

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КВАНТОВЫХ СОСТОЯНИЙ В ПЛЕНОЧНЫХ ФЕРРОМАГНИТНЫХ НАНОСТРУКТУРАХ

В.В. Филиппов, д-р физ.-мат. наук, проф.^{1,2},

А.А. Родионова, аспирант³

¹*Липецкий государственный педагогический университет*

имени П. П. Семенова-Тян-Шанского, Липецк, Россия

²*Московский государственный университет технологий и управления*

имени К. Г. Разумовского (Первый казачий университет), Липецкий казачий институт технологий и управления (филиал), Липецк, Россия

³*Елецкий государственный университет имени И.А. Бунина, Елец, Россия*

В работе на основе основных квантово-механических представлений, с учетом граничных условий для связанных квантовых ям получены выражения для энергетического спектра электронов. Ферромагнитные свойства никеля учитываются посредством величины эффективной массы. На основе численного решения полученных в работе трансцендентных уравнений показано влияние соотношения толщин ферромагнитного металла и его оксида на энергетические уровни электронов, локализованных в оксидном слое. Результаты и выводы работы могут быть использованы для теоретического прогнозирования физических свойств магнитных наноструктур, в частности элементов спинтроники.

Ключевые слова: *нанопленка никеля, квантовая яма сложной формы, гетероструктура, энергетический спектр, спинтроника.*

В электронике наноструктуры из Ni и NiO получили распространение благодаря своим электромагнитным свойствам и химической стойкости к агрессивным внешним воздействиям [1, 2]. Пленки никеля получают, как правило, на поверхности металлов используя методы вакуумного осаждения [2], электрохимического или химического выделения [3]. Для стабилизации структур или для управления электромагнитными свойствами, зачастую, пленки Ni покрывают слоем NiO. Данные оксидные пленки могут быть получены высокотемпературным окислением Ni или вакуумным осаждением NiO. Экспериментальные исследования [1, 4, 5] указывают, что NiO проявляет свойства полупроводника р-типа с шириной запрещенной зоны порядка 3,5 – 4 эВ.

В известной литературе [6, 7] подробно описывается энергетический спектр свободных электронов в области потенциальных барьеров и квантовых ям (КЯ) различной сложности, однако на практике при образовании твердотельных наноструктур необходимо учитывать не только сложный рельеф потенциальной энергии, но и изменение эффективной массы. Для большинства металлов эффективная масса электрона близка к массе свободного электрона, однако для ферромагнетиков это условие существенно нарушается.

Для проводимого теоретического анализа используем модель идеализированного резкого гетероперехода [6, 7], в рамках которой изменение параметров металла (полупроводника) происходит на гетерогранице скачком, отсутствуют локализованные на гетерогранице дополнительные электронные состояния, вблизи гетерограницы не образуются электрические диполи атомарного масштаба.

Рассмотрим последовательно виды КЯ, образуемых на основе материалов, представленных в таблице 1. В дальнейших расчетах выбираем наиболее применяемые в известных работах экспериментальные величины, представленные в таблице 1. Характерной особенностью ферромагнитных материалов является значимое значение эффективной массы свободных электронов $m^* \gg m_e$ ($m_e = 9.1 \cdot 10^{-31}$ кг) [8, 9].

Таблица 1. Параметры материалов, моделируемых квантовых структур [4, 8-9]

Материал	Работа выхода (глубина потенциальной ямы), эВ	Эффективная масса электрона, m
NiO	5,5	1
Ni	5,0	12
Cu (подложка)	4,5	1,3

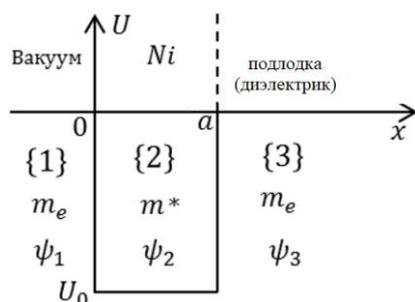


Рисунок 1. – Энергетическая модель одномерной квантовой ямы (КЯ)

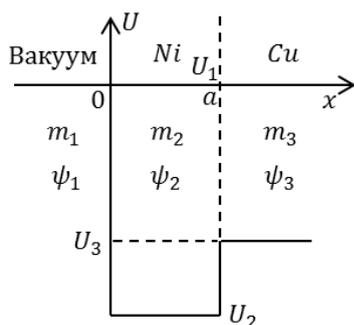


Рисунок 2. – Энергетическая модель ямы в структуре вакуум-никель-металлическая подложка

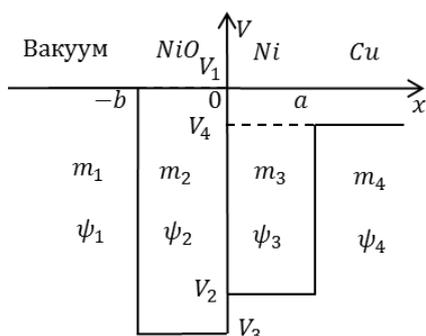


Рисунок 3. – Энергетическая модель ямы в слоистой структуре оксид-металл (пленка)-подложка

Моделирование самостоятельной квантовой точки Ni. Первоначально рассмотрим наиболее простую, качественную модель нанопленки металла, которой является модель квантовой ямы конечной глубины (рис. 1, $U_0 \neq \infty$).

