

# INFLUENCIA DE LA TENSION INTERNA EN LA ESTRUCTURA DE BANDAS Y LA DENSIDAD LOCAL DE ESTADOS ELECTRONICOS EN LA INTERFACE V-Ta (100)

R. De Coss\*, A. Noguera\* y R. Baquero\*

\*Depto. de Física, Univ. Aut. de Puebla, Apdo. Postal J-48, Puebla, Pue. +Depto. de Física, CINVESTAV-IPN, Apdo. Postal 14-740, 07000 México, D.F.

Al crecer vanadio sobre tántalo se produce una tensión en la interfase debido a que las constantes de la red difieren (aprox. 10%). La tensión se produce principalmente en las primeras capas, manifestándose en la estructura de bandas proyectada. En este trabajo empleamos el método de acoplo de funciones de Green para obtener la estructura de bandas y la densidad local de estados a cada lado de la interfase y estudiamos el efecto de la tensión usando la teoría de Harrison. Describimos nuestros sistemas por medio de Hamiltonianos tight-binding, en base s-p-d ortogonal, a terceros vecinos y consideramos la interfase en la dirección (100). Encontramos que tomar en cuenta la tensión es importante para la descripción correcta de la interfase.

## 1. INTRODUCCION

La completa comprensión de la física de las interfaces - aunque interesantes por sí mismas - es un punto de partida importante para el estudio detallado de las superredes y pozos cuánticos, cuyas aplicaciones prácticas son muy amplias. Las interfaces metálicas han sido menos estudiadas que las superficies. Las propiedades electrónicas de las mismas son responsables de las características de la interfase: reconstrucción, propiedades termodinámicas, formación de compuestos, etc. las cuales dependen, algunas veces, incluso de los detalles de interacción entre las dos capas atómicas de los materiales en contacto.

Un factor importante en la formación de una interfase es la configuración de un elemento con respecto al otro. En el caso del crecimiento de capas de un material sobre otro, la geometría del sustrato suele influir la de la capa crecida encima, es decir, que la separación interatómica y la estructura cristalina son adoptables o influenciadas por las características del sustrato. En el caso de dos medios semi-infinitos en contacto, hay una tensión interna que tiende a obligar al material con constante de red mayor a contraerse y al otro material a expandirse. Este efecto influye, en general, en la posición en energía de los estados de interfase, y en las densidades locales de estados.

En este trabajo estudiamos el efecto de la tensión en el caso de una interfase formada por dos metales de transición, Vanadio y tántalo. El vanadio tiene una constante de red de 3.03 Å mientras el tántalo de 3.3 Å. Se trata, por consiguiente, de aproximadamente un 10% de diferencia en las constantes de la red. Esta diferencia es muy grande y es la causa de una importante tensión.

En lo que sigue, presentamos las densidades locales de estado y los diagramas de lente para la

interfase ideal y la tensionada en la dirección (100).

Nuestra descripción hace uso de hamiltonianos de amarre fuerte (tight-binding), en base a los cuales calculamos la función de Green en la interfase con el método de empalme de funciones de Green. Con el conocimiento de ésta, la densidad local de estados y los diagramas de lentes se calculan con las fórmulas conocidas. Este método ha sido descrito con amplitud anteriormente por lo cual no lo discutiremos aquí, los detalles matemáticos del método se describen en las referencias 1-4 y los detalles de la inclusión de la tensión interna en la descripción de las interfaces con hamiltonianos de amarre fuerte, en las referencias 5 y 6.

## II. RESULTADOS Y DISCUSION.

### a. Densidad local de estados.

En la Fig. 1, presentamos la densidad local de estados proyectada en la capa atómica de vanadio y de tántalo, respectivamente, para el caso ideal y el caso tensionado.

Comparemos primero la discontinuidad en la interfase, esto es, el cambio al pasar de un material a otro. La observación más obvia, es el hecho de que las densidades de estado en uno y otro lado de la interfase difieren notoriamente. La diferencia esencial está en la intensidad de las curvas y en el ancho de la estructura: mientras en el vanadio los picos son menos anchos y más intensos, en el tántalo se mantiene la curva con una intensidad media mayor, distribuída en un intervalo más ancho de energía.

