{(\text{kanpo})}$) eta honek sisteman indusitzen duen karga dentsitate aldaketaren ($\delta\rho$) arteko erlazio lineala ematen du,

$$\delta\rho_{\mathbf{G}}(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{\mathbf{G}'} \chi_{\mathbf{G}\mathbf{G}'}(\mathbf{q}, \omega) \delta V_{\mathbf{G}'}^{(\text{kanpo})}(\mathbf{q}, \omega), \quad (1)$$

²Kasu gehienetan zeinbat hurbilketa erabiltzen dira kalkuluak praktikan egin ahal izateko. Ikusi, adibidez, (Martin, 2004) erreferentzia.

³Ingelesez, *Acoustic Surface Plasmon*.

non \mathbf{q} kanpo-potentzialaren eta sistemaren arteko momentu-transferentzia den, eta ω kanpo-potentzialaren frekuentzia den. Erlazio hau elkarrekiko espazioan idatzi dugu, eta \mathbf{G} bektoreak elkarrekiko sareko bektoreak dira (Ashcroft eta Mermin, 1976). Funtzio honek sistemak jasan ditzakeen kitzikapenei buruzko informazio baliogarria ematen digu. Izan ere, sistemak \mathbf{q} momentu eta ω energiako kitzikapen bat eskuragarri izatekotan, χ funtzioak erresonantzia bat erakutsiko du.

Solidoak elkarrekintzan dauden elektroiez osatutako sistemak izanik, bi motatako kitzikapenak gerta daitezke: kuasipartikulak eta kitzikapen kolektiboak. Lehenengo motako kitzikapenetan energia eta momentua partikula bakar batek xurgatzen du, gure kasuan elektroiak. Kitzikatutako elektroiek bere inguruko karga distribuzioa eraldatuko du, “polarizazio-laino” bat sortuz. Honela, elektroiak isolatutako partikula baten izaera galduko du, eta kuasipartikula batean bilakatzen dela esango dugu. Kitzikapen kolektiboetan, aldiz, elektroiek guztiek xurgatzen dute energia eta momentua aldi berean.

Sarritan, kanpo-perturbazio baten ondorioz sistemak erresonantzia bat erakusten duenean, zaila da bereiztea bertan kuasipartikula bat edo kitzikapen kolektibo bat eragin den. Honetarako, benetako sistemaren antzerakoa den baina erantzunean elkarrekintzarik erakusten ez duen sistema ideal baten erantzun funtzioa kalkulatu dezakegu, oinarritzko egoeraren egitura elektronikotik abiatuz erraz lor daitekeena (Martin, 2004). Erantzun funtzio hau χ^0 letra grekoarekin adieraziko dugu, eta elektroien arteko elkarrekintzak barne hartzen ez dituenek, honen edozein erresonantzia (\mathbf{q}, ω) jakin batean, energia eta momentu hori duen partikula bakar baten kitzikapenari dagokio. Honela, bi erantzun funtzioak $-\chi$ eta χ^0 - konparatuz (\mathbf{q}, ω) mapa batean, sistemak jasan ditzakeen kuasipartikula kitzikapenak eta kitzikapen kolektiboak bereizi ditzakegu.

Orain arte, kanpo-potentzial eskalarrak eta karga-dentsitate elektrikoak soilik kontsideratu ditugu. Hala ere, spin-orbita elkarrekintza erlatibistak elektroien karga eta spin askatasun graduak estuki lotzen dituela jakin badakigu. Gainazalean, solidoek gorputzean duten inbertsio-simetria galtzen dutenez, spin-orbita elkarrekintzak bi egoera elektronikoko banandu ditzake. Honek, mekanika kuantikoaren baitan, spinore formalismoa erabiltzera behartzen gaitu, zeinetan elektroien uhin funtzioak bi osagaidun spinoretara orokortzen diren,

