

Правительство Российской Федерации
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
«ВЫСШАЯ ШКОЛА ЭКОНОМИКИ»
(НИУ ВШЭ)
БАШКИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ ПЕДАГОГИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
им. М. АКМУЛЛЫ (БГПУ)

УТВЕРЖДАЮ

Проректор НИУ ВШЭ

_____ А.В. Бальшев

«__» _____ 2024 г.

ОТЧЕТ
О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ РАБОТЕ

КВАНТОВЫЕ ЭФФЕКТЫ В НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ГИБРИДНЫХ НАНОСТРУКТУРАХ
(5-ый этап)

Проект «Зеркальные лаборатории НИУ ВШЭ»
2023-2025 гг.

Руководитель подразделения НИУ ВШЭ, реализующего проект
Зав. Научно-учебной Лаборатории Квантовой Нанoeлектроники, проф. МИЭМ
д-р физ-мат.наук, профессор К.Ю. Арутюнов



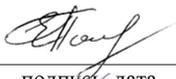
Руководитель подразделения университета-партнера, реализующего проект
И.О. Зав. лаборатории «Нанoeлектроника перспективных материалов» БГПУ
им.М.Акмуллы, д-р физ-мат. наук, В.М. Корнилов



Согласовано научной комиссией Московского института электроники и математики им.
А.Н. Тихонова:
Председатель научной комиссии Московский институт электроники и математики им.
А.Н. Тихонова, д-р тех. наук, профессор Е.А.Крук

Москва 2024

СПИСОК ИСПОЛНИТЕЛЕЙ

Руководитель НИР, Зав НУЛ КНЭ, проф. МИЭМ, проф., д-р физ.-мат. наук	 _____	К.Ю. Арутюнов (введение, заключение, раздел 1)
Отв. исполнитель, старший научный сотрудник (снс) НУЛ КНЭ, проф. МИЭМ, канд. физ.-мат. наук	 _____	Н.Г. Пугач (введение, заклучение, раздел 2)
Исполнители: Заместитель Заведующего НУЛ КНЭ, проф. МИЭМ, Ph.D.	 _____	А.С. Васенко (введение, заклучение, раздел 3)
Старший научный сотрудник НУЛ КНЭ, Доцент МИЭМ, канд. физ.-мат. наук	 _____	Е.А. Попова (введение, раздел 5)
Старший научный сотрудник НУЛ КНЭ, Доцент МИЭМ, канд. физ.-мат. наук	 _____	Р.Ш. Ихсанов (введение, раздел 4)
Исполнитель, научный сотрудник НУЛ КНЭ МИЭМ	 _____	Я.В. Туркин (раздел 2)
Исполнитель, стажёр-исследователь аспирант МИЭМ	 _____	Д.В. Селезнев (раздел 2)
Исполнитель, научный сотрудник, НУЛ КНЭ МИЭМ, к.ф.-м.н.	 _____	С.С. Сеидов (раздел 2)
Исполнитель, стажёр-исследователь, студент бакалавриата МИЭМ	 _____	Д.П. Милютин (раздел 2)
Исполнитель, стажёр-исследователь, студент магистратуры МИЭМ	 _____	А. Гурский (раздел 1)
Исполнитель, стажёр-исследователь, студент бакалавриата МИЭМ	 _____	Д.Г. Безымянных (раздел 2)
Исполнитель, стажёр-исследователь, аспирант МИЭМ	 _____	М.Р. Саматов (раздел 3)
Исполнитель, стажёр-исследователь, аспирант МИЭМ	 _____	Н.В. Лекомцев (раздел 2)

Руководитель НИР, О.о.зав. ЛНПМ БГПУ им.М.Акмуллы проф., д-р. физ-мат. наук		В.М. Корнилов (введение, заключение, раздел 1)
ВНС ФГБОУВО им.М.Акмуллы д.ф.-м.н.		Е.Г. Екомасов (Раздел 6)
Доцент, ФГБОУ ВО им.М.Акмуллы		А.Р. Юсупов (раздел 1)
Ст.преп., ФГБОУ ВО им.М.Акмуллы		Г.Ш. Байбулова (раздел 1)
Доцент, ФГБОУ ВО БГПУ им.М.Акмуллы		Д.Д. Карамов (раздел 1)
Доцент, ФГБОУ ВО БГПУ им.М.Акмуллы		А.Ф. Галиев (раздел 1)
Доцент, ФГБОУ ВО БГПУ им.М.Акмуллы		А.А. Лачинов (раздел 1)
Студент магистратуры ФГБОУ ВО БГПУ им.М.Акмуллы		Х.И. Далиятгареев (раздел 1)
Студент магистратуры ФГБОУ ВО БГПУ им.М.Акмуллы		А.Р. Яхин (раздел 1)
Нормоконтроль		К.Ю. Арутюнов

РЕФЕРАТ

Отчет 88 с., 45 источн.

КВАНТОВЫЕ ЭФФЕКТЫ В НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ГИБРИДНЫХ НАНОСТРУКТУРАХ

Усилия этого этапа проекта уфимской группы были направлены на описание физического механизма переключения электрической проводимости полимера класса полиарилефталидов из диэлектрического состояния в высокопроводящее (сверхпроводящее) в гибридных гетероструктурах низкой размерности.

Полидифениленфталид (ПДФ) – органический полимер, который в основном состоянии является диэлектриком, но в метастабильном состоянии, стимулированным внешним возмущением, обнаруживает электрическую проводимость. В настоящей работе в широком диапазоне температур экспериментально исследованы транспортные свойства тонкопленочных «сэндвичей» сверхпроводник – ПДФ – сверхпроводник. Целью работы было проведение сравнительных исследований квазидвумерных слоистых систем на базе ПДФ, где в качестве планарных электродов использовались два сверхпроводящих материала: свинец и индий. Изготовление свинцовых электродов производилось методом термического напыления, индиевые электроды формировались методом холодной прокатки. При толщинах ПДФ менее ~ 500 нм, как в случае со свинцом, так и с индием $R(T)$ и $V-I$ характеристики проявляют особенности, которые можно объяснить эффектом наведенной сверхпроводимости в тонкой пленке проводящего полимера, заключенной между двумя массивными сверхпроводниками.

В теоретическом разделе данной работы выполнен расчёт изменения критической температуры и параметра сверхпроводящего порядка в зависимости от толщины алюминиевой пленки методом функций Грина. Этот метод в его квазиклассической интерпретации также был использован для расчета обратного ферромагнитного эффекта близости. Было проведено теоретическое исследование свойств сверхпроводящих бислоев с ферромагнитным диэлектриком. В диффузионном пределе было решено квазиклассическое уравнение Узалея с граничным условием, записанным группой Эшрига для ферромагнитного диэлектрика. Предполагалось, что все материалы находятся в термодинамическом равновесии. В текущем приближении рассчитана наведенная намагниченность, возникающая в данной структуре в слое сверхпроводника. Структура абрикосовских вихрей в тонких пленках сверхпроводника рассчитывалась в приближении Гинзбурга-Ландау.

Проведен расчет диодного эффекта в гибридной сверхпроводящей структуре. Здесь также использовались квазиклассические уравнения Узалея. Результаты работы, помимо

большого фундаментального интереса, имеют широкую область применения в создании новых материалов и устройств квантовой наноэлектроники: сверхпроводниковых диодов.

Были проведены первопринципные расчеты методом DFT электронных свойств объемного перовскита CsPbBr_3 и нанокристаллических пленок $\text{Cd}_x\text{Pb}_{1-x}\text{S}$. PbS и CdS – это хорошо известные классические материалы для оптоэлектронной промышленности, на базе которых были произведены миллиарды электронных устройств. PbS имеет очень малую ширину запрещенной зоны, что делает его пригодным для использования при детектировании инфракрасного излучения, в то время как CdS демонстрирует большую ширину запрещенной зоны, что важно, например, для фотовольтаических приложений. Соответственно, для применения в современных электронных устройствах желательно иметь возможность охватить как можно более широкий спектральный диапазон одним типом материала, свойства которого модифицируются путем легирования. Таким образом, перед нами стоит задача создания технологии выращивания наноструктурированных тонких пленок из раствора $\text{Pb}+\text{S}+\text{Cd}$, при этом нужно учесть, что при расчете свойств материала важную роль играет вклад поверхности. Кроме того, для промышленных применений интерес представляет так же возможность внедрения магнитной примеси на поверхность таких пленок.

Сверхвысокое магнитное поле до 300 Тл, полученное путем сжатия взрывного потока, было применено для исследования взаимодействия двух качественно различных магнитных подсистем в $\text{Gd}_2\text{BaNiO}_5$: никелевой цепочки со спином $S = 1$, находящейся в спин-синглетном основном состоянии, и гадолиниевой подсистемы со спином $S = 7/2$, образующей искаженную треугольную решетку, которая упорядочивается при $T_N = 55$ К. Измерения показывают, что намагниченность подсистемы Gd быстро насыщается при ~ 14 $\mu\text{B}/\text{f.u.}$ За этим следует дальнейшее увеличение намагниченности в критическом поле $H_{C1} = 90 \pm 20$ Тл, где халдейновская щель закрывается. Теоретические расчеты по методу классического и квантового Монте-Карло показывают, что H_{C1} сильно подвержено влиянию шахматного поля спинов Gd, что эффективно увеличивает халдейновскую щель за счет обменного взаимодействия, и полное насыщение намагниченности подсистем Gd и Ni ожидается в критическом поле $H_{C2} \sim 800$ Тл. Расчеты позволили описать экспериментальную полевую зависимость намагниченности и оценить параметры обменного взаимодействия никелевой и гадолиниевой подсистем.

Численное моделирование с помощью пакета SPIN PM было применено для исследования влияние большого по величине спин-поляризованного тока на связанную динамику вихрей в спин-трансферных наноосцилляторах большого диаметра. Рассмотрены случаи, как вихрей с одинаковой, так и противоположной полярностью.

Обнаружены новые стационарные режимы связанных колебаний вихрей как для одинаковых, так и для противоположных полярностей ядер. Описаны возможные траектории движения и сценарии трансформации магнитных вихрей. Изучена зависимость частоты стационарных связанных колебаний магнитных вихрей от величины спин-поляризованного тока. Полученные результаты могут быть использованы для повышения рабочих частот двух вихревых спин-трансферных наноосцилляторов.

Полученные результаты имеют значение для применения в криогенной электронике, а также вносят фундаментальный вклад в физику полимеров.

Все полученные результаты являются новыми.

Область применения результатов:

Криогенная наноэлектроника, сверхпроводниковая спинтроника и магноника.

СОДЕРЖАНИЕ

ТЕРМИНЫ И ОПРЕДЕЛЕНИЯ	9
ПЕРЕЧЕНЬ СОКРАЩЕНИЙ И ОБОЗНАЧЕНИЙ	11
ВВЕДЕНИЕ	14
1 Экспериментальные исследования низкоразмерных структур на основе полимеров.....	20
1.1 Физическая модель переноса заряда интерфейса двух органических пленок.....	20
1.1.1 Введение.....	20
1.1.2 Объект и методы исследования	21
1.1.3 Результаты исследования	22
1.1.4 Заключение	27
1.2 Планарные трехэлектродные гетероструктуры в конфигурации полевого транзистора на основе сверхпроводящих металлов.....	28
1.2.1 Разработка и оптимизация структуры полевого транзистора на основе полидифениленфталида и сверхпроводящего металла	28
1.2.2 Методы исследования гетероструктур в конфигурации полевого транзистора.....	29
1.2.3 Экспериментальные результаты	30
1.2.4 Заключение	32
1.3 Электрическая проводимость системы металл – полидифениленфталид	33
1.2.1 Введение.....	33
1.2.3 Методика эксперимента	35
1.2.4 Результаты и обсуждение	37
2 Исследование влияния квантового размерного эффекта и эффектов близости на свойства сверхпроводящих пленок.....	43
2.1 Влияние квантово-размерного эффекта на сверхпроводящий переход в тонких пленках алюминия	43
2.1.1 Методика расчета.....	43
2.1.2 Экспериментальные данные и их интерпретация.....	43
2.2 Расчет обратного эффекта близости в тонкой пленке сверхпроводника в контакте со спин-активным слоем	44
2.2.1 Введение.....	44
2.2.2 Используемая для расчета намагниченности модель	45
2.2.3 Полученные зависимости намагниченности от угла спинового смешивания	46
2.2.4 Заключение	47
3 Исследование диодного эффекта в гибридных структурах сверхпроводник – ферромагнетик – топологический изолятор	48

3.1 Введение	48
3.2 Квазиклассическая теория	50
3.3 Результаты	52
3.4 Заключение	56
4 Проведение первопринципных расчетов магнитных и электронных свойств квазидвумерных магнетиков на основе халькогенидов переходных металлов	57
5 Синтез и экспериментальные исследования образцов Gd_2BaNiO_5	64
5.1 Введение	64
5.2 Образцы и методы исследования	65
5.3 Результаты эксперимента и обсуждение	65
5.3.1 Температурные зависимости магнитной восприимчивости	65
5.3.2 Полевые зависимости намагниченности (экспериментальные данные)	66
5.3.3 Теория и расчеты	67
6 Теория стационарной динамики трех и более магнитных вихрей в мультислойном спинтрансферном наноосцилляторе	71
6.1 Введение	71
6.2 Динамика вихрей одинаковой полярности	72
6.3 Динамика вихрей разной полярности	74
6.4 Заключение	78
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	79
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	82
ПРИЛОЖЕНИЕ А. Публикации по проекту	86