En las curvas correspondientes al volumen proyectado (no mostradas en figura), los metales de transición con estructura bcc presentan la característica de tener dos picos principales separados por un mínimo relativo cerca del cual se suele encontrar el nivel de Fermi. Las densidades

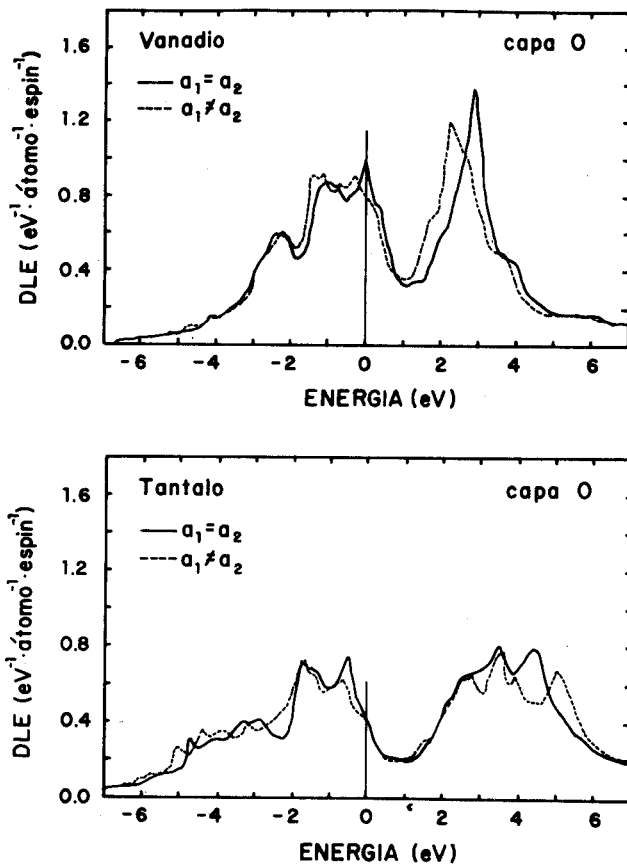


Fig. 1 Densidad local de estados, interface V-Ta (100). Sin tensión (-), con tensión (---).

locales de estados de las capas atómicas que configuran la interface presentan rasgos muy similares a las curvas respectivas de volumen, como podemos observar en la Fig. 1.

Es de anotar que la actividad particular a la interface depende, en cierto sentido, de su diferencia con el volumen mismo. Esto se refleja en el perfil cerca del nivel de Fermi, del valor de la densidad de estados allí y de la existencia de estados de interface así como de su simetría.

Observemos en detalle, el caso del lado del vanadio (Fig. 1). La curva continua representa el caso sin tensión. Esta curva tiene las características mencionadas anteriormente, es decir, dos picos principales separados por un mínimo relativo. El nivel de Fermi,  $E_F$ , cae, en este caso, en el punto de máxima intensidad del pico situado a menor energía. El valor de la densidad local de estados en  $E_F$  es alrededor de 20%

mayor que la del volumen. De acuerdo a lo dicho anteriormente, esto predice una actividad especial de esta interface que debería ser registrada experimentalmente.

Al introducir tensión, observamos un corrimiento y una disminución en intensidad del pico de alta energía como característica fundamental. Cambios menores se registran por debajo del nivel de Fermi. La población del nivel de Fermi, que es determinante para la actividad de la interface, regresa, por efecto de la tensión, al valor que tiene en el volumen. Esto

implica que la actividad particular a la interface va a estar determinada sólo por las simetrías propias de los estados confinados a la misma, los cuales discutiremos más abajo. Pero una primera conclusión parece posible: la cara (100) del vanadio en la interface V-Ta, en base ortogonal s-p-d, y con interacción hasta terceros vecinos, no presenta indicios de ser activa. El vanadio, sin embargo, podría presentar una actividad especial en interfaces donde no esté tensionado de acuerdo al análisis anterior. A este respecto es interesante recordar de que, en base a un cálculo sin tomar en cuenta la tensión, Baquero et al.<sup>2</sup> encontraron que podría existir magnetismo en la cara de vanadio, en la dirección (100), en algunas interfaces. Este magnetismo de interface ha sido predicho también por Freeman et al.<sup>8,9</sup>

Analicemos ahora el lado del tántalo. En este caso las observaciones son muy similares al caso anterior: los cambios realmente notorios ocurren en la parte de alta energía del espectro. Un detalle importante es observar lo que ocurre cerca del nivel de Fermi,  $E_F$  ( $\sim -0.5$  eV). La población en  $E_F$  es del orden de 0.4 estados  $eV^{-1} \text{ átomo}^{-1} \text{ espín}^{-1}$ , menos de la mitad que en la cara del vanadio. Comparando esta cifra con el volumen, encontramos que es menor en un 20%.