$$\psi(\mathbf{r}) \longrightarrow \Psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \varphi^{(\uparrow)}(\mathbf{r}) \\ \varphi^{(\downarrow)}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Adierazpen honetan, $\varphi^{(\uparrow)}$ eta $\varphi^{(\downarrow)}$ delakoek norabide jakin batekiko uhin funtzioaren bi spin osagaiak ematen dituzte. Spinore egitura honek, dentsitatea lau osagaiko bektore baten modura kontsideratzea eskatzen du,

$$\rho(\mathbf{r}) \longrightarrow \mathbf{n}^\mu(\mathbf{r}) = (\rho(\mathbf{r}), m_x(\mathbf{r}), m_y(\mathbf{r}), m_z(\mathbf{r})), \quad (3)$$

non karga-dentsitate arruntaz gain, spin-dentsitatearen hiru osagaiak ere barneratzen diren. Honen ondorioz, sistemak kanpo-perturbazio bati erantzutean (1) ekuazioak 4×4 egitura tentsoriala hartzen du, karga-dentsitate aldaketaz gain, spin-dentsitate aldaketak ere kontuan hartzeko,

$$\begin{pmatrix} \delta\rho^{\mathbf{G}} \\ \delta m_x^{\mathbf{G}} \\ \delta m_y^{\mathbf{G}} \\ \delta m_z^{\mathbf{G}} \end{pmatrix} = \sum_{\mathbf{G}'} \begin{pmatrix} \chi_{00}^{\mathbf{G}\mathbf{G}'} & \chi_{0x}^{\mathbf{G}\mathbf{G}'} & \chi_{0y}^{\mathbf{G}\mathbf{G}'} & \chi_{0z}^{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \\ \chi_{x0}^{\mathbf{G}\mathbf{G}'} & \chi_{xx}^{\mathbf{G}\mathbf{G}'} & \chi_{xy}^{\mathbf{G}\mathbf{G}'} & \chi_{xz}^{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \\ \chi_{y0}^{\mathbf{G}\mathbf{G}'} & \chi_{yx}^{\mathbf{G}\mathbf{G}'} & \chi_{yy}^{\mathbf{G}\mathbf{G}'} & \chi_{yz}^{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \\ \chi_{z0}^{\mathbf{G}\mathbf{G}'} & \chi_{zx}^{\mathbf{G}\mathbf{G}'} & \chi_{zy}^{\mathbf{G}\mathbf{G}'} & \chi_{zz}^{\mathbf{G}\mathbf{G}'} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta V_0^{\mathbf{G}'(\text{kanpo})} \\ \delta H_x^{\mathbf{G}'(\text{kanpo})} \\ \delta H_y^{\mathbf{G}'(\text{kanpo})} \\ \delta H_z^{\mathbf{G}'(\text{kanpo})} \end{pmatrix}. \quad (4)$$

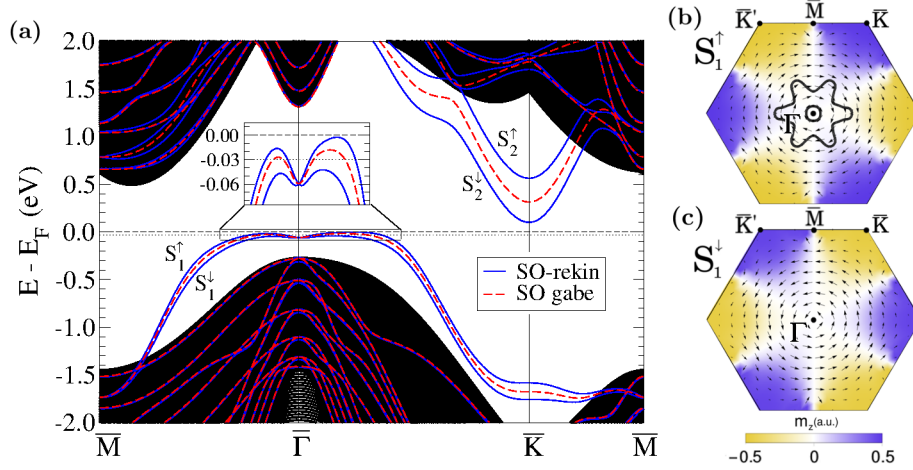
Horrela, 16 osagaidun erantzun tentsoreak kanpo eremu elektromagnetiko orokor bat -potenzial elektriko ($\delta V^{\text{(kanpo)}}$) eta eremu magnetiko ($\delta \vec{H}^{\text{(kanpo)}}$) batez osatua dagoena- eta honek induzitutako karga eta spin dentsitate aldaketak erlazionatzen ditu.