ТЕРМИНЫ И ОПРЕДЕЛЕНИЯ

В настоящем отчете о НИР применяют следующие термины с соответствующими определениями:

Бислой	- гибридная наноструктура, состоящая из двух слоев
Критическая температура	- температура, при которой сверхпроводник переходит в нормальное, не сверхпроводящее состояние
Наноструктура	- твердотельная структура, отдельные элементы которой имеют размеры порядка 1-100 нм
Гетероструктура	- наноструктура, состоящая из двух или более слоев различных материалов
Двумерный	- объект, один линейный размер которого, много меньше характерного физического масштаба и других геометрических размеров объекта
Обратный эффект близости	- эффект влияния соседнего материала на свойства сверхпроводника
Топологический изолятор	- материал, который является изолятором в объеме, а поверхность обладает особым типом проводимости с дираковским спектром
Наноосциллятор	- осциллятор имеющий размеры порядка нанометров
Халдейновская цепочка	- цепочка магнитных ионов со спином $S=1$.
Спиновая щель	- энергетическая щель в спектре магнитных возбуждений, определяющая основное синглетное состояние от возбужденных состояний
Квазиодномерные магнетики	- соединения, в которых ионы переходных металлов, подчиняясь мотивам кристаллической решетки, образуют удаленные друг от друга димеры, кластеры, цепочки или плоскости.
Квазизонная модель	- модель проводимости полимеров, основанная на представлении о транспорте носителей заряда в полимерах как в полупроводниках, где подвижны носители только в зоне проводимости, и где им приписывается эффективная подвижность

Времяпролетные эффекты	- эффекты выноса носителей заряда на электроды
Времяпролетные кривые	- кривые переходного тока, измеряемые при импульсном облучении тонких пленок полимеров
Полимер	- макромолекулярное органическое соединение, состоящее из повторяющихся структурных элементов
Диэлектрик	- материал с энергией запрещенной зоны превышающей 2 – 2,5 эВ.
Запрещенная зона	- область в электронном энергетическом спектре запрещенная для электронов. В органическом материале определяется как область энергий между энергией верхней занятой орбитали и нижней вакантной
Полиариленфталиды (ПАФ)	- класс несопряженных гетероцепных полимеров, которые отличает наличие боковой функциональной фталидной группы
Полидифениленфталид (ПДФ)	- полимер из класса полиариленфталидов
Проводящие каналы	- область материала, в которой регулируется поток носителей заряда.
Инжекция	- в общем смысле это процесс диффузии носителей заряда через границу раздела двух материалов. Чаще всего одним из материалов является металл
Двумерный электронный газ	- частный случай электронных состояний в двумерном объекте, на который наложено ограничение в одном из трех направлений движения электрона
Метод Лэнгмюра-Блоджетт (Л-Б)	- метод осаждения органических пленок путем полива раствора на поверхности воды
Коэффициент Харкинса	- характеризует способность одной жидкости к растеканию по поверхности другой жидкости и определяется соотношением поверхностного и межповерхностного натяжения жидкостей.

ПЕРЕЧЕНЬ СОКРАЩЕНИЙ И ОБОЗНАЧЕНИЙ

В настоящем отчете о НИР применяются следующие сокращения и обозначения:

БКШ	- Бардина-Купера-Шриффера теория
КРЭ	- квантовый размерный эффект
МЛЭ	- молекулярно-лучевая эпитаксия
ПДФ	- полидифениленфталид.
ПС	- плотность состояний
ФМР	- ферромагнитный резонанс
T	- термодинамическая температура, К
V	- электрическое напряжение, В
I	- электрический ток, А
R	- электрическое сопротивление, Ом
B	- магнитное поле, Т
Φ, Φ_0	- магнитный поток, квант магнитного потока, Вб
ξ	- сверхпроводящая длина когерентности, м
Δ	- параметр порядка и сверхпроводящая щель, Дж
ϕ	- фаза параметра порядка
T_c	- температура сверхпроводящего перехода, К
H_c	- критическое магнитное поле сверхпроводника, А/м
R_N	- сопротивление сверхпроводника в нормальном состоянии, Ом
I_c	- критический ток сверхпроводника, А
j_c	- плотность критического тока сверхпроводника, А/м ²
D	- размерность системы
F_0	- энергия конденсации, Дж
k_B	- постоянная Больцмана, Дж/К
σ	- сечение сверхпроводящего канала, м ²
I_{tun}	- туннельный ток, А

ZEP	- пик на нулевой энергии (от англ. Zero Energy Peak)
S/F	- структура сверхпроводник/ ферромагнетик (от англ. Superconductor/Ferromagnet)
S/N	- структура сверхпроводник/ нормальный металл (от англ. Superconductor/Normal metal)
S/N/S	- структура сверхпроводник/ нормальный металл/ сверхпроводник (от англ. Superconductor/Ferromagnet / Ferromagnet)
S/TI/S	- структура сверхпроводник/ топологический изолятор/ сверхпроводник (от англ. Superconductor/Topological insulator / Ferromagnet)
SDIPS	- спин-зависимый фазовый сдвиг на границе (от англ. Spin Dependent Interfacial Phase Shift)
DOS	- плотность состояний (от англ. Density of States)
d_f	- толщина ферромагнетика
d_s	- толщина сверхпроводника
γ, γ_B	- параметры эффекта близости для интерфейса
$N_f(E)$	- плотность состояний
α	- характерная скорость рассеяния
$\Delta(x)$	- парный потенциал
Q, h, h_0	-параметры намагниченности в TI слое
S, СП	- сверхпроводник, сверхпроводящий слой или пленка
M	- спиральный магнетик, слой спирального магнетика
КРЭ	- квантовый размерный эффект
TI	- Топологический изолятор
d	- толщина слоя полимера, нм
ОУЛЛ	- Обобщенное уравнение Ландау-Лифшица
РФВ	- (модель) Роуза-Фаулера-Вайсберга
РЭ	- радиационная электропроводность
ВПМ	- времяпролетный метод
ВАХ	- вольт-амперная характеристика
ВТХ	- вольт-температурная характеристика
ВМХ	- вольт-магнитная характеристика
ПК	персональный компьютер
ПИД	- пропорционально интегрально дифференциально

ИДУ	- интегро-дифференциальные уравнения
СММ-2000Т	- сканирующий мультимикроскоп, имеющий две опции в своей работе в виде сканирующего туннельного микроскопа (СТМ) и атомно-силового микроскопа (АСМ)
АСМ-изображение	- вид (морфология) поверхности изучаемого объекта в заданных параметрах физической величины поверхности (рельеф, магнитный момент, проводимость, адгезия и т.п.), представляющий собой результат компьютерной обработки трехмерного массива данных полученных в процессе дискретного сканирования поверхности
нм	- нанометр - единица измерения длины, составляющая 10^{-9} м или 10\AA
S/PDP/S	гетероструктура, представляющая собой последовательность слоев сверхпроводник-полимерная пленка из полидифениленфталида-сверхпроводник
Pb	свинец – химический элемент (металл)
Nb	ниобий – химический элемент (металл)
ПДФ (PDP)	Полидифениленфталид – ароматический полимер класса полиариленфталидов
ZFC	- режим измерения магнитной восприимчивости, когда образец охлаждается в отсутствии внешнего магнитного поля (от англ. zero-field cooling)
FC	- режим измерения магнитной восприимчивости, когда образец охлаждается в ненулевом магнитном поле (от англ. field cooling)

ВВЕДЕНИЕ

Основной задачей настоящего этапа для объединенной экспериментальной группы (НУЛ КНЭ, ВШЭ, Москва – ЛНПМ, БГПУ, Уфа) было исследование планарных образцов в конфигурации полевого транзистора из полимерных материалов.

Обычно органические полимеры являются диэлектриками. Это свойство широко используется в огромном количестве приложений: электрическая защита токонесущих линий, изолирующие покрытия, и т.д.

Во второй половине 20-го века стали активно исследоваться сопряженные полимеры, характеризующиеся наличием в молекулах делокализованных зарядовых состояний, что, в частности, приводит к низкому электрическому сопротивлению материала.

В последние десятилетия интерес привлекли органические полимеры с несопряженными химическими связями, которые под влиянием внешних факторов могут проявлять конечную электрическую проводимость. Примером такого соединения является полидифенилфталид (ПДФ). В частности, оказалось, что в приграничном с металлом тонком слое ПДФ может возникать метастабильное состояние, характеризующееся наличием электронных состояний в прежде запрещенных энергетических состояниях.

Механизм резистивного переключения полимеров чаще всего связывают с формированием проводящих каналов (филаментов, шнуров, нитей) в диэлектрическом слое. Эти каналы напрямую связаны, во-первых, с качеством и внутренней структурой пленки, а во-вторых, с инжекционными и контактными явлениями на границах раздела электрод-полимер. В качестве метода визуализации локальных областей протекания тока выбран проводящий метод атомно-силовой микроскопии.

На основе результатов исследований предыдущего года и механизмов формирования областей протекания тока была поставлена задача разработки технологии изготовления планарных трехэлектродных образцов в конфигурации полевого транзистора со сверхпроводящими электродами и двуслойным полимером на интерфейсе которых формируется квазидвумерный проводящий слой.

Целью настоящей работы московской экспериментальной группы было исследование вольт-температурных (ВТХ), вольт-амперных (ВАХ) и вольт-магнитных (ВМХ) характеристик в квазидвумерных слоистых системах сверхпроводник – ПДФ – сверхпроводник.

Теоретическая подгруппа ставила себе цели описания низкоразмерных сверхпроводящих и гибридных систем.

Описания квантового размерного эффекта в тонких сверхпроводниковых пленках и

эффектов близости с магнитными материалами опирается на квантовомеханические уравнения теории сверхпроводимости (уравнения Горькова) и квазиклассические уравнения в «грязном» пределе (уравнения Узалея). Уравнения Узалея уже не допускают описания квантовых осцилляций, используются для описания эффектов близости в гибридных наногетероструктурах. В широком смысле вблизи критической температуры можно использовать уравнение Гинзбурга-Ландау. Тот или иной подход был использован в зависимости от формулировки конкретной задачи. Такие методы применялись для расчета расчетов эффектов близости в наногетероструктурах на основе сверхпроводящих пленок алюминия или ниобия и магнитных материалов. В качестве последних нами предполагались ферромагнитные диэлектрики.

С самого начала исследований в области сверхпроводимости было отмечено, что тонкие пленки могут проявлять критическую температуру перехода в сверхпроводящее состояние (T_c), которая значительно отличается от аналогичных значений для объемных материалов. Интересно отметить, что уменьшение толщины пленки может привести как к уменьшению (например, для ниобия), так и к увеличению (например, для алюминия) значения T_c . Несмотря на обширные экспериментальные данные и многообразие теоретических моделей, научное сообщество до сих пор не достигло единства мнений относительно природы этого явления. В данной работе мы представляем результаты теоретических исследований высококачественных алюминиевых пленок.

В 21 веке появилась новая область нанoeлектроники, называемая сверхпроводящей спинтроникой. Так же, как и в обычной спинтронике, основным исследуемым явлением является перенос спина электронов, но происходящий в сверхпроводящих структурах при температурах ниже критической температуры сверхпроводника. Структуры, изучаемые сверхпроводящей спинтроникой, а именно гибридные сверхпроводящие структуры с магнетиками, потенциально очень хорошо подходят для хранения и обработки информации. Поэтому обратный эффект близости и наведенная намагниченность такой структуры были выбраны объектом данного исследования.

В последние несколько лет большое внимание уделяется невязанным явлениям сверхпроводимости. В частности, диодный эффект в сверхпроводящих системах широко обсуждался из-за интересной физики, лежащей в его основе, и потенциального применения в бездиссипативной сверхпроводящей электронике. Как правило, для достижения невязанности критического тока в таких устройствах требуются три условия, в том числе отсутствие симметрии инверсии и обращения времени, а также двумерная сверхпроводимость. В работе симметрия обращения времени нарушалась обменным полем ферромагнетика, а инверсионная симметрия – сильным спин-орбитальным

взаимодействием топологического изолятора. Диодный эффект может быть полезен не только с прикладной точки зрения, но и как способ определения типа спин-орбитальной связи (SOC) материала.

Были проведены первопринципные расчеты методом DFT электронных свойств объемного перовскита CsPbBr₃ и нанокристаллических пленок CdxPb1-xS. PbS и CdS - это хорошо известные классические материалы для оптоэлектронной промышленности, на базе которых были произведены миллиарды электронных устройств. PbS имеет очень малую ширину запрещенной зоны, что делает его пригодным для использования при детектировании инфракрасного излучения, в то время как CdS демонстрирует большую ширину запрещенной зоны, что важно, например, для фотовольтаических приложений. Соответственно, для применения в современных электронных устройствах желательно иметь возможность охватить как можно более широкий спектральный диапазон одним типом материала, свойства которого модифицируются путем легирования. Таким образом, перед нами стоит задача создания технологии выращивания наноструктурированных тонких пленок из раствора Pb+S+Cd, при этом нужно учесть, что при расчете свойств материала важную роль играет вклад поверхности. Кроме того, для промышленных применений интерес представляет так же возможность внедрения магнитной примеси на поверхность таких пленок.