El efecto de la tensión en esta casa es la atenuación substancial del pico en  $\sim -0.5$  eV mencionado arriba donde la población disminuye aproximadamente 14% con respecto al caso sin tensión. En el nivel de Fermi, la población no se afecta en forma substancial, en contraste con lo que sucede en la casa del vanadio. Comparando esta cifra con el volumen, encontramos que es menor en un 20%.

Es decir, para resumir esta parte del análisis, que el efecto de la tensión sobre la densidad local de estados es grande y, en consecuencia, es importante incluir este efecto para una correcta descripción de la actividad de la interface. Esto no invalida la conclusión de que algunas interfaces de vanadio en la dirección (100) puedan presentar actividad magnética en la cara del vanadio. Lo que este estudio hace es precisar las condiciones en las cuales este fenómeno puede darse.

Pasamos ahora a analizar en más detalle el efecto sobre los estados propios de la interface.

#### b) Los diagramas de lentes.

Los diagramas de lentes se obtienen discriminando los sitios del plano energía vs. momento donde hay estados permitidos. Primero se dibuja el volumen proyectado en la dirección perpendicular a la dirección (100), es decir, paralela a la interface considerada. Así se obtiene los "lentes" o zonas prohibidas donde no hay estados de volumen. Para ello es necesario conocer la densidad local de estados como función del momento y de la energía. El momento se deja correr por la irreducible de la primera zona de Brillouin proyectada en dos dimensiones en la dirección deseada. La densidad local de estados se obtiene de la función de Green del sistema por las fórmulas conocidas.

Sobre este "mapa de lentes" se proyectan los estados de interface, es decir, los estados electrónicos cuya función de onda tiene una amplitud que decrece muy rápidamente a cada lado de

la interface y, por lo tanto, que solo existen allí, espacialmente hablando. Estos estados determinan la actividad propia de la interface y dan lugar a efectos localizados que se detectan experimentalmente, como algunas transiciones ópticas o el magnetismo de interface por mencionar algunos efectos.

Existen otros estados llamados resonancias, que se originan en la interface pero cuya energía cae en un lugar donde estados de volumen son permitidos (en sitio sombreado del diagrama). La manera de detectarlos es graficando la densidad local de estados (DLE) como función de la energía a un momento constante. Se grafica la diferencia de DLE calculada para la interface y la de volumen. Estas resonancias aparecen como picos en una gráfica de este tipo y las correspondientes antirresonancias como el negativo de los primeros. Estas últimas permiten establecer el sitio desde el cual el efecto de interface removió el peso en la DLE para generar la resonancia. En nuestro estudio no incluimos las resonancias. Nuestras figuras sólo muestran estados en las lentes y el efecto de la tensión sobre ellos.

En la Fig. 2, representamos el diagrama de lentes correspondiente a la cara del vanadio. Lo primero que se observa es que hay pocos sitios donde aparecen estados de interface. Hay algunos alrededor del punto X y en el intervalo X-M por debajo del nivel de Fermi. Una banda de pequeño ancho se desarrolla en la parte inferior de la lente principal cerca del nivel de Fermi. Estos estados están parcialmente en los intervalos X-M y M- $\Gamma$ . Son estados desocupados muy cerca del nivel de Fermi, por lo tanto fácilmente accesibles experimentalmente. Estos son los que determinan la actividad de la interface en el lado del vanadio.

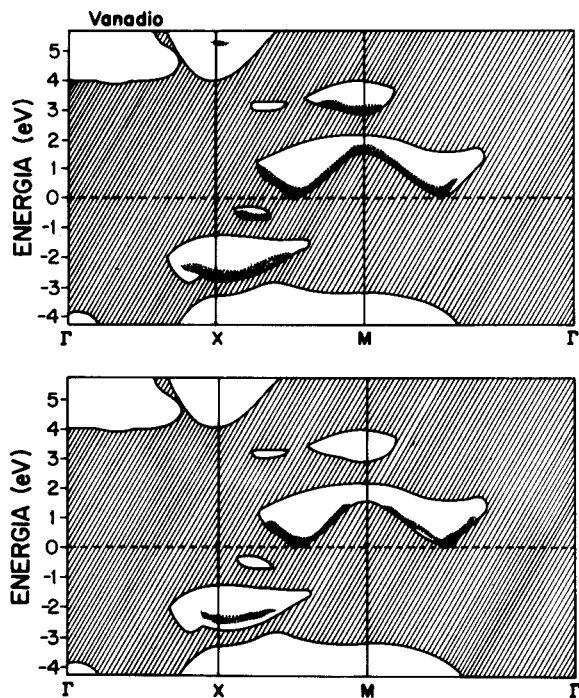


Fig. 2 Estructura de bandas proyectada y estados de interface, lado del vanadio. Sin tensión (arriba), con tensión (abajo).