3.2 Emaitzak

Aurreko azpiatalean deskribatutako garapen teorikoa praktikan jartzeko asmoz, lehen-printzipioetan oinarritutako kalkuluak egin ditugu Tl/Si(111) gainazalaren erantzuna aztertuz. Lan honetan, ELK kodeaz (Dewhurst *et al.*) baliatu gara oinarritzko egoeraren kalkuluak burutzeko, eta taldean bertan garatu den kode bat erabili da spin eta karga erantzun tentsorea kalkulatzeko.

1 irudian Tl/Si(111) gainazalaren oinarritzko egoeraren kalkuluaren emaitzak ematen ditugu. Ezkerreko aldean (1(a) irudia), sistemaren elektroien banda egitura irudikatu dugu, egoera elektronikoen energia

1 Irudia: Tl/Si(111) gainazalaren oinarritzko egoeraren kalkuluen emaitzak. (a) atalean, lerro gorri etenek spin-orbita (SO) elkarrekintzarik gabeko kalkulutik lortutako banda egitura adierazten dute, lerro urdin jarraituek SO elkarrekintza kontuan hartutako kalkulutik lortutakoa, eta kontinuo beltzak silizio bolumenarena. (b) eta (c) ataletan, S_1^\uparrow eta S_1^\downarrow gainazal egoeren spin-polarizazioak erakusten dira elkarrekiko espazioan, hurrenez hurren. Gezi eta kolore kodearen bidez gainazalarekiko paralelo eta perpendikularrak diren spin-polarizazioaren osagaiak adierazi dira, hurrenez hurren.



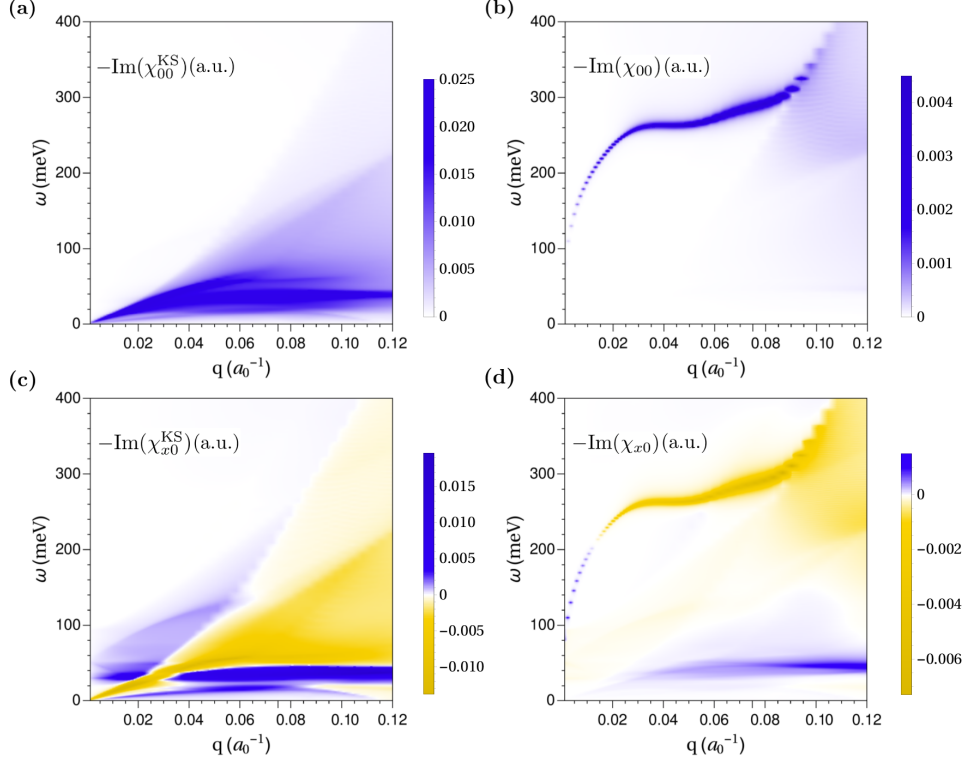
(E) Fermiren energia (E_F)⁴ delakoarekiko, kristal-momentuaren norabide batean zehar. Bertan, lerro gorri etenek spin-orbita (SO) elkarrekintzarik gabeko kalkulutik lortutako banda egitura adierazten dute, lerro urdin jarraituek SO elkarrekintza kontuan hartutako kalkulutik lortutakoa, eta kontinuo beltzak silizio bolumenarena. Egoera elektronikoa bat solidoaren gainazalean lokalizatuta egoteko, honen bandak bolumeneko banda-hutsartean aurkitu behar dira (Davison eta Stęślicka, 1992). Beraz, irudi honetatik atera dezakegun lehen ondorioa da ondo definitutako bi gainazal egoera dauzkagula, bata okupatua (lerro gorri etena Fermiren mailaren azpitik) eta bestea hutsik (lerro gorri etena Fermiren mailaren gainetik). Hauetako bakoitzak endekapen bikoitza izango du, oraindik spin-endekapena apurto dezakeen ezer ez baitugu kontuan hartu. Spin-orbita elkarrekintza kontuan hartzean, aldiz, banda hauek banandu egiten direla ikusten dugu, lau spin-banandutako banda sortuz (lerro jarraitu urdinak). Banantze hau ikaragarri handia da kasu honetan, ~ 0.5 eV-ekoa izatera iristen delarik K puntuaren inguruan.