Металлогалогенные перовскиты (МГП) являются перспективными материалами для солнечных элементов следующего поколения благодаря своим превосходным оптоэлектронным свойствам и экономичной технологичности решения. Рекордная эффективность преобразования энергии (ЭПЭ) солнечных элементов на основе МГП быстро выросла с 3,8% в 2009 году до 26,1% в настоящее время, приближаясь к рекордному показателю ЭПЭ солнечных элементов на основе кремния. Для дальнейшего улучшения характеристик МГП в недавних работах основное внимание уделялось пассивации вредных структурных дефектов, которые служат центрами рекомбинации носителей заряда. Несмотря на высокую толерантность к дефектам, рекомбинация носителей заряда на границах зерен (ГЗ) по-прежнему наблюдается относительно быстро, и поэтому ЭПЭ ограничена. Кроме того, сообщается, что границы зерен способствуют миграции ионов в МГП и приводят к проблемам со стабильностью. Разработано множество стратегий для смягчения негативного влияния границ раздела в солнечных элементах на основе МГП, например, насыщение оборванных связей на границах и увеличение размера зерна для снижения плотности границ раздела. Однако механизм, посредством которого ГЗ влияют на производительность МГП, остается неясным. А иногда наличие ГЗ демонстрирует положительный эффект при некоторых условиях. Эти

проблемы обусловлены в основном сложностью и разнообразием барьеров МГП, а отсутствие фундаментального понимания поведения барьеров серьезно затрудняет исследование новых методов пассивации.

Помимо экспериментальной характеристики, для изучения электронных свойств границ МГП широко применяются расчеты *ab initio* с использованием атомистических моделей. Ни в чистых, ни в дефектных границах зерен МГП не обнаружено глубоких ловушечных состояний в запрещенной зоне, что согласуется с вышеупомянутой «толерантностью к дефектам». Однако некоторые дефектные конфигурации в области ГЗ создают локализованные электронные состояния вокруг края зоны, ускоряя межзонную рекомбинацию носителей за счет усиления электронно-колебательных неадиабатических связей (НС) по сравнению с объемными МГП. Более того, установлено, что ГЗ накапливают точечные дефекты из-за их относительно низкой энергии образования, а последующие структурные искажения могут сделать эти дефектные состояния более глубокими. Эти результаты указывают на сложную корреляцию между геометрической структурой ГЗ МГП и их влиянием на оптоэлектронные характеристики. Кроме того, учитывая мягкую решетку МГП, сообщается, что тепловые колебания приводят к крупномасштабным искажениям в местах вакансий. Наша недавняя работа демонстрирует, что ГЗ также страдают от подобных крупномасштабных структурных флуктуаций, а искаженные структуры создают локализованные состояния ловушек из-за взаимодействий Pb–Pb через границы. Ловушечные состояния динамически генерируются при тепловых флуктуациях, даже в стехиометрических ГЗ, и это может быть важным источником центров рекомбинации носителей в ГЗ. Предыдущие исследования показали, что подавление структурных искажений ГЗ представляет собой перспективное направление для устранения этих центров рекомбинации.

В этой работе теоретически исследовано влияние осевой деформации на геометрические и электронные свойства $\Sigma 5$ (120) ГЗ в CsPbBr₃ МНР. Мы строим модели ГЗ с растяжением, без деформации и сжатием, регулируя осевую длину в соответствии с рассчитанной диаграммой энергия-деформация. Такая деформация может быть достигнута экспериментально путем выбора подходящих материалов подложки и рабочих температур, и была отмечена положительная корреляция между производительностью солнечного элемента и деформацией сжатия. В частности, поскольку МНР обычно демонстрируют более высокие коэффициенты теплового расширения, чем материалы неорганического слоя переноса носителей, растягивающая деформация, вероятно, будет введена, когда образцы готовятся при относительно высоких температурах и охлаждаются до комнатной температуры. Действительно, деформация в перовскитах широко изучалась,

поскольку она существенно влияет на производительность, включая эффективность и стабильность [A1]. Однако большинство исследований сосредоточено на свойствах решетки, в то время как понимание взаимодействия между деформацией и ГЗ перовскита все еще отсутствует. Учитывая, что ГЗ могут приводить к большему количеству дефектов и служить каналами миграции ионов, необходимо исследовать влияние деформации на ГЗ перовскита. Мы проводим моделирование молекулярной динамики (MD) для отбора образцов движений атомов при температуре окружающей среды и рассчитываем электронную структуру с использованием теории функционала плотности *ab initio* (DFT). С помощью разработанного силового поля машинного обучения (ML) мы анализируем эволюцию геометрической и электронной структур моделей ГЗ в наносекундном масштабе времени, что сопоставимо со временем рекомбинации носителей в CsPbBr₃ и намного больше, чем в моделировании *ab initio* MD (AIMD). Модель растяжения-деформации демонстрирует крупномасштабные структурные флуктуации и генерирует локализованные состояния ловушек вблизи зоны проводимости. Мы демонстрируем, что сжатие моделей GB в аксиальном направлении устраняет состояния ловушек, подавляя структурные искажения. В частности, аксиальная деформация регулирует локальное окружение ненасыщенных атомов Pb в области ГЗ, а усиленные взаимодействия Pb–Br устойчивы к структурным изменениям. Кроме того, сжимающая деформация приводит к реконструкции ГЗ в направлении аморфно-подобной конфигурации, делая связь между геометрической структурой и аксиальной деформацией немонотонной. Эти результаты дают новое понимание роли ГЗ в солнечных элементах МДП.

Существует несколько основных сценариев поведения квази-одномерных магнитных систем при низких температурах. В случае соединений, содержащих цепочки магнитных ионов со спином $S = 1$ (халдейновские цепочки) с антиферромагнитным внутрицепочечным обменным взаимодействием J , реализуется халдейновское щелевое состояние. Соединение Y₂BaNiO₅, в кристаллической структуре которого ионы Ni²⁺ образуют цепочки имеет щель в спектре магнитных возбуждений порядка 10 мэВ. В соединениях R₂BaNiO₅ полная или частичная замена иона Y³⁺ на редкоземельный магнитный ион R³⁺ приводит к антиферромагнитному упорядочению. Среди соединений R₂BaNiO₅ особое место принадлежит Gd₂BaNiO₅ из-за низкой анизотропии ионов Gd³⁺, имеющих «сферическое» электронное распределение с конфигурацией 4f⁷. Мы исследовали полевую зависимость намагниченности Gd₂BaNiO₅ в импульсном магнитном поле до 300 Тл, полученном сжатием взрывного потока, и проанализировали эту зависимость в классических и квантовых расчетах по методу Монте-Карло.

Уравнение ЛЛГ было использовано для расчета динамики магнитных вихрей в

СТНО. Для численного моделирования связанной динамики магнитных вихрей использован пакет программ для микромагнитного моделирования SpinPM. Он позволяет численно интегрировать обобщенное уравнение Ландау–Лифшица методом Рунге–Кутты четвертого порядка. Этот пакет оказался эффективным инструментом для численного исследования динамики связанных вихрей. С его помощью были исследованы особенности динамики связанных магнитных вихрей в трехслойном спин-трансферном наноосцилляторе.

Выполнены задачи пятого этапа совместного исследования.

Результаты, полученные при выполнении настоящего проекта, опубликованы в 22 научных работах, результаты обсуждены в 11-ти докладах, сделанных на международных и российских конференциях, опубликовано 5 статей в сборниках трудов, индексируемых в РИНЦ и 6 статей в периодических изданиях, индексируемых в РИНЦ, из них 3 статьи в журналах, индексируемых в международных базах данных Wos и Scopus.

1 Экспериментальные исследования низкоразмерных структур на основе полимеров

1.1 Физическая модель переноса заряда интерфейса двух органических пленок

1.1.1 Введение

Электропроводящие полимеры, а тем более сверхпроводящие органические материалы открыты сравнительно недавно. При этом получение полупроводникового или металлоподобного проводящего состояния осуществляется путем допирования или самодопирования. Здесь под самодопированием понимается создание локальных неоднородностей и структурных дефектов как в процессе формирования пленок, так и в результате внешнего воздействия: термической обработки, радиационного воздействия, фазового перехода и т.д.

В тонких пленках неорганических и органических материалов наблюдаются явления аномального переноса заряда. Как правило, это происходит в пленках, толщина которых не превышает некоторого критического значения, менее 1 мкм. Эта толщина определяется глубиной проникновения поверхностного заряда.

Одним из интересных электронных свойств органических материалов является способность менять состояние с диэлектрика или полупроводника на состояние с высокой проводимостью [1]. Это явление называется эффектом переключения проводимости или просто эффектом переключения.

Особенностью наблюдаемых в тонких пленках органических материалов эффектов переключения, в отличие от аналогичных явлений в неорганических пленках, является небольшая величина внешнего воздействия, при которых они наблюдаются. Переключение может наблюдаться при приложении электрического или магнитного поля, одноосном механическом давлении, термоионизацией ловушек, изменением граничных условий на границе раздела металл-полимер фазовом переходе в контактирующих электродах и т.д.

В обзоре [2] представлены результаты исследования эффектов резистивного переключения в субмикронных полигетероариленовых пленках. Перспективность использования в электронике таких тонкопленочных элементов, электропроводность которых можно контролировать малым внешним воздействием, очевидна [A2]. В то же время вопрос о механизме резистивного переключения в диэлектрических (полимерных) пленках напрямую связан, во-первых, с качеством и внутренней структурой пленки, а во-вторых, с инжекционными и контактными явлениями на границах раздела электрод-полимер.

К настоящему времени основной механизм возникновения резистивного переключения проводимости основан на механизме возникновения локальных проводящих каналов тока и считается общим практически для всех материалов. Исторически в книгах для обозначения проводящих участков в диэлектрическом слое использовалось несколько терминов: шнуры, нити, волокна, каналы. В данной работе мы используем термин «проводящие каналы».

Исследования надмолекулярной структуры наиболее изученного полимера из класса полигетероариленов - ПДФ показали, что внутреннее строение пленок ПДФ обусловлено ассоциацией макромолекул в растворе [3]. При этом было выдвинуто предположение, что поток носителей заряда движется по границе раздела отдельных макромолекул или их агрегатов. В связи с этим была поставлена задача оценки локальных путей протекания тока методом АСМ с проводящим зондом, а также сопоставления полученных данных с результатами по исследованию надмолекулярной структуры субмикронных пленок ПДФ.

1.1.2 Объект и методы исследования

В качестве объекта исследования выбран полидифениленфталид: молекулярный вес $(50-80) \cdot 10^3$ в зависимости от условий синтеза. Полимер термостойкий – температура размягчения ~ 440 °С, температура начала разложения ~ 450 °С.

Для исследования методом АСМ изготовлены как тонкие полимерные пленки ПДФ на полированных подложках из нержавеющей стали [А3], так и отдельные наночастицы полимера, представляющие агрегаты макромолекул [А4]. Получение суспензии полимерных наночастиц проводилось последовательным осаждением из раствора в результате постадийного снижения растворяющей способности системы. Последовательное осаждение проводилось следующим образом: образец полимера растворяли в растворителе (циклогексаноне) и к получившемуся раствору постепенно добавляли осадитель (этанол), одновременно раствор тщательно перемешивали. Добавление осадителя проводилось до тех пор, когда добавка даже одной его капли вызывала помутнение, которое не исчезало при перемешивании.

В состав суспензии после фракционного осаждения входили циклогексанон (ЦГН), этанол и ПДФ. При попытке изготовить образцы из такой суспензии было установлено, что этанол испаряется быстрее циклогексанона, поэтому наночастицы начинают снова растворяться в циклогексаноне. С целью выведения ЦГН из суспензии была проведена процедура седиментации: в первую очередь проводилось осаждение 1 мл раствора ПДФ в ЦГН с 0,5 мл спирта на центрифуге, осаждение проводилось в течение двух минут со скоростью 1000 оборотов в минуту. Затем раствор промывался: аккуратно сливалась

надосадочная часть, и добавлялся этанол до восстановления объема раствора. Пробирка с суспензией помещалась в ультразвуковую ванну на пять минут для интенсивного перемешивания. Такая процедура была проведена дважды. В итоге была получена суспензия, состоящая из двух фракций: в виде твердого осадка и в виде дисперсного раствора мелких частиц полимера в этаноле, который, в свою очередь, так же разделен на две части: мутную (в виде столбика) и прозрачную (надосадочную), что соответствует седиментационно-диффузионному равновесию в стабилизированной суспензии.

Для изучения полимерных наночастиц изготавливались образцы из прозрачной надосадочной части раствора на полированных подложках из нержавеющей стали. Капля суспензии наносилась на поверхность подложки, затем образцы высушивались на воздухе при комнатной температуре в течение 45 минут. Окончательное удаление растворителя производилось в сушильном шкафу при температуре 150 °С в течение 30 минут.

Режимы исследования электрических параметров выполнены в виде набора дополнительных программно-аппаратных средств, подключаемых к базовым системам сканирующего мультимикроскопа СММ-2000Т. В результате одновременно с регистрируемой топографической картой осуществляется поточечное считывание дополнительных карт, соответствующих этой топографии. Дополнительные карты содержат информацию об электрических потенциалах или электропроводности с локальностью считывания данных до долей нм. Реализована стандартная однопроходная процедура сканирования рельефа в контактном режиме с одновременным измерением тока, протекающего через кантилевер. В ходе эксперимента использовались АСМ-кантилеверы серии «GOLDEN» CSG10 с токопроводящим покрытием PtIr, предназначенные для работы в контактном режиме и производимые компанией NT-MDT. Кантилевер установлен на АСМ-столике микроскопа СММ-2000, электрически изолирован от корпуса прибора. Напряжение, подаваемое на образец базовой системой микроскопа, регулировалось с пульта управления СТМ-режима в диапазоне от -5 до +5 В с точностью до 1 мВ. В каждой точке сканирования измерялся ток, в соответствии с которым формировалась карта токов (т.е. изображение, получаемое одновременно с базовым АСМ-изображением).