En la misma Fig. 2, en la parte inferior, mostramos el resultado al incluir la tensión. Observemos que los estados de energía alta (más de 3 eV por encima del nivel de Fermi) han emigrado de la zona de los lentes, convirtiéndose, probablemente, en resonancias. En la parte muy baja en energía (3 eV por debajo del nivel de Fermi), la banda en la lente se desplazó ligeramente a energías mayores. Pero el efecto mayor es la total desaparición de los estados de interface en el punto M. La banda que recorría dentro de la lente desde, aproximadamente, un tercio de la distancia X-M, hacia M y luego hacia  $\Gamma$  hasta casi la mitad del intervalo ha sido dividida en dos, ambas desapareciendo en un entorno de M. Probablemente, se encontrarán resonancias alrededor de este punto.

El análisis que hemos acabado de hacer, junto con el realizado anteriormente para la densidad local de estados permite concluir que la interface no va a ser particularmente activa. Muy probablemente, esta interface no será magnética como se predice de un cálculo sin incluir la tensión. Esta observación complementa la obtenida anteriormente en la referencia 6. Aunque no creemos que la interface V/Ta va a ser magnética puesto que este efecto parece desaparecer al incluir tensión, si confirmamos que algunas interfaces de vanadio con otros elementos pueden serlo bajo ciertas condiciones que no se dan aquí: Esta predicción es nueva.<sup>6,8,9</sup> No ha sido detectada experimentalmente. Es bueno recordar que la predicción hecha por Allan<sup>10</sup> acerca de la existencia de una superficie magnéticamente activa en la cara (100) de este material fué posteriormente confirmada por Rau.<sup>11</sup> Para complementar nuestra predicción agregaremos que nuestro trabajo parece indicar la cara V(100)

en interface con metales puede ser magnética cuando no hay tensión y cuando los estados de la banda d que son los que dan lugar al magnetismo no tienen estados disponibles del otro lado de la superficie. Creemos que en interface metales con algunos metales de banda s (como los metales simples y los nobles), con aislantes o semiconductores, el efecto será más notorio. Los aislantes y los semiconductores actuarán casi como el vacío para los electrones en la banda d del vanadio y el mismo efecto de la superficie puede darse.

Consideremos ahora la cara del Tántalo, estudiada en la Fig. 3. Nuevamente parte superior se refiere al caso sin tensión. Esta interface presenta muchos estados localizados como puede observarse en la misma figura. Llama la atención los estados por encima del nivel de Fermi en el punto  $\Gamma$  ya que en la cara (100) de la superficie del tántalo fueron detectados en experimentos de fotoluminiscencia inversa, muy recientemente<sup>12</sup>. Sin embargo, estos estados desaparecen al incluir la tensión y por lo tanto no predcimos su existencia en esta interface.

Comparando la parte superior de la Fig. 3, con la parte inferior, observamos que una buena parte de los estados localizados en la interface predichos por el cálculo sin tensión desaparecen al incluir la tensión, corroborando la importancia de incluirla para una descripción correcta de estos sistemas.

La interface en el lado del tántalo no parece poder presentar mucha actividad ya que no tiene estados ni ocupados ni desocupados cerca del nivel de Fermi. Esto está en acuerdo con el hallazgo de Falco et al.<sup>13</sup> para la interface Mo/Ta quien en un