Здесь и далее учитываем размер (a), глубину КЯ (работа выхода электрона U_0), а также эффективную массу электрона m^* [8, 9].

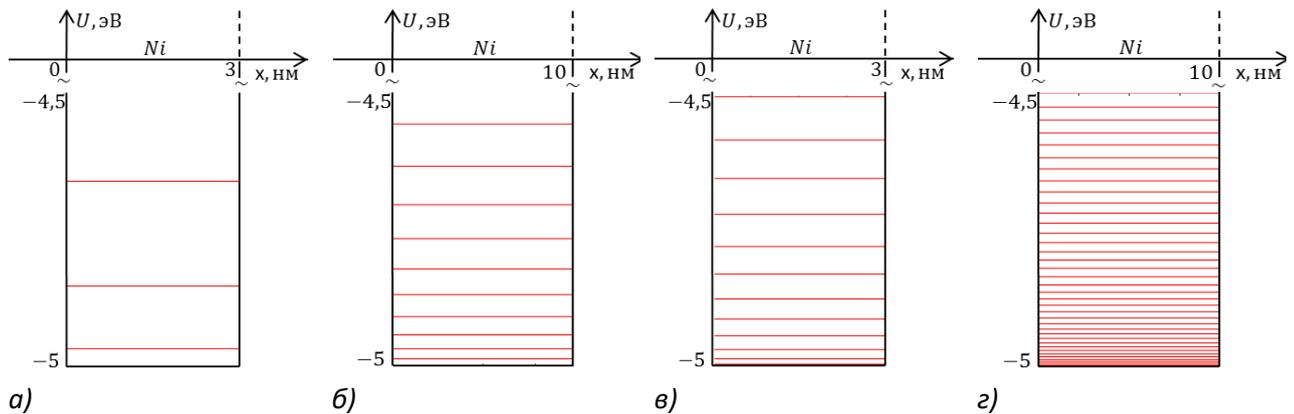
Условия квантования энергетического спектра в данном случае являются известными [6] и представляются в виде:

$$\left[1 - \left(\frac{m_e \cdot k_2(E)}{m^* \cdot k_1(E)} \right)^2 \right] \sin(k_2(E) \cdot a) + 2 \frac{k_2(E)}{m^*} \cdot \frac{m_e}{k_1(E)} \cos(k_2(E) \cdot a) = 0, \quad (1)$$

где

$$k_1 = \sqrt{2m_e(E - U_0)} / \hbar, \quad k_2 = \sqrt{2m^*E} / \hbar. \quad (2)$$

Согласно приведенному выражению (1), можно определять положения энергетических уровней электронов в пленке Ni в зависимости от толщины пленки a . Выполненное моделирование (рис. 2) показывает необходимость учета эффективной массы при расчетах плотности электронных состояний в КЯ. Приведенные ниже расчеты выполнены в математическом пакете Mathcad.



а), б) положение уровней при $m^* = m_e$; в), г) положение уровней с учетом m^*

Рисунок 4. – Структура энергетических уровней в изолированной квантовой яме Ni.

Модель квантовой ямы Ni на подложке Cu. Рассмотрим моделирование энергетических спектров в нанопленке никеля толщиной a на медной подложке (рис. 2). Полученное нами дисперсионное соотношение для уровней энергии в яме удобно можно представить в виде (3):

$$\frac{\zeta_3}{\zeta_1} - \frac{m_1}{m_3} + \left(\frac{\zeta_3}{\zeta_2} \frac{m_2}{m_3} - \frac{\zeta_2}{\zeta_1} \frac{m_1}{m_2} \right) \operatorname{tg} \zeta_2 a + 1 = 0, \quad (3)$$

где

$$\zeta_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_1(U_1 - E)}, \quad \zeta_2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_2(E - U_2)}, \quad \zeta_3 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_3(U_3 - E)}. \quad (4)$$