1.1.3 Результаты исследования

На рисунке 1.1.а показан внешний вид деформированного участка полимерной пленки (морфология поверхности). Левая и нижняя части изображения соответствуют металлической подложке, которая стала видна после удаления части полимерной пленки в результате механической деформации. В правой верхней части представлен участок полимерной пленки, оставшийся на поверхности подложки. Профиль поперечного

сечения вдоль измерительной линии (показан на изображении) позволяет определить разницу высот между поверхностью подложки и поверхностью пленки, т.е. толщину пленки (в данном эксперименте 114 нм). На рисунках 1.1.б, 1.1.в показаны изображения, полученные одновременно с увеличенного участка рисунка 1а. Изображение на рисунке 1б характерно для внутренней (надмолекулярной) структуры полимерной пленки. Соответствующий профиль поперечного сечения позволяет определить геометрические размеры элементов структуры внутри пленки. Рисунок 1.1.в представляет собой карту распределения протекающего тока. Можно заметить, что на изображении тока имеются особенности, выглядящие как небольшие яркие точки. На геометрическом изображении (рисунок 1.1.б) таких точек нет, расположение точек коррелирует с границами элемента изображения, показанного на обоих рисунках.

Изображение в токовом режиме представляет собой двумерное распределение величины протекающего тока для всего массива исследуемых поверхностных точек. Токковые характеристики изображения представлены в виде острых пиков, высота которых соответствует величине протекающего тока. На рисунке 1.1.г показано увеличенное изображение участка с проводящими каналами и профиль поперечного сечения. Максимальное значение тока составляет 14,37 нА, сечение канала около 4,5 нм. При многократном сканировании, особенно при увеличении изображения, происходит изменение величины токовых характеристик и формы их расположения (рисунок 1.1.д). По-видимому, это вызвано деградацией полимерного слоя при многократном, хотя и небольшом воздействии кантилевера. Значение тока, измеренное в одном из пиков, составило 69,13 нА, сечение канала около 4,5 нм.

Исследования полимерных наночастиц методом АСМ с проводящим зондом показали, что наночастицы в основном обладают диэлектрическими свойствами. В ряде случаев при наблюдении агрегации наночастиц на металлической подложке регистрировались токовые особенности в виде отдельных точек, расположенных в пределах агрегата наночастиц (рисунок 1.2.а,б). На АСМ-изображении морфологии поверхности (рисунок 1.2.а) виден агрегат наночастиц с размерами по латерали примерно 800нм×600нм и наибольшей высотой 120 нм. Агрегат состоит из отдельных наночастиц размером 50-80 нм (данные, полученные из профиля поверхности). На рисунке 1.2.б представлено изображение того же участка, полученное в токовом режиме. При этом регистрируется своеобразный псевдорельеф, когда яркость элементов изображения пропорциональна силе протекающего тока.

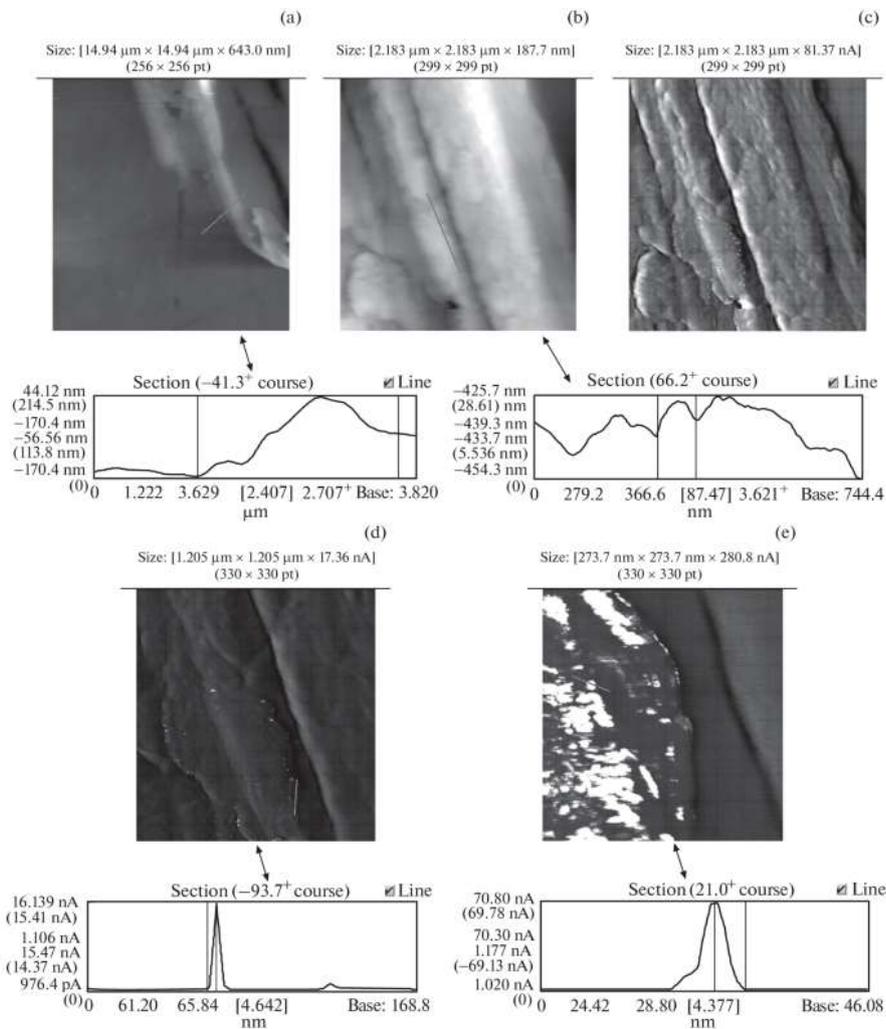


Рисунок 1.1 – Серия АСМ-изображений деформированной полимерной пленки при различном масштабе увеличения: (а) общий вид деформированного сечения и профиль поперечного сечения, толщина полимерной пленки 114 нм; (б) увеличенное изображение внутренней структуры полимерной пленки и соответствующий ей профиль, размер элемента структуры 87,5 нм; (в) изображение проводящих каналов на карте тока, соответствующее рельефу поверхности на рис. 1.1.б ; (г) увеличенное изображение сечения с проводящими каналами и профиль поперечного сечения; (д) следующий этап увеличения изображения и профиль поперечного сечения [А3]

На изображении токовые особенности выглядят как яркие точки, на профиле поверхности этим точкам соответствуют острые пики. Анализ соответствующего профиля позволяет оценить конкретную величину тока, соответствующую элементу изображения.

Величина тока, измеренная в одном из пиков профиля, составила 72,58 нА, поперечник проводящего канала порядка 35 нм. Видно также, что яркие точки, соответствующие локально протекающему току, группируются в более или менее дискретные пятна. Отметим также, что места протекания тока наблюдаются только в пределах агрегата полимерных наночастиц в то время, как на металлической подложке токовые особенности не регистрируются. Отчетливого совпадения токовых и морфологических особенностей не наблюдается, но размер округлых объектов хорошо коррелирует с размерами индивидуальных наночастиц. Отметим также, что места протекания тока наблюдаются только в пределах агрегата полимерных наночастиц в то время, как на металлической подложке токовые особенности не регистрируются.

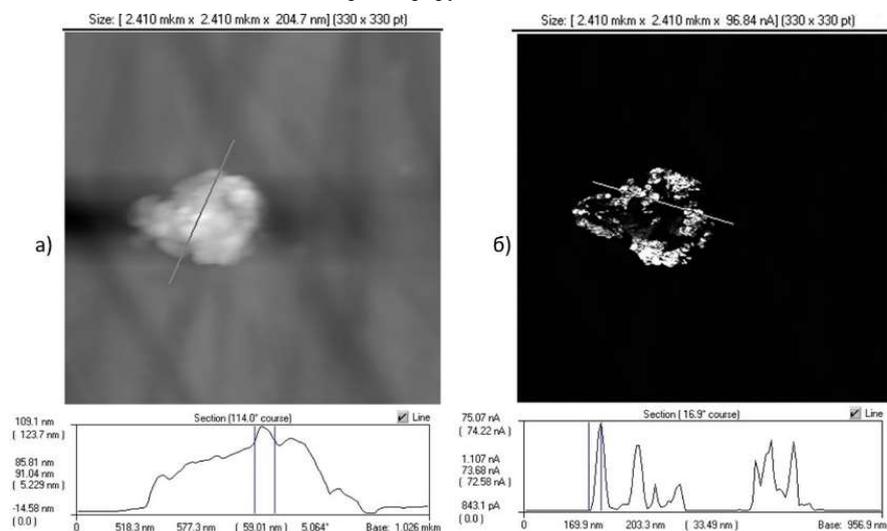


Рисунок 1.2 – Изображение одного и того же участка поверхности образца, полученное при использовании разных режимов регистрации. а) АСМ-изображение при поддержании постоянной силы взаимодействия кантилевера с образцом. Размер скана 2,41мкм×2,41мкм×204,7нм. б) Токовое изображение при поддержании постоянной силы взаимодействия. Размер скана 2,41мкм×2,41мкм×96,84 нА [A4]

Изображение полученные в токовом режиме АСМ представляет собой двумерное распределение величины протекающего тока для всего массива исследованных точек поверхности. Токовые особенности удалось достоверно зарегистрировать только в тех случаях, когда происходит деформация полимерных пленок или происходит агрегация наночастиц. Тот факт, что токовые особенности наблюдаются в пределах полимерного образца, но не наблюдаются на металлической подложке, связан, по-видимому, с особенностями методики наблюдения и регистрации при использовании метода АСМ с

проводящим зондом. Известно, что при работе в режиме поддержания постоянной силы взаимодействия кантилевера с образцом ни на полимере, ни на металле токовые особенности не регистрируются. Можно предположить, что на поверхности металла в результате механической обработки и взаимодействия с атмосферой формируется тонкий слой, обладающий диэлектрическими свойствами. Сила взаимодействия кантилевера с образцом в данном эксперименте составляла 10 nN, и этого оказалось недостаточно для создания электрического контакта. Режим работы с неконтролируемой силой прижима кантилевера к образцу позволяет пронаблюдать в области контакта с чистым металлом токопроводящие каналы в виде ярких точек, в то время как на полимере токовые особенности не регистрируются. Кроме того, при работе в режиме неконтролируемой силы прижима полимерные образцы начинают деформироваться при взаимодействии кантилевера с образцом. Описанные в данной работе острые пики, которые группируются в округлые объекты, являются местами локального переноса заряда (проводящими каналами). Такие пики являются типичными для токовых изображений любой проводящей поверхности, они наблюдаются в том числе на металле и на кремнии при условии обеспечения электрического контакта.

Таким образом, установлено, что при исследовании полимерных пленок и наночастиц на металлической подложке могут быть зарегистрированы области полимера, электропроводность которых существенно выше, чем электропроводность металлической подложки. Зарегистрированные токовые особенности имеют вид острых пиков, ток в которых достигает сотен нА, а наименьшее поперечное сечение пиков порядка единиц нанометров. Можно предположить, что для возникновения участков с высокой проводимостью необходимо выполнение следующих условий. Во-первых, необходимо наличие в полимере надмолекулярной структуры, способствующей дипольному упорядочению на межзеренных границах. В пределах интерфейса, существующего на границах раздела структурных элементов надмолекулярной структуры, образуется слой, обладающий аномально высокой проводимостью, которая возникает за счет двумерной электронной системы. Во-вторых, необходимо формирование проводящих мостиков в пределах интерфейса (потенциального барьера) металл-полимер, которые обеспечивают электрический контакт между металлической подложкой и сеткой проводящих каналов в объеме полимерного слоя. Сочетание таких условий можно представить следующим образом: при формировании полимерной пленки из раствора фиксируется ассоциативная структура, причем границы между ассоциатами являются интерфейсами между полимерными поверхностями с преимущественной ориентацией дипольных моментов.

Аналогичная ситуация реализуется и при агрегации полимерных наночастиц, которые представляют собой индивидуальные ассоциаты.

При формировании пленки из раствора при быстром испарении раствора структура ассоциатов фиксируется, а границы между ассоциатами играют роль интерфейсов между полимерными поверхностями с преимущественной ориентацией дипольных моментов. Процессы, реализуемые в таких структурах, в настоящее время активно изучаются в неорганических и органических кристаллах, а также на интерфейсах полимер-полимер. Интерфейсы сложных оксидов демонстрируют широкий спектр эффектов, таких как высокая подвижность носителей и высокие значения концентрации носителей; также наблюдаются сверхпроводимость и гигантское магнитосопротивление. Как было отмечено ранее, многое в наблюдаемых эффектах определяется механизмами формирования области интерфейса, включая последовательность атомных слоев и связанный с этим характер дипольного выстраивания вблизи интерфейса. Модель «поляризационной катастрофы», использованная для объяснения условий возникновения двумерного свободного электронного газа, оказалась достаточно достоверной и эффективной. В частности, были опубликованы исследования, в которых подобные эффекты наблюдались вдоль интерфейса органических кристаллов и аморфных полимерных пленок.