1(b)-(c) irudietan okupatutako egoera elektronikoen spin polarizazioa aurkezten dugu elkarrekiko espazioan. Geziek eta kolore kodeak spin-polarizazioaren proiektzioak adierazten dituzte, gainazalaren planoarekiko norabide paralelo eta perpendikularretan, hurrenez hurren. Espazio errealeko magnetizazio totala lortzeko, spin polarizazioa integratu beharko genuke elkarrekiko espazioan. Irudi honetan ikusten dugunez, egoera elektronikoa hauetako spin polarizazioaren batuketa egitean eremu osoan, magnetizazio nulua lortzen dugu, aurkako norabidean dauden spin polarizazioak anulatu egiten baitira. Hau espero genuen emaitza da, Tl/Si(111) sistema ez baita magnetikoa. Badu, hala ere, magnetizazio inplizitu bat; spin polarizazioa aldatu egiten da elkarrekiko espazioaren posizioarekin, egitura konplexuak erakutsiz. Lan honetan, sistema metalikoa egin dugu Fermi maila ~ 0.3 eV jaitsiz (ikus 1(a) irudiko puntuko lerroa). Honela, erdi-okupatutako banda bat lortzen dugu, zirkularki spin-polarizatutako Fermi gainazal bat duena (ikus 1(b) irudiko lerro beltza Γ puntuaren inguruan).

Ondoren, garapen teorikoan azaldu dugun dentsitate-dentsitate erantzun funtzioa kalkulatu dugu. Hasteko, 2(a)-(b) irudietan, karga-karga dentsitate erantzun funtzioaren emaitza erakusten dugu. 2(a) irudian, elkarrekintzarik gabeko erantzuna (χ^{KS}) ematen dugu, frekuentzia eta momentu-transferentziaren funtzioan (ikus 1) ekuazioa). Lehenago azaldu dugun bezala, funtzio honek elektro bakar bateko kitzikapenak gertatu daitezkeen eremuak adierazten ditu. Kitzikapen kolektiboaren dispersioa eremu honetan badago, bere energia eta momentua quasipartikula kitzikapenetara transferituko da, eta beraz bizidena oso laburra izango du. 2(b) irudian, elkarrekintzadun karga-karga erantzun

⁴Energia honek sisteman okupatuta dagoen azken maila elektronikoen energia adierazten du (Ashcroft eta Mermin, 1976).