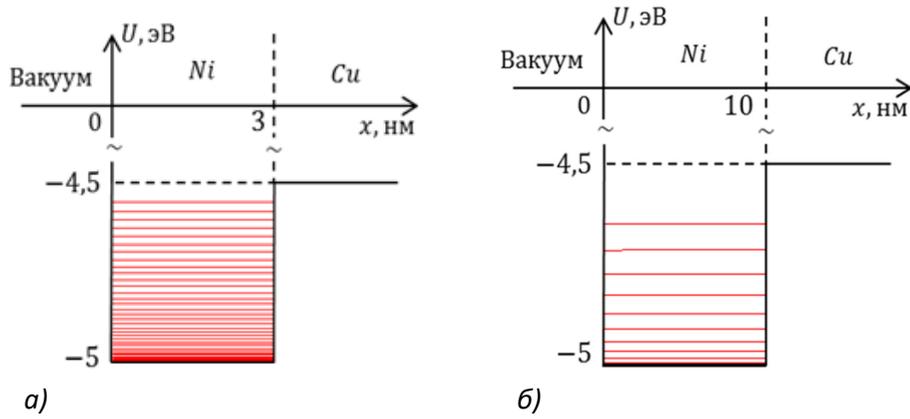


Рисунок 5. – Структура энергетических уровней в КЯ Ni на медной подложке с учетом толщины ямы

Расстояние между нижними энергетическими уровнями в никеле на подложке становится порядка 0,1 эВ, соответственно, для наблюдения эффектов размерного квантования необходимо условие $kT \ll \Delta E$, температура менее 100 К.

Оксидированная структура NiO-Ni на подложке Cu. Проанализируем модель, представляющую квантовую яму, состоящую из 4 областей, схема которой указана на рис. 3. На данном рисунке m_i – эффективная масса носителей заряда в каждом из материалов структуры; V_1 и V_2 – положения дна зоны проводимости (для никеля) и потолка валентной зоны (для NiO); a, b – толщины нанослоев, образующих среднюю область резонансно-туннельной структуры.

Полученное выражение для определения спектра энергии в КЯ, удобно представить в виде:

$$\begin{aligned}
 & -\operatorname{tg}(\kappa_2 b) \operatorname{tg}(\kappa_3 a) \left[\frac{\kappa_1 \kappa_3}{m_1 m_3} + \frac{m_3}{m_2^2 m_4} \cdot \frac{\kappa_2^2 \kappa_4}{\kappa_3} \right] + \operatorname{tg}(\kappa_2 b) \left[\frac{\kappa_1 \kappa_4}{m_1 m_4} - \frac{\kappa_2^2}{m_2^2} \right] + \\
 & + \operatorname{tg}(\kappa_3 a) \left[\frac{m_3}{m_1 m_2 m_4} \cdot \frac{\kappa_1 \kappa_2 \kappa_4}{\kappa_3} - \frac{\kappa_2 \kappa_3}{m_2 m_3} \right] + \frac{\kappa_2 \kappa_4}{m_2 m_4} + \frac{\kappa_1 \kappa_2}{m_1 m_2} = 0,
 \end{aligned} \quad (5)$$

где

$$\kappa_1 = \sqrt{2m_1(V_1 - E)} / \hbar, \quad \kappa_2 = \sqrt{2m_2(E - V_2)} / \hbar, \quad \kappa_3 = \sqrt{2m_3(V_3 - E)} / \hbar. \quad (6)$$

Используя модель, указанную на рис. 3 можно также определить условия квантования для структуры NiO-Ni-Cu в области провала ($E < V_2$):

$$\begin{aligned}
 & \left(1 + \frac{\kappa_4}{\kappa_3} \frac{m_3}{m_4} \right) \cdot \left[1 + \frac{\kappa_3}{\kappa_1} \frac{m_1}{m_3} + \left(\frac{\kappa_3}{\kappa_2} \frac{m_2}{m_3} - \frac{\kappa_2}{\kappa_1} \frac{m_1}{m_2} \right) \operatorname{tg} \kappa_2 b \right] + \\
 & + \left(1 - \frac{\kappa_4}{\kappa_3} \frac{m_3}{m_4} \right) \cdot \left[1 - \frac{\kappa_3}{\kappa_1} \frac{m_1}{m_3} - \left(\frac{\kappa_3}{\kappa_2} \frac{m_2}{m_3} + \frac{\kappa_2}{\kappa_1} \frac{m_1}{m_2} \right) \operatorname{tg} \kappa_2 b \right] \exp(-2\kappa_3 a) = 0.
 \end{aligned} \quad (7)$$

Таким образом, условие квантования (7) определяет спектр энергии электронов в области $(-b; 0)$.

Представленное на рис. 6 численное моделирование показывает, что толщина квантовой ямы Ni. Снижение толщины пленки, прогнозируемо, увеличивает разность между соседними энергетическими уровнями.