В интерфейсе, существующем на границе двух пленок ПДФ, возникает слой с аномально высокой проводимостью, что обусловлено двумерной электронной системой, образованной слоем поверхностно-ориентированных боковых фталидных групп с высоким дипольным моментом. Определяющим механизмом в формировании проводящего интерфейса на границе двух полимерных диэлектриков является поверхностная поляризация, вызванная спонтанным дипольным выстраиванием боковых фталидных групп. Локальное поле, образованное этими диполями, создает благоприятные условия для переноса заряда в области интерфейса, о чем свидетельствуют высокие значения подвижности. Перенос заряда по наноразмерным проводящим каналам, по видимому, реализуется в соответствии с общей идеей о филаментации инжекционного тока.

1.1.4 Заключение

Проведенное исследование позволило получить новые экспериментальные данные о локальных электрофизических свойствах тонких полимерных слоев. Визуализированы наноразмерные проводящие каналы в диэлектрической полимерной матрице. Методами АСМ с проводящим зондом определены линейные размеры проводящих каналов, величина и плотность тока в каналах.

Одновременное наблюдение мест протекания тока и надмолекулярной структуры полимера позволило использовать модель формирования проводящего интерфейса на границе полимер-диэлектрик для описания эффекта. Наблюдаемые данные важны для интерпретации результатов электрофизических измерений в субмикронных полимерных пленках и позволяют целенаправленно влиять на состав и надмолекулярную структуру полимера при изучении свойств резистивного переключения и аномальной проводимости на интерфейсе двух полимерных пленок.

1.2 Планарные трехэлектродные гетероструктуры в конфигурации полевого транзистора на основе сверхпроводящих металлов

1.2.1 Разработка и оптимизация структуры полевого транзистора на основе полидифениленфталаида и сверхпроводящего металла

Проведены работы по оптимизации структуры макета, выбору материалов для отдельных элементов структуры полевого транзистора. В частности, в качестве материала для затвора будет использован алюминий, так как поверхностный нативный слой окисла позволяет уменьшить токи утечки. В качестве нижнего полимерного слоя будет использован полидифениленфталаид, так как он обеспечивает достаточно большую величину поверхностной поляризации. Вторым полимерным слоем, формирующим квазидвумерный электронный слой, будет полиметилметакрилат, так как в молекулярной структуре этого полимера имеются боковые группы с большим дипольным моментом и для получения раствора полимера можно использовать растворитель, который не растворяет полидифениленфталаид. Последнее позволяет сформировать относительно узкую переходную область между полимерными пленками, что способствует большей локализации квазидвумерного электронного газа. Это должно улучшить характеристики будущего транзистора за счет увеличения подвижности носителей заряда.

Схема изготавливаемой структуры представлена на рисунке 1.3:

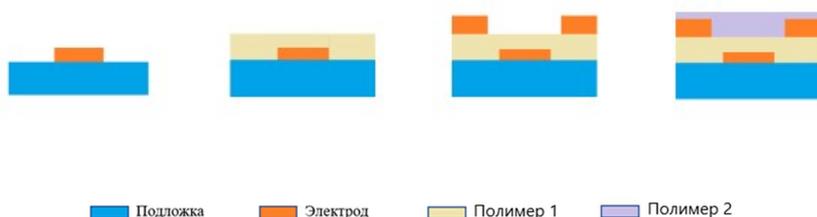


Рисунок 1.3 – Схема этапов формирования структуры

Этапы изготовления планарных трехэлектродных образцов в конфигурации полевого транзистора:

Этап 1. Подготовка подложки из стекла.

Очистка подложек проводилась в несколько этапов: химическая очистка поверхности в сочетании с ультразвуковой очисткой, температурная УФ-очистка поверхности, ионно-плазменная обработка поверхности. Сушка подложек. Образец помещается в сушильный шкаф на 10 мин при температуре от 100°C.

Этап 2. Изготовления электрода-затвора.

В качестве металлического слоя был выбран металл – алюминий. Электроды были изготавливаются методом термодиффузионного испарения металла в вакууме.

Этап 3. Нанесение слоя ПДФ.

Полимерный слой изготавливается методом центрифугирования в течение 1 минуты при 1000 об/мин из раствора полимера в циклогексаноне. После нанесения слоя полимера производилась сушка на воздухе в течение 40 – 45 минут. Окончательная сушка от остатков растворителя проведена в вакуумном сушильном шкафу при $T = 150$ °C в течение 120 минут.

Этап 4. Изготовление электродов сток-исток из сверхпроводящего металла.

Для создания необходимой топологии электродов были изготовлены теньевые маски. Расстояние между электродами задавалась благодаря зазору, в качестве которого были использованы стальные нити диаметрами: 7,5 мкм, 30 мкм, 40 мкм, 50 мкм, 60 мкм и 70 мкм.

Этап 5. Изготовление тонких пленок ПММА.

Нанесение верхнего полимерного слоя из полиметилметакрилата проводилась методом центрифугирования ПММА концентрацией 7% в толуоле при 1000 об/мин. После нанесения слоя полимера производится сушка на воздухе в течение 40–45 минут при комнатной температуре. Окончательная сушка от остатков растворителя и отжиг проходит в сушильном шкафу при температуре 95 градусов по Цельсию в течение 1 часа.

1.2.2 Методы исследования гетероструктур в конфигурации полевого транзистора

Полевой транзистор — это полупроводниковое устройство, которое использует эффект электрического поля управляющей входной цепи для управления током выходной цепи и названо в его честь.

Характеристики транзистора — это графики, которые представляют зависимости между током и напряжениями транзистора в определенной конфигурации. Рассматривая схемы конфигурации транзисторов как аналогичные двухпортовым сетям, их можно

проанализировать, используя характеристические кривые, которые могут быть следующих типов:

1. Входные характеристики: они описывают изменения входного тока при изменении значений входного напряжения при сохранении постоянного выходного напряжения.

2. Выходные характеристики: это график зависимости выходного тока от выходного напряжения при постоянном входном токе.

3. Характеристики передачи тока: Эта характеристическая кривая показывает изменение выходного тока в соответствии с входным током при сохранении постоянного выходного напряжения.

Вольтамперная характеристика любого электронного устройства – вакуумного, а также полупроводникового - помогает понять, как устройство ведет себя при подключении к электрической цепи. По сути, это зависимость выходного тока от напряжения, подаваемого на устройство.

Большую информацию о свойствах и качестве транзистора можно узнать из его вольтамперных характеристик. По этим характеристикам можно определить ряд параметров и их зависимость от режима, часть из которых не приводится в технических условиях или справочных материалах.

Для изучения электрических свойств транзисторной структуры, проведен анализ измерений вольтамперных характеристик (ВАХ), которые проходили при постоянном напряжении. С помощью программного обеспечения National Instruments labVIEW были проведены измерения ВАХ для нижнего и верхнего транзистора, которые проходили при различных значениях напряжения и смене полярности протекающего тока.

Измерения проведены при низких значениях напряжения, ограничение по току составляло 0.1мА. Если же при очень низких значениях, не выдается желаемый результат, постепенно увеличиваем напряжение, но значения тока должны быть постоянным. Те же операции проводим с верхним транзистором.

1.2.3 Экспериментальные результаты

На рисунке 1.4 представлен график ВАХ транзистора.

Как видно из графиков, при подаче и дальнейшем повышении напряжения на затворах, ток сток-исток увеличивается. Показанные графики на рисунке 1.4, это типичные для полевого эффекта зависимости, которые свидетельствуют о том, что основным носителем заряда в двумерной области, разделяющей полимерные пленки, являются электроны. В связи с этим надо отметить, что при смене полярности на затворе приводит к уменьшению тока сток-исток.

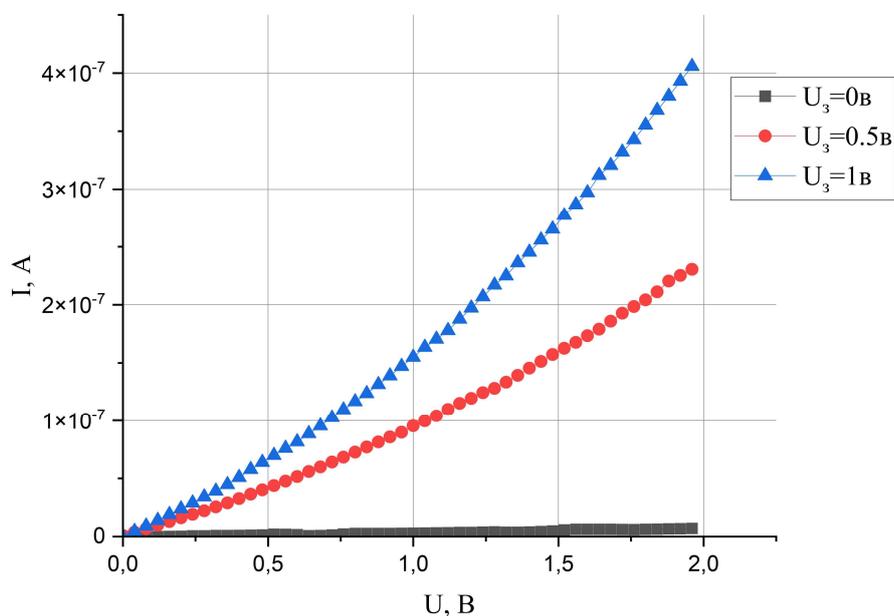


Рисунок 1.4 – Вольтамперные характеристики транзистора, граница раздела ПДФ/ПММА.

Проведены оценки полевой подвижности ОПТ по формулам (1.1)-(1.4). Результаты представлены в таблице 1.1.

Подвижность носителей заряда в двухэлектродной модели токов ограниченных объемным зарядом в случае двумерной проводимости (2D):

$$\mu = \frac{IL^2\pi}{2\epsilon\epsilon_0 U^2 W}$$

Подвижность носителей заряда в двухэлектродной модели токов ограниченных объемным зарядом в случае объемной проводимости (3D):

$$\mu = \frac{IL^3}{S\theta\epsilon\epsilon_0 U^2}$$

где: I – сила тока в момент инжекции; L – ширина границы раздела; S – площадь контакта; θ – отношение минимального и максимального значений токов; ϵ – удельная диэлектрическая проницаемость; U1 – напряжения в момент инжекции; W – ширина внутреннего электрода.

Полевая подвижность в линейном режиме:

$$\mu = \frac{I_D L}{WC (V_G - V_T) V_D}$$

Полевая подвижность в режиме насыщения:

$$\mu = \frac{I_D L}{WC (V_G - V_T) V_D},$$

где: I_D и V_D - ток и напряжение между истоком и стоком; C - емкость единицы площади диэлектрика; V_G - означает напряжение затвора; V_T - пороговое напряжение, при котором начинает расти ток.

Таблица 1.1 – Результаты расчетов подвижностей носителей зарядов

	Верхний транзистор	Нижний транзистор
Эффективная подвижность носителей заряда в случае 2D	$\mu = 1,29 \times 10^{-3} \text{ м}^2 / (\text{В} \times \text{с})$	$\mu = 2,41 \times 10^{-4} \text{ м}^2 / (\text{В} \times \text{с})$
Эффективная подвижность носителей заряда в случае 3D	$\mu = 18,32 \text{ м}^2 / (\text{В} \times \text{с})$	$\mu = 0,42 \text{ м}^2 / (\text{В} \times \text{с})$
Полевая подвижность в линейном режиме	$\mu = 1,53 \times 10^{-3} \text{ м}^2 / (\text{В} \times \text{с})$	$\mu = 3,23 \times 10^{-5} \text{ м}^2 / (\text{В} \times \text{с})$
Полевая подвижность в режиме насыщения	$\mu = 2,98 \times 10^{-2} \text{ м}^2 / (\text{В} \times \text{с})$	$\mu = 4,28 \times 10^{-4} \text{ м}^2 / (\text{В} \times \text{с})$

1.2.4 Заключение

Таким образом, разработан прототип планарной трехэлектродной гетероструктуры в конфигурации полевого транзистора на основе сверхпроводящих металлов и ПДФ. Результаты работы полевого транзистора считаются удовлетворительными:

1. Предложен технологический подход к созданию планарных трехэлектродных гетероструктур в конфигурации полевого транзистора на основе сверхпроводящих металлов.

2. Реализована возможность использования границы раздела диэлектрических полимерных пленок в качестве транспортных каналов транзисторной гетероструктуры.

3. Основным носителем заряда в двумерной области, разделяющей полимерные пленки, являются электроны. В ходе расчетов были получены значения подвижности основных носителей заряда. Так же рассчитаны подвижности по инжекционной модели и из полевого эффекта.

На границе раздела полимер/полимер формируется тонкий переходный слой со структурой, отличной от объемной, с преимущественной встречной ориентации боковых фталидных фрагментов, обладающих заметным дипольным моментом.

Такая ориентация приводит к увеличению локальной «двумерной» концентрации электронных ловушек, которыми являются фталидные группировки, что не противоречит результатам работы. Захват избыточного заряда, инжектированного из электродов, на

фталидные группы полидифениленфталида приводит к появлению глубоких локализованных состояний в запрещенной зоне полимера.

1.3 Электрическая проводимость системы металл – полидифениленфталид

1.2.1 Введение

В настоящей работе исследуется ПДФ – особый класс полимеров (рисунок 1.5), который обладает таким эффектом, как стимулирование металлического состояния. В основном состоянии материал является широкозонными диэлектриками, но может проявлять высокую электропроводность под влиянием таких внешних параметров, как механическое напряжение или электрическое поле. ПДФ (рисунок 1.5.6) относится к классу карбоциклических органических электроактивных полимеров с высокой химической и термической стабильностью, прозрачностью в видимом спектре и высокой механической прочностью [2,4].