2 Irudia: Tl/Si(111) gainazalaren erantzun funtzio dinamikoaren kalkuluaren emaitzak. (a) atalean elkarrekintzarik gabeko karga-karga erantzun funtzioa ematen da, elektroi bakar baten kitzikapenak gertatu daitezkeen eremuak adierazten dituena. (b) atalean elkarrekintzadun karga-karga erantzun funtzioa erakusten da, zeinen erresonantziek kitzikapen kolektiboak adierazten dituzten. (c) eta (d) ataletan elkarrekintzarik gabeko eta elkarrekintzadun spin-karga erantzun funtzioak ematen dira, hurrenez hurren. Kolore kodeak erantzunaren intentsitatea ematen du, unitate atomikoetan.



funtzioa ematen dugu. Bertan, elektroi bakarreko kitzikapen eremutik kanpo geratzen den erresonantzia nabarmen bat ikusi dezakegu. Erresonantzia honek Tl/Si(111) gainazalean ondo definitutako karga plasmoi bat dugula adierazten du. χ_{00} funtzioaren maximoaren dispersioa neurtutako bi dimentsioetako plasmoinen dispersioekin konparatzen badugu (Nagao *et al.*, 2001), oso antzerakoak direla ikusi dezakegu. Honek plasmoinen parte hartzen duten elektroiak gainazalean lokalizatuta daudela konfirmatzen du, espero genuen bezala, Fermi mailak gainazal egoeren bandak soilik gurutzatzen baititu (ikusi 2(a) irudia).

Azkenik, spin-orbita elkarrekintzak eta gainazal egoeren spin polarizazioak Tl/Si(111) sistemaren erantzunean duten efektua aztertuko dugu. Horretarako, spin-karga erantzun funtzioa erakusten dugu 2(c)-(d) irudietan, x norabideko spin dentsitate aldaketa ematen duena kanpo-potentzial elektriko batekiko (ikusi (4) ekuazioa). Momentu transferentzia y norabidean aukeratu dugu kalkuluetan, eta beraz simetriagatik spin-erantzuna x norabidean bakarrik izango da nabarmena (ikusi 2(b) irudia eta Maiti *et al.* (2015) erreferentzia). 2(c) irudian ikusten dugunez, spin-polarizatutako egoerak izateak, elektroi bakarreko kitzikapenek spin-karga erantzuna ere ematea ekartzen dute. Ez hori bakarrik, spin-banandutako bi banda izatean, bi banda hauen arteko trantsizioak ere posibleak dira, kontrako zeinua dakartena χ_{x0}^{KS} funtzioan. Lan honetako emaitza nagusia 2(d) irudian ematen da. Bertan, elkarrekintzadun spin-karga erantzun funtzioak erresonantzia nabarmen bat duela ikusten dugu, karga-karga erantzuneko erresonantziaren dispersio berdinarekin. Honen ondorioz, lehenago aipatutako bi dimentsioko plasmoina benetan plasmoi konbinatu bat izango dela ikusten dugu, karga-dentsitate oszilazioaz aparte, x norabideko spin-dentsitate oszilazioak ere ekarriko dituena. Gainera, spin-karga erantzunean karga-karga erantzunean ikusten ez diren efektu interesgarri batzuk azalaratzen dira. \mathbf{q} txikien limitean, esate baterako, karga-karga erantzunaren intentsitatea txikitzen doala ikusten dugu; spin-karga erantzunean, aldiz, intentsitatea handitzen doa. \mathbf{q} txikitzen plasmoin konbinatuaren spin osagaia kargarena baino handiagoa izango dela

adierazten du emaitza honek.

4 Ondorioak

Lan honetan, Tl/Si(111) gainazalaren spin eta karga erantzun funtzioaren kalkuluak aurkeztu ditugu. Horretarako, lehen-printzipioetan oinarritutako metodoetan oinarritu gara, eta spin-orbita elkarrekintzak eragindako efektuak sakonki aztertu ditugu. Ikusi dugunez, efektu erlatibista honek gainazal egoeren spin-banantzea ekartzen du, hauetan spin-polarizazio konplexuak indusituz. Honen eraginez, bi dimentsioko plasmoiaren dispersio berdina duen kitzikapen kolektibo berri bat azalaratzen da, karga-dentsitate oszilazioetaz gain, spin-dentsitate oszilazioak ere dakartzana.