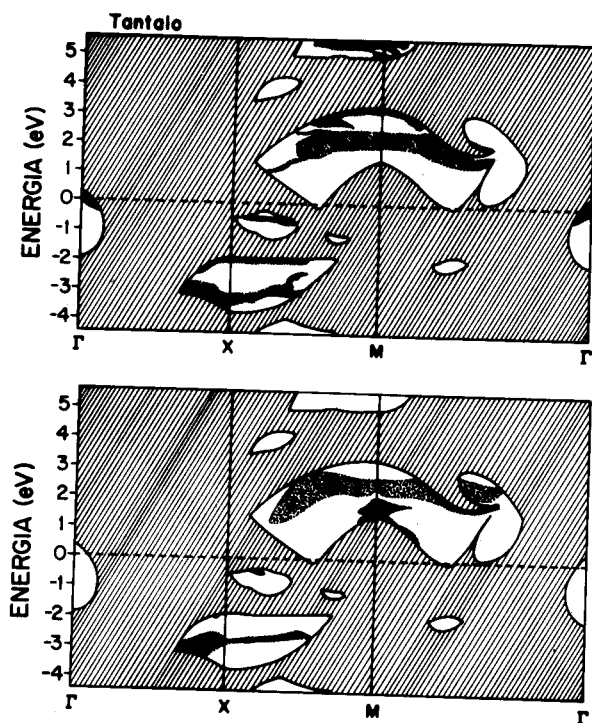


Fig. 3 Estructura de bandas proyectada y estados de interface, lado del tántalo. Sin tensión (arriba), con tensión (abajo).

estudio experimental por tunelamiento no logró encontrar estados de interfaces.

### III. CONCLUSION

Hemos hecho un cálculo de la densidad local de estados y de los diagramas de lentes de la interface V/Ta incluyendo el efecto de la tensión. Hemos descrito el sistema por medio de hamiltonianos de amarre fuerte empírico (empirical tight-binding hamiltonians), en base s-p-d ortogonal y con una interacción con alcance hasta terceros vecinos. Hemos obtenido la función de Green del sistema por el método de empalme de funciones de Green (SGFM) y de ella la densidad local de estados (Fig. 1) y los diagramas de lentes (Figs. 2 y 3).

Nuestra conclusión fundamental es que la tensión tiene una influencia importante en la descripción de las interfaces y que debe tenerse mucho cuidado al despreciar este efecto. En base a estudios anteriores de esta interface y a este mismo, corroboramos la predicción de que la cara del vanadio en la dirección (100) puede presentar magnetismo. Precisamos que el magnetismo puede darse cuando la interface no está sometida a tensión, o cuando esté compuesta de un metal de banda s o p, de un semiconductor o de un aislante y de vanadio. Esta predicción está en acuerdo con la que hicieron Freeman et al.<sup>8,9</sup>, en forma independiente.

Finalmente, agregamos que la tensión no puede despreciarse tampoco en la descripción de pozos cuánticos o de superredes sin las precauciones necesarias para no cometer serios errores.

### IV REFERENCIAS

1. F.García-Moliner and V.R.Velasco, Prog. Surf. Sci. 21, 93 (1986).
2. R.Baquero, A.Noguera, A.Camacho and L. Quiroga, Phys. Rev. B42,(1990). in press.
3. R.Baquero, V.R.Velasco and F.García Moliner, Phys. Scripta, 38,742(1988).
4. R.Baquero, A.Noguera, Rev. Mex. Fís.35, 604 (1989).
5. R. De Coss, A. Camacho, A. Noguera and R. Baquero, Rev. Mex. Fís. (enviado).
6. R. Baquero, R. de Coss, A. Noguera, A. Camacho and L. Quiroga, Phys. Rev. B. (enviado).
7. W.A.Harrison, Electronic Structure and the Properties of Solids, (Freeman, San Francisco, 1980).
8. A.J.Freemann et al., Proceedings of the International Symposium on Physics of Magnetic Materials, Sendai, Japan 8-11 april 1989, World Scientific 1987 p.221.
9. A.J.Freemann et al., Proceedings of the Metallic, Multilayers and Epitaxy, Denver, Co., USA, 24-25 feb. 1987,p.279.
10. G. Allan, Phys. Rev. B 19, 4774 (1979).
11. C.Rau, C.Liu, A.Schmalzbauer and G.Xing, Phys. Rev. Lett. 57, 2311 (1986).
12. R.A.Bartynski and T.Gustafsson, Phys.Rev B 35, 939(1987); R.A.Bartynski et al., Phys. Rev. B 40, 5340 (1989); E. Jensen, R.A. Bartynski and M. Weinert, Phys. Rev. B 41, 12468 (1990).
13. A.M. Cucolo, L.Maritato, R.Vaglio and C.M.Falco, Proceedings of the 2nd Soviet Italian Symp. on Weak Superconductivity, May 1987, Naples, Italy. Edited by A. Larkin. Progress in High Temperature Superconductivity. Vol.4, World Scientific, pag. 283.