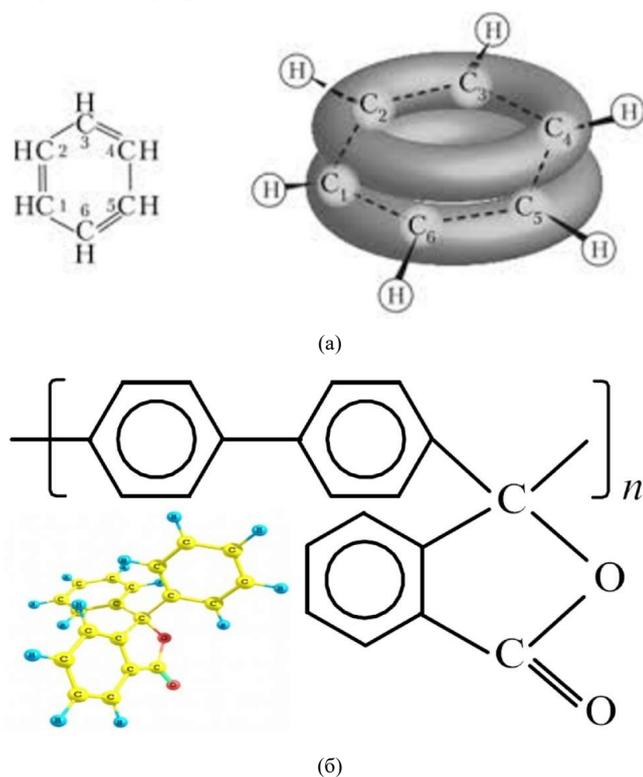


Рисунок 1.5 – (а) Пример сопряженной системы с делокализованной химической связью органического соединения. (б) Структурная единица молекулы полидифениленфталида

ПДФ имеет аморфную структуру со степенью кристалличности не более 15%. Он характеризуется высокой химической стойкостью. При нормальных условиях ПДФ является широкозонным диэлектрическим материалом и характеризуется следующими параметрами: ширина запрещенной зоны ≈ 4.3 эВ, работа выхода электрона ≈ 4.2 эВ, сродство к электрону ≈ 2 эВ, потенциал первой ионизации ≈ 6.2 эВ. Однако в другом (метастабильном) состоянии, например, индуцированным внешним электрическим полем, система характеризуется ненулевой плотностью электронных состояний внутри запрещенной зоны. Глубина таких состояний увеличивается, если система принимает дополнительный электрон, что косвенно обеспечивает электропроводность вдоль цепи полимера [5,6]. В частности, было экспериментально показано, что в ПДФ реализуется электрическая проводимость за счет формирования «каналов шнурования тока» с характерным поперечным диаметром порядка 100 нм [7] (рисунок 1.6).



Рисунок 1.6 – Поляризационно-оптическая картина слоя электроактивного полимера после приложения электрического поля [5]

1.2.3 Методика эксперимента

Изготовление слоистых планарных структур металл – ПДФ – металл осуществлялось комбинированной методикой.

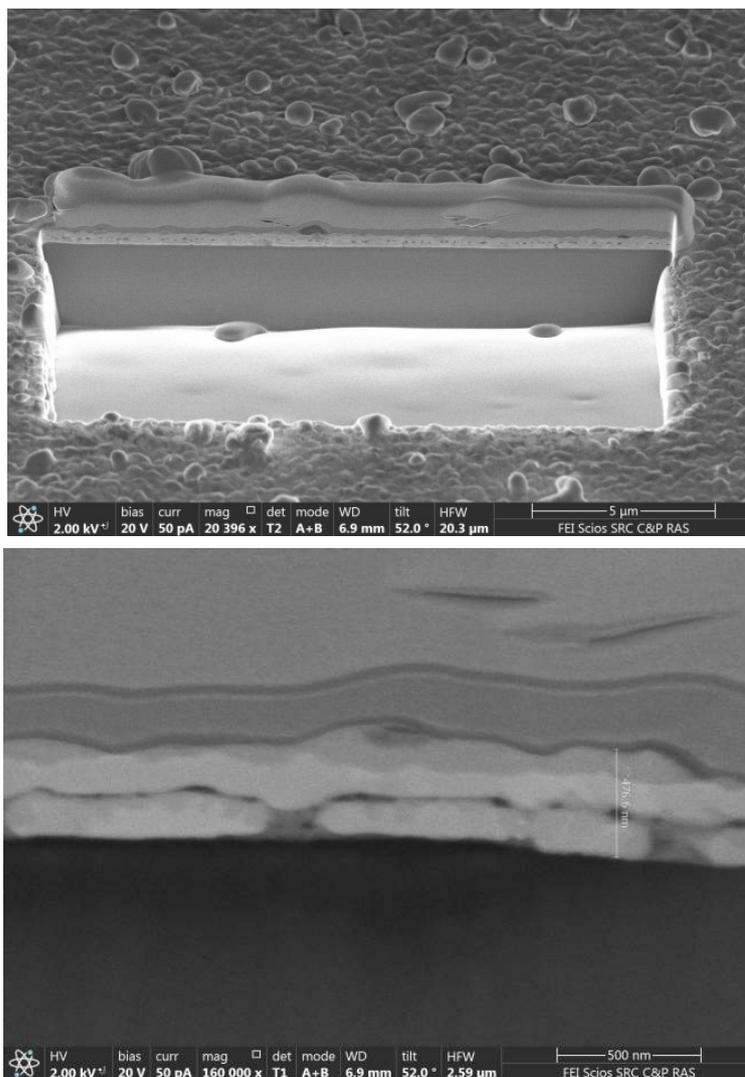


Рисунок 1.7 – Микрофотографии срезов слоистых структур свинец – ПДФ – свинец, полученные методом растровой (верхняя панель) и просвечивающей (нижняя панель) электронной микроскопии

Нанесение свинцовых электродов производилось термическим напылением [8-10], индиевые электроды формировались холодной прокаткой [A5]. Субмикронные пленки ПДФ получали центрифугированием полимера из раствора в циклогексаноне на твердой подложке из химического стекла, на поверхности которого предварительно был сформирован нижний металлический электрод [8–11, A5]. Микрофотографии срезов слоистых структур, полученные методом растровой и просвечивающей электронной микроскопии (рисунок 1.7), позволяют сделать заключение, что формирование в системе множественных микроскопических металлических закороток (типа дендритов) сквозь толщу полимера маловероятно.

В работе исследовались вольт-температурные (ВТХ), вольт-амперные (ВАХ) и вольт-магнитные (ВМХ) характеристики квазидвумерных слоистых систем («сэндвичей») сверхпроводник – ПДФ – сверхпроводник в широком температурном диапазоне. Для записи вольт-температурных $R(T)$ зависимостей в области температур от 300 К до 77 К охлаждение производилось медленным погружением образца в изолированном держателе в криостат с жидким азотом. Для получения температур до 4,2 К аналогичная процедура проводилась в транспортном сосуде Дьюара с жидким гелием. Более низкие температуры вплоть до $T=1,2$ К достигались откачкой паров ^4He в стеклянном криостате. Для регистрации $V(I, T=\text{const})$ и $dV/dI(I, T=\text{const})$ зависимостей при фиксированной температуре T использовался контроллер LakeShore 340 с ПИД обратной связью, позволяющий стабилизировать температуру на уровне $\delta T = \pm 0,1$ К в области $4,2 \text{ К} < T < 300 \text{ К}$ и $\delta T = \pm 1$ мК в области $T < 4,2 \text{ К}$.

Измерения проводились как на постоянном токе, так и с помощью метода фазочувствительного детектирования для регистрации производных ВАХ (рисунок 1.8). В последнем случае ток через образец модулировался низкочастотной (17 Гц) переменной составляющей с амплитудой около 100 мкА, что существенно ниже характерных значений критических токов порядка 10 мА типичного образца. Магнитное поле с напряженностью до нескольких мТ создавалось системой катушек Гельмгольца в продольной и поперечной конфигурации по отношению к плоскости структуры. Данные регистрировались и обрабатывались автоматизированной установкой на базе ПК. Особое внимание уделялось защите исследуемых образцов от паразитных электромагнитных наводок [11].

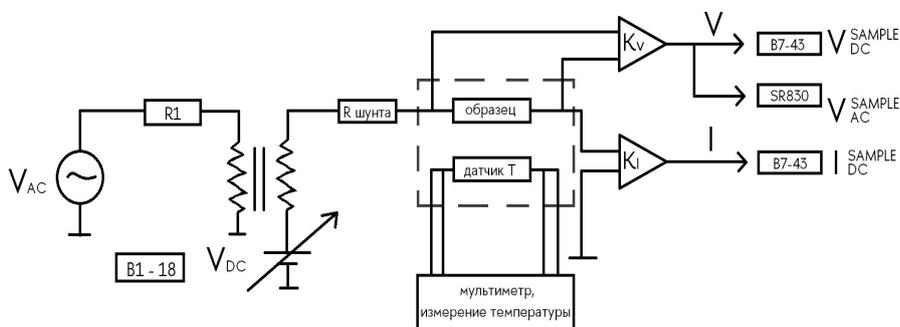


Рисунок 1.8 – Электрическая схема установки для измерения вольт-температурных $R(T)$, вольтамперных $V(I)$ характеристик и первой производной $dV/dI(I)$

1.2.4 Результаты и обсуждение

Как уже было обнаружено в наших более ранних исследованиях [9], при толщинах полимерной пленки d более 500 нм, сэндвичи металл – ПДФ – металлы не обнаруживают сколько-нибудь заметной электрической проводимости. Это наблюдение, по всей видимости свидетельствует о том, что эффект возникновения «каналов шнурования тока» в ПДФ [7] имеет ограниченную пространственную локализацию и проявляется в непосредственной близости от границы металл – полимер. При меньших толщинах d пленка полимера проявляет конечную электрическую проводимость.

Однако самым неожиданным результатом оказалось, что в области температур ниже точек сверхпроводящего перехода (~ 8 К для свинца) и ($\sim 3,4$ К для индия) на $R(T)$ и $V(I)$ характеристиках четко проявляются особенности, типичные для сверхпроводников (Рисунки 1.9 и 1.10).

Закономерности, представленные на рисунках 1.9 и 1.10, могут быть интерпретированы как наведение сверхпроводящих корреляций в тонкой электропроводящей пленке полимера за счет эффекта близости с массивным сверхпроводником (свинец или индий). Для полной уверенности в справедливости такого предположения необходимо исключить тривиальный сценарий возникновения металлических (сверхпроводящих) закороток сквозь толщу ПДФ. Микроскопический анализ срезов сэндвичей (рисунок 1.7) не выявил соответствующих дефектов. Однако, строго говоря, нельзя исключать, что единичные паразитные закоротки не были замечены, т.к. находились вне плоскости среза.

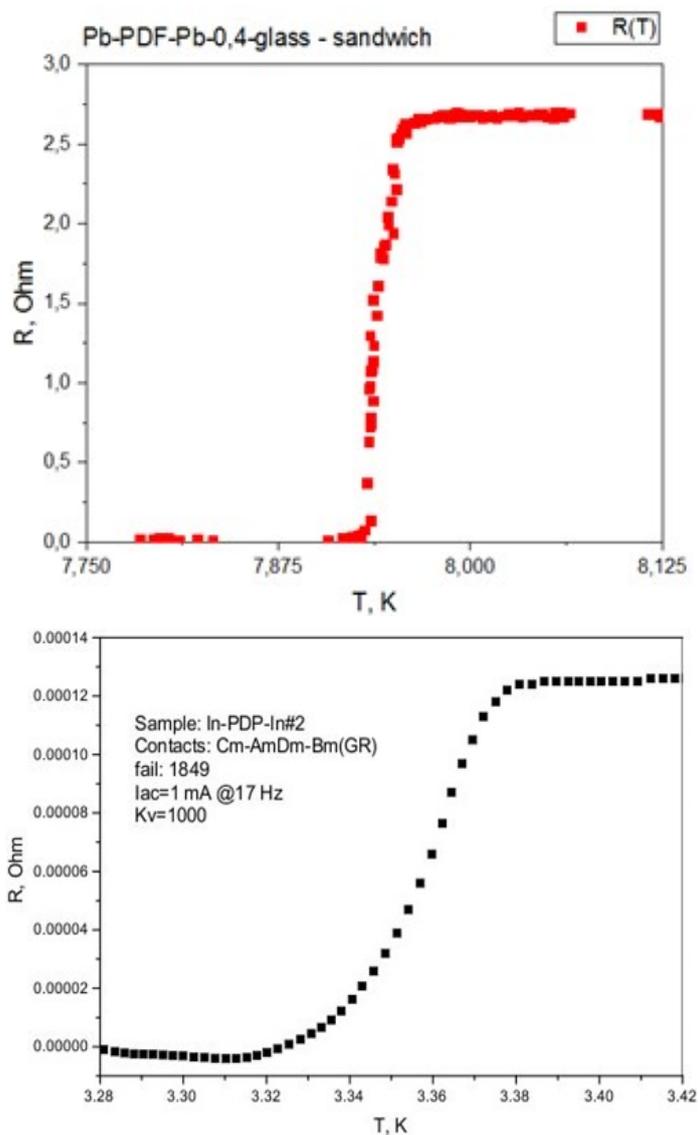


Рисунок 1.9 – Типичные вольт-температурные R(T) зависимости для планарной структуры (верхняя панель) свинец – ПДФ – свинец и (нижняя панель) индий – ПДФ – индий

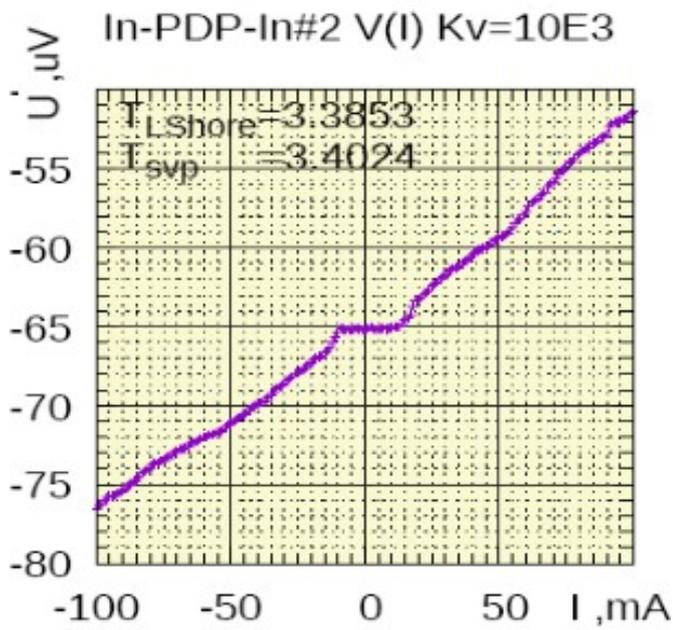
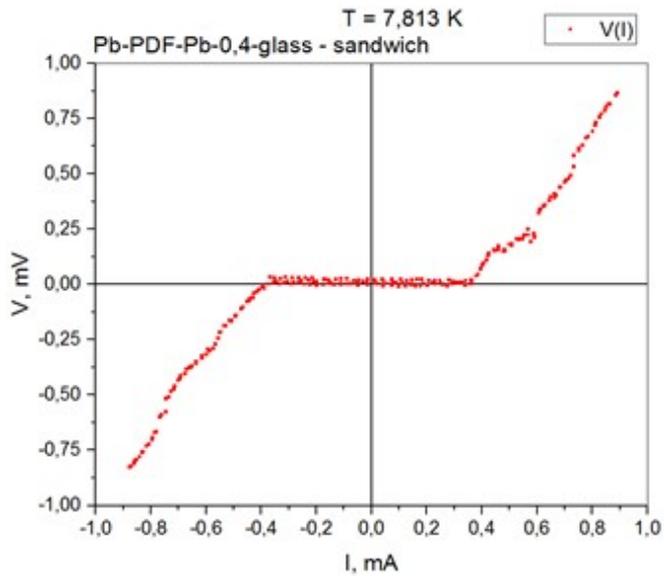


Рисунок 1.10 – Типичные вольтамперные $V(I)$ зависимости для планарной структуры (верхняя панель) свинец – ПДФ – свинец и (нижняя панель) индий – ПДФ – индий

Предположим, что гипотетические тонкие сверхпроводящие закоротки присутствуют. Согласно модели Гинзбурга – Ландау, температурная зависимость критического тока $I_c(T)$ квазиодномерного сверхпроводящего канала вблизи критической температуры T_c должна подчиняться зависимости $I_c(T) \sim (T_c - T)^{3/2}$. Однако, ничего подобного не наблюдается (рисунок 1.11). Т.е. если такие закоротки и присутствуют, они не могут считаться тонкими и, соответственно, с большей вероятностью должны быть обнаружены при микроскопическом анализе (рисунок 1.7).

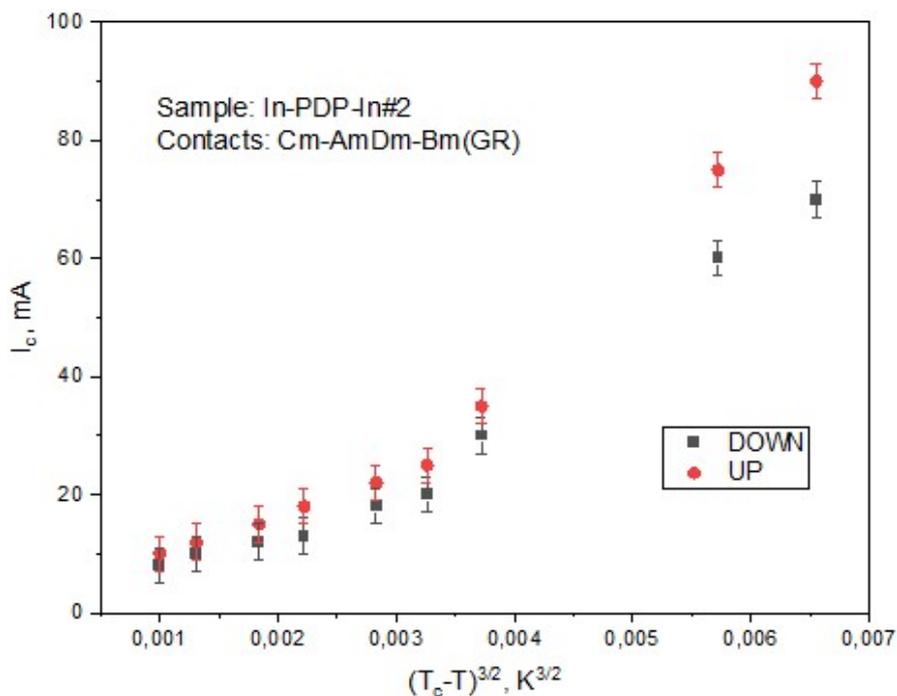


Рисунок 1.11 – Типичная зависимость критического тока I_c от температуры T , построенная в координатах $(T_c - T)^{3/2}$, для сэндвича индий – ПДФ – индий. Измерения проводились при свипировании температуры вверх (●) и вниз (■)

Еще одним косвенным доказательством отсутствия тонких дендритов, закорачивающих сверхпроводящие электроды сквозь толщу полимера, могут служить экспериментальные ВАХ в магнитном поле, параллельном плоскости структуры (рисунок 1.12).

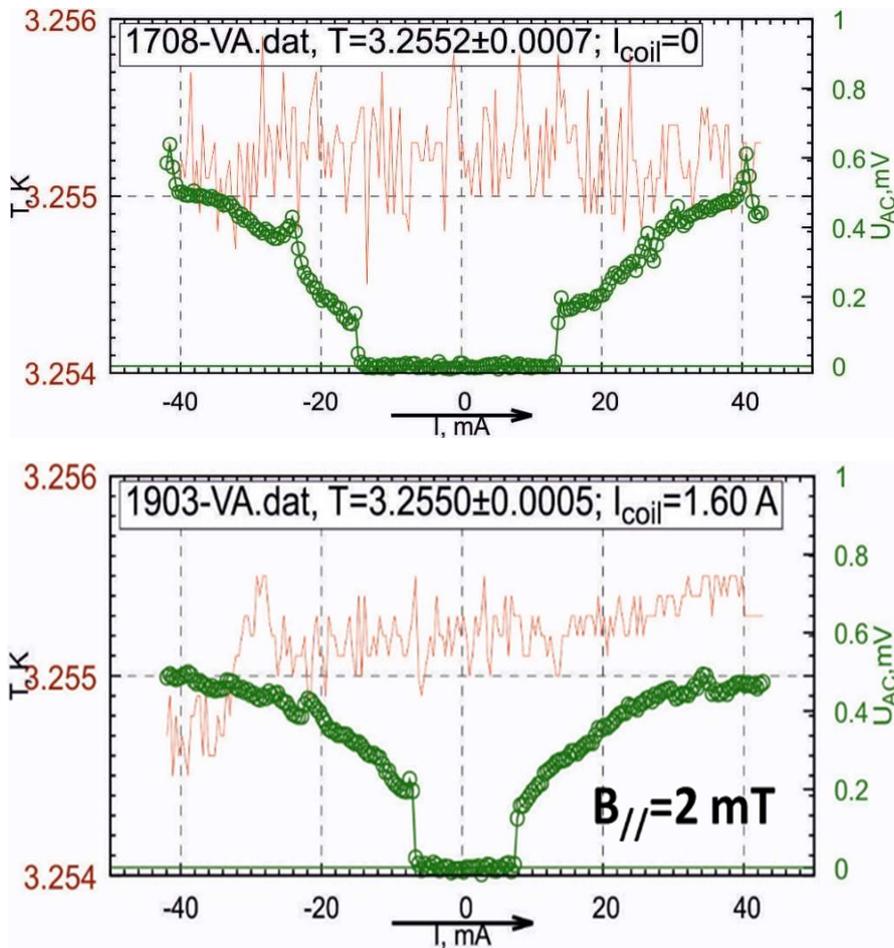


Рисунок 1.12 – ВАХ образца In-PDP-In#3 при одной и той же температуре $T=3,255\text{K}$ в нулевом (верхняя панель) и параллельном магнитном поле 2 мТ (нижняя панель). Вариации температуры в процессе записи ВАХ показаны сплошной кривой и отложены на левой оси. Нестабильность температуры лежит в суб-мК диапазоне

Хорошо известно, что магнитное поле подавляет сверхпроводимость. При этом абсолютная величина критического тока I_c гипотетического сверхпроводящего канала, естественно, зависит от его сечения. Т.е. если бы в наших структурах присутствовали закоротки сколько-нибудь различных диаметров, то на ВАХ должны были бы, во-первых, наблюдаться скачки, соответствующие сверхпроводящим переходам дендритов различных сечений; и, во-вторых, с увеличением магнитного поля абсолютные величины этих особенностей должны были бы уменьшаться. Ни того, ни другого в эксперименте не

наблюдается. Как следствие, можно заключить, что в конечном параллельном магнитном поле не возникает структура, которую можно было бы связать с наличием каналов протекания сверхтока, значительно различающихся по критическим параметрам. По результатам исследований была опубликована работа [A5, A7]. Основные результаты представлены на конференциях [A6, A8].

2 Исследование влияния квантового размерного эффекта и эффектов близости на свойства сверхпроводящих пленок

2.1 Влияние квантово-размерного эффекта на сверхпроводящий переход в тонких пленках алюминия

2.1.1 Методика расчета

В данной работе рассчитывалась зависимость критической температуры сверхпроводящего перехода T_c от толщины тонкой пленки алюминия. В качестве метода для исследования квантового-размерного эффекта был выбран метод функций Грина, которые находятся из уравнений Горькова в рамках микроскопической модели сверхпроводимости БКШ. Для данной задачи о системе, ограниченной в пространстве, уравнения Горькова имеют следующий вид:

$$\begin{cases} (i\omega + \xi)G_\omega(r, r') + \Delta(r)F_\omega(r, r') = \delta(r - r') \\ (i\omega + \xi)F_\omega(r, r') + \Delta^*(r)G_\omega(r, r') = 0 \end{cases}$$

Здесь $\Delta(z)$ – величина энергетической щели, $G_\omega(r, r')$ и $F_\omega(r, r')$ – нормальная и аномальная функция Грина соответственно в представлении Мацубары, ω – Мацубаровская частота.

Решение системы (1) необходимо подставить в уравнение самосогласования:

$$\Delta^*(r) = |g|T \sum_{\omega} F_\omega(r, r')$$

Так как $\Delta(r) \sim F_\omega(r, r')$, то можно сократить на Δ и получить уравнение вида:

$$f(T, D) = \frac{\hbar^2 \pi^2 \xi}{2m \lambda} = \text{const}$$

В данном уравнении ξ – длина когерентности, λ – константа электрон-фононного взаимодействия, \hbar – постоянная планка, m – масса электрона, T – температура, D – толщина пленки. Величина $\frac{\hbar^2 \pi^2 \xi}{2m \lambda}$ не зависит от толщины и температуры образца, а является постоянной для данного материала.

2.1.2 Экспериментальные данные и их интерпретация

Независимо от характеристик подложки и процесса формирования пленки мы выявляем одну и ту же закономерность: чем тоньше пленка алюминия, тем выше ее критическая температура. Мы предполагаем, что данное наблюдение связано с квантово-размерным эффектом.

Алюминиевые пленки были изготовлены на подложках из монокристалла арсенида галлия (GaAs) или сапфира (Al_2O_3) с использованием либо электронно-лучевой эпитаксии (МВЕ), либо электронно-лучевым напылением. Толщина пленок варьировалась от 5 до

100 нм (рисунок 2.1). Для всех пленок любой толщины параметр решетки алюминия равен 0,4053 нм, а направление роста равно (111).

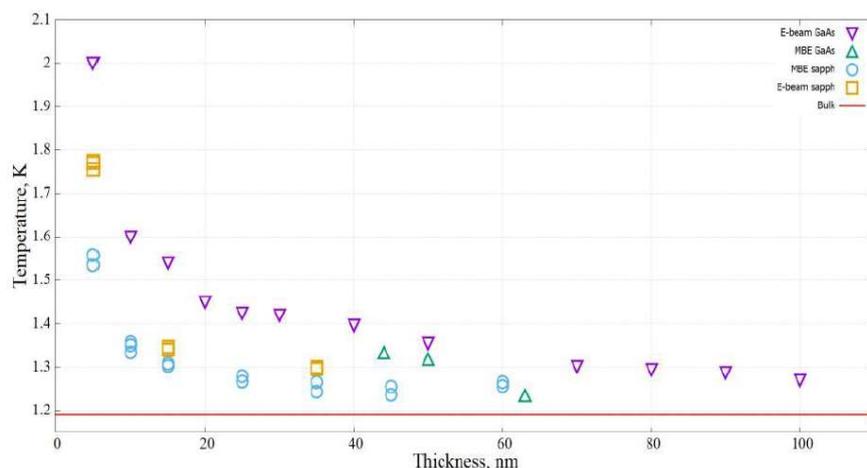


Рисунок 2.1 – Критическая температура T_c в зависимости от толщины алюминиевых пленок, изготовленных различными методами и на разных подложках. Горизонтальная линия соответствует $T_c=1,19$ К для объемного алюминия

В качестве сверхпроводника был взят алюминий. Структура моделировалась при следующих параметрах: $T_c = 1,2$ К, $D = 5 - 100$ нм, $\xi=100$ нм. Описанным выше методом была рассчитана зависимость $T_c(D)$ для случая без рассеяния электронов. В качестве экспериментальных данных были взяты пленки, выращенные на подложках из сапфира (MBE sapphh) и арсенида галлия (MBE GaAs). Показано, что аналитический расчет был выполнен правильно так как с достаточно высокой точностью совпадает с экспериментальными данными. По результатам расчета опубликованы работы [A9, A10] и тезисы [A11, A12].

2.2 Расчет обратного эффекта близости в тонкой пленке сверхпроводника в контакте со спин-активным слоем

2.2.1 Введение

В ряде экспериментальных статей [12,13] исследовался обратный эффект близости в структурах со спин-активными слоями. В них измерялась дифференциальная туннельная проводимость структур, из которой получалась зависимость плотности состояний от энергии.

Из плотности состояний получали значение внутреннего обменного магнитного поля в сверхпроводнике. В теоретических работах [14-16] исследовалась наведенная намагниченность в таких структурах.

В данной работе исследовались сверхпроводящие структуры, в которых слой сверхпроводника находится в контакте со спин-активным слоем диэлектрика. Аналитически решена задача нахождения функций Грина в структуре. Из них можно определить наведенную намагниченность и подавление параметра порядка, а также зависимости данных величин от угла спинового смешивания, координаты и параметров моделируемого бислоя. Это дает возможность сравнения с опубликованными экспериментальными данными.

В расчете использованы модифицированные граничные условия для контакта с ферромагнитным изолятором, полученные группой Эшрига [17,18].

2.2.2 Используемая для расчета намагниченности модель

Изучаемый в работе бислой состоит из двух слоев. Первый слой – сильный ферромагнетик, диэлектрик. Второй слой – синглетный сверхпроводник. Для сведения матричного уравнения Узделя к обычному дифференциальному уравнению использовались допущения:

- 1) сверхпроводник грязный;
- 2) температура структуры слабо отличается от критической температуры сверхпроводящего слоя.

Полученные после учета всех допущений линеаризованные уравнения Узделя:

$$\begin{aligned} (D_s \nabla^2 - 2|\omega_n|)f_s &= -2\pi\Delta, \\ (D_s \nabla^2 - 2|\omega_n|)\mathbf{f}_t &= 0. \end{aligned}$$

где $D_s = 1/3\tau v_F^2$ – диффузионная константа в материале, ω_n – Мацубаровские частоты, Δ – параметр порядка сверхпроводника, f_s – синглетная компонента аномальной функции Грина сверхпроводника, вектор \mathbf{f}_t – триплетная компонента аномальной функции Грина сверхпроводника.

Мы решали их с граничными условиями Эшрига на границе с ферромагнетиком [17,18]. На границе с внешней средой граничные условия имели вид:

$$\frac{\partial f_s}{\partial x} = \frac{\partial f_{tz}}{\partial x} = 0,$$

где f_{tz} – компонента триплетной аномальной функции Грина.

Решая полученное дифференциальное уравнение, мы получаем нормальную и аномальную функции Грина.

Наведенную намагниченность мы находим как функцию от Гриновских функций и параметров бислоя.

$$\delta M(x) = -4\mu_B N_0 \pi k_B T \sum Im (f_s(x, \omega_n) \tilde{f}_{tz}(x, \omega_n)).$$

где μ_B – магнетон Бора, N_0 – плотность состояний на уровне Ферми, k_B – постоянная Больцмана.

2.2.3 Полученные зависимости намагниченности от угла спинового смешивания

Полученные зависимости наведенной намагниченности (рисунки 2.2 и 2.3) интересны тем, что объяснение наличия у них экстремума можно провести из весьма общих физических соображений; аналогичные рассуждения верны для зависимости намагниченности от координаты (рисунок 2.2) и от угла спинового смешивания (рисунок 2.3).

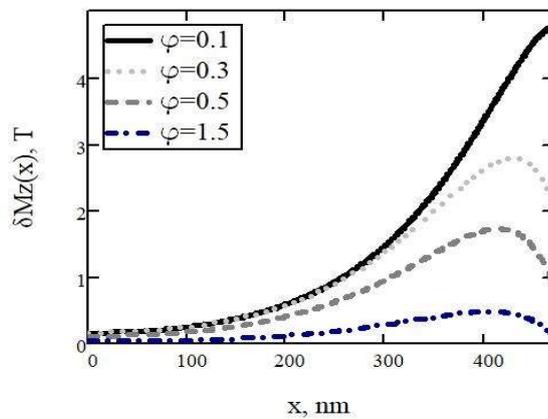


Рисунок 2.2 – Зависимости намагниченности от координаты при разных углах спинового смешивания

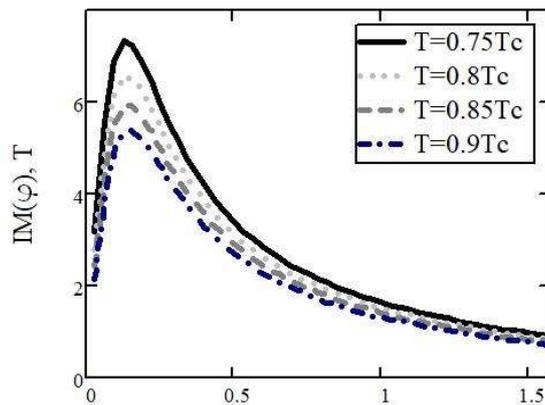


Рис. 2.3. Зависимости намагниченности от угла спинового смешивания при разных температурах внешней среды.

Угол спинового смешивания ϕ – феноменологический параметр, который характеризует разность фаз между электронами со спином вверх и вниз при отражении от границы С-ФИ. Он связан с обменным магнитным полем ферромагнетика – при малом магнитном поле увеличение поля приводит к росту ϕ . При небольших значениях угла спинового смешивания число триплетных куперовских пар, порождающих наведенную намагниченность, растет, вслед за чем увеличивается и сама намагниченность в сверхпроводнике, наведенная из-за эффекта близости. При этом сверхпроводимость в С-слое подавляется все сильнее. Это значит, что суммарное количество куперовских пар, синглетных и триплетных, уменьшается.

Таким образом, рост угла спинового смешивания порождает два процесса: увеличение доли триплетных пар в числе всех куперовских пар и снижение полного числа пар в сверхпроводнике. Этим и объясняется тот факт, что в какой-то момент доля триплетных пар от всех пар увеличится, но при этом количество триплетных пар пойдет на спад. В этот момент и будет достигнута точка максимума намагниченности от угла спинового смешивания.

2.2.4 Заключение

Анализируя полученные данные, мы делаем вывод, что наибольший интерес представляет нетривиальная зависимость намагниченности угла спинового смешивания от координаты. Было выполнено сравнение с экспериментом, когда A_I и E_U являются сверхпроводником и магнетиком соответственно.

3 Исследование диодного эффекта в гибридных структурах сверхпроводник – ферромагнетик – топологический изолятор

3.1 Введение

В последние несколько лет большое внимание уделяется невязанным явлениям сверхпроводимости [19]. В частности, диодный эффект в сверхпроводящих системах широко обсуждался из-за его интересной физики, лежащей в его основе, и потенциального применения в недиссипативной сверхпроводящей электронике [20-22]. До настоящего времени сообщалось об эффекте сверхпроводящего диода в различных системах: Джозефсоновских переходах [23,24], включая устройства без переходов [25,26], сверхпроводящих микромостах [27] и других системах [28]. Существует множество теоретических положений, демонстрирующих возможность сверхпроводящего диодного эффекта, таких как объемные сверхпроводящие материалы [29], гибридные структуры с эффектом близости [30], Джозефсоновские структуры [31], нанотрубки [32], замкнутые системы [33], асимметричные скивды [34] и сверхпроводящие системы с неоднородной намагниченностью [35]. Диодный эффект может быть полезен не только с прикладной точки зрения, но и как способ определения типа спин-орбитальной связи (SOC) материала.

Как правило, для достижения невязанности критического тока в таких устройствах требуются три компонента, в том числе отсутствие симметрии инверсии и обращения времени, а также сверхпроводимость [19]. Однако следует подчеркнуть, что отсутствие симметрии инверсии является основным фактором, влияющим на эффективность влияния гиротропии на структуру материала, поддерживающего невязанный перенос. На микроскопическом уровне отсутствие инверсионной симметрии выражается термином SOC. В этом отношении системы, основанные на топологических изоляторах (ТИ), представляют интерес, поскольку они обеспечивают сильнейший SOC, обеспечивающий линейную спин-поляризованную дисперсию поверхностных состояний.

Диодный эффект в структурах на основе ТИ был обнаружен в Джозефсоновских переходах, а также в гибридных структурах. На практике при производстве мезоскопических диодных устройств разумно ожидать некоторого присутствия немагнитных примесей в структурах. Однако ранее было показано, что эффективность диодов, как ожидается, будет низкой в диффузионных системах на основе титана [35]. Еще одним недостатком диффузионных диодов ТИ является их ограниченная перестраиваемость. В этих устройствах полярность диода не может быть изменена без изменения зеемановского поля, хотя в длинных баллистических Джозефсоновских переходах S/TI/S (S обозначает сверхпроводник) такая ситуация возможна.

В данной работе рассматривается сверхпроводящий диод, основанный на двух сверхпроводящих областях с индуцированным вблизи обменным полем в плоскости поверх топологического изолятора. Фермиевский контур поверхностных состояний ТИ обычно представлен спектром Дирака, то есть одиночной спиральной полосой, которая характеризуется сильнейшим эффектом фиксации спинового импульса. Здесь мы рассмотрим гибридную структуру F/S/TI/S/F (F обозначает ферромагнитный слой), которая изображена на рисунке 3.1.

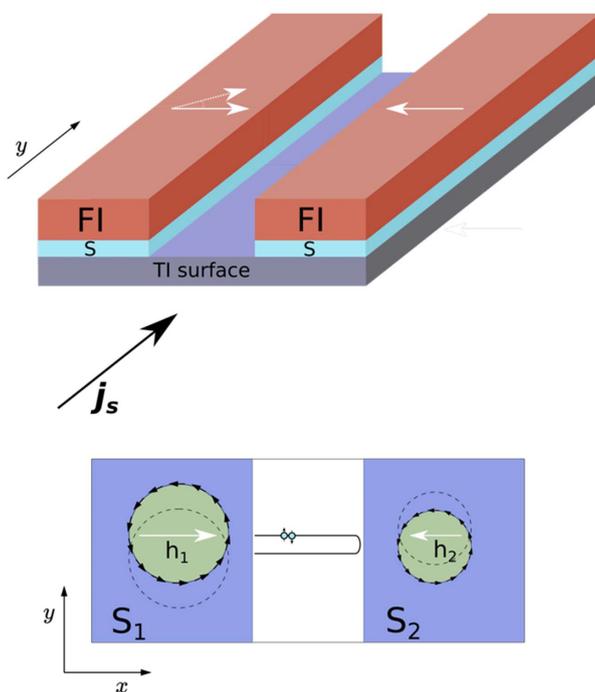


Рисунок 3.1 – Геометрия рассматриваемого управляемого диода, который состоит из двух сверхпроводящих островков с индуцированным близостью обменным полем в плоскости, нанесенным поверх топологического изолятора. Схематическое изображение ферми-контуров двух сверхпроводящих областей с обменными полями, ориентированными в противоположных направлениях. S_1 и S_2 соединены через поверхность ТИ

Мы утверждаем, что такая гибридная структура может вести себя как двухспиральная ленточная система, как, например, нецентросимметричные сверхпроводники. Однако две спиральные полосы в рассматриваемой структуре связаны не в пространстве импульсов, а в реальном пространстве поверхностью ТИ. Связь между двумя островками может регулироваться, например, шириной несверхпроводящей части ТИ. При рассмотрении диодного эффекта предлагаемая компоновка может существенно

повысить эффективность диода при условии, что ферромагнитные обменные поля двух областей F/S ориентированы в противоположных направлениях. Несоосность обменных полей приводит к конкуренции двух отдельных спиральных полос в сверхпроводящих областях за их вклад в невзаимность критического тока.

3.2 Квазиклассическая теория

Гибридная структура F/S/TI/S/F может быть описана следующим эффективным низкоэнергетическим гамильтонианом в пространстве частиц-дырок и спинов

$$H(k) = \alpha(k_y\sigma_x - k_x\sigma_y)\tau_z - (\mu + V(k))\tau_z + h * \sigma\tau_0 - \hat{\Delta}(k)$$

где α - скорость Ферми, μ - химический потенциал, V - потенциал примеси, $h = (h_x, 0, 0)$ – обменное поле, обусловленное соседним ферромагнетиком. Матрицы τ и σ представляют собой матрицы Паули размером 2×2 в пространствах частиц-дырок и спинов соответственно. Матрица парного потенциала $\hat{\Delta}$ для сверхпроводников определяется как $\hat{\Delta} = i\sigma_y \hat{\Delta}_s = i\sigma_y \hat{U} \tau_x \Delta(x) \hat{U}^\dagger$, где матрица преобразования