5 Etorkizunerako planteatzen den norabidea

Artikulu honetan aurkeztu diren garapen teorikoak, bai eta kalkuluak burutzeko garatu ditugun kode konputazionalak ere, guztiz orokorrak dira, eta Tl/Si(111) gainazala ez den beste edozein sistematan zuzenean aplikatu ditzakegu. Hau izango da, beraz, etorkizun hurbileneko norabidea; spin egitura konplexuagoak erakusten dituzten gainazalaren erantzun funtzioaren berezitasunak aztertzea, spin eta karga kitzikapen kolektibo mota berriak aurkitzeko asmoz. Aurreragorako norabide bezala, plasmoiak spin eta karga izaera konbinatua edukitzearen eragina sakonki aztertu nahiko genuke gorputz-anitzeko fisika-teoriaren baitan, hauen elkarrekintza elektroiekin aztertzean SU(2) simetriadun spinore formalismoa barneratuz.

Erreferentziak

- ASHCROFT, N., eta D. MERMIN. 1976. *Solid State Physics*. Saunders College.
- COHEN-TANNOUJDI, CLAUDE, BERNARD DIU, eta FRANCK LALOE. 1978. *Quantum Mechanics*. Wiley.
- DAVISON, SIDNEY G., eta MARIA STEŃSLICKA. 1992. *Basic Theory of Surface States*. Clarendon Press.
- DEWHURST, J. K., S. SHARMA, L. NORDSTRÖM, F. CRICCHIO, O. GRÄNÄS, eta H. GROSS. <http://elk.sourceforge.net/>.
- DIACONESCU, BOGDAN, KARSTEN POHL, LUCA VATTUONE, LETIZIA SAVIO, PHILIP HOFMANN, VYACHESLAV M. SILKIN, JOSE M. PITARKE, EUGENE V. CHULKOV, PEDRO M. ECHENIQUE, DANIEL FARIAS, eta MARIO ROCCA. 2007. Low-energy acoustic plasmons at metal surfaces. *Nature* 448:57–59.
- KRAMERS, H. 1930. Théorie générale de la rotation paramagnétique dans les cristaux. *Proc. Amsterdam Akad.* 33:959–972.
- MAITI, SAURABH, VLADIMIR ZYUZIN, eta DMITRII L. MASLOV. 2015. Collective modes in two- and three-dimensional electron systems with Rashba spin-orbit coupling. *Phys. Rev. B* 91:035106.
- MARTIN, R. M. 2004. *Electronic Structure: Basic Theory and Practical Methods*. Cambridge University Press.
- NAGAO, TADAOKI, TORSTEN HILDEBRANDT, MARTIN HENZLER, eta SHUJI HASEGAWA. 2001. Dispersion and damping of a two-dimensional plasmon in a metallic surface-state band. *Phys. Rev. Lett.* 86:5747–5750.
- SILKIN, V. M., A. GARCA-LEKUE, J. M. PITARKE, E. V. CHULKOV, E. ZAREMBA, eta P. M. ECHENIQUE. 2004. Novel low-energy collective excitation at metal surfaces. *EPL (Europhysics Letters)* 66:260.

6 Eskerrak eta oharrak

Eusko Jaurlaritzaren Hezkuntza, Unibertsitate eta Ikerkuntza Sailari, Euskal Herriko Unibertsitateari (UPV/EHU) (IT756-13) eta MINECO-ri (FIS2013-48286-c2-1-P eta FIS2016-75862-P) eskertu nahi diegu lan hau aurrera eraman ahal izateko eman dizkiguten baliabide ekonomikoengatik. Baliabide konputazionalak Donostia International Physics Center-ek (DIPC) eman dizkigu. J.L-k DIPC-ri eta UPV/EHU-ri (PIF/UPV/16/240) eskertu nahi dio babes ekonomikoa.