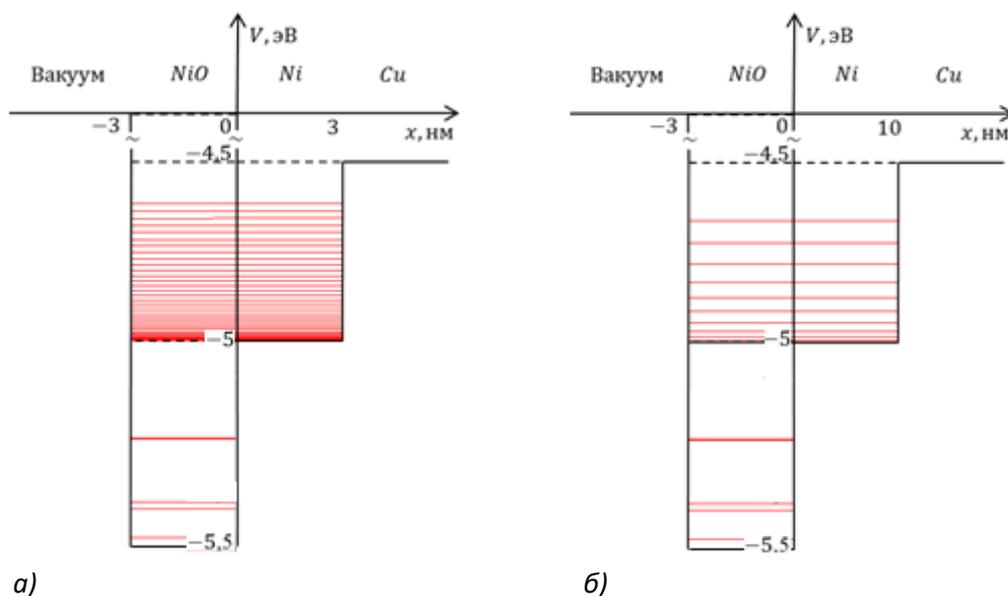


Рисунок 6. – Структура энергетических уровней в КЯ оксидированной структуры NiO-Ni на подложке Cu с учетом толщины ямы

Согласно полученным расчетам в нанопленках никеля ширина энергетической щели между нижними энергетическими уровнями составляет порядка 0,01 эВ. Принимая требование, что $kT \gg \Delta E$, получаем требование для температур $T \leq 10$ К (для условия $kT \approx 0,1\Delta E$).

Таким образом, в работе получены выражения, определяющие энергетический спектр в металлических квантовых точках на подложке. Магнитные свойства материалов учтены значением эффективной массы электрона. Показано, что учет эффективной массы в КЯ с ферромагнитными включениями, является весьма значимым фактором для расчета плотности энергетических состояний.

ЛИТЕРАТУРА

1. Агликов А.С., Кудряшов Д.А., Можаров А.М., Макаров С.В., Большаков А.Д., Мухин И.С. Особенности магнетронного напыления тонких пленок оксида никеля для применения в составе перовскитных солнечных элементов // Журнал технической физики. 2019. – Т. 89, вып. 3. – С. 460–464. – <https://doi.org/10.21883/JTF.2019.03.47186.290-18>.
2. Park J., Park Y., Choi S., Lee Z.F., Sim G. Fatigue behavior of freestanding nickel–molybdenum–tungsten thin films with high-density planar faults // Nanoscale. – 2024. – Vol. 16, Iss. 25. – P. 12050. – <https://doi.org/10.1039/D4NR01033G>.
3. Tong B., Ichimura M. Electrochemical Deposition of Transparent p-Type Semiconductor NiO // Electrical Engineering in Japan. – 2018. – Vol. 101, Iss. 2. – P. 45–50. – <https://doi.org/10.1002/ecj.12043>.
4. Суровая В.Э., Бугерко Л.Н., Суровый Э.П., Бин С.В. Исследование наноразмерных пленок никеля методом Зауэрбрея // Ползуновский вестник. – 2015. – Т.2, №4. – С. 90–94.
5. Moumen A., Kumarage G.C.W., Comini E.P. P-Type Metal Oxide Semiconductor Thin Films: Synthesis and Chemical Sensor Applications // Sensors. – 2022. – Vol. 22, No 4. – P. 1359. <https://doi.org/10.3390/s22041359>.

6. Драгунов В.П. Неизвестный И.Г., Гридчин В.А. Нанозлектроника. Часть 1. – М.: Юрайт, 2022. – 285 с.
7. Рембеза С.И., Рембеза Е.С., Кошелева Н.Н. Низкоразмерные структуры для микро- и нанозлектроники. – Воронеж: Воронежский государственный технический университет, 2015. – 114 с.
8. Фоменко В.С. Эмиссионные свойства элементов и химических соединений. – Киев: Наукова думка, 1981. – 339с.
9. Khuntia A., Sahu G., Sahoo R., Mahapatra D.P., Barik N. Non-extensive statistics in free-electron metals and thermal effective mass // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. – 2019. – Vol. 523. – P. 852–857. – <https://doi.org/10.1016/j.physa.2019.02.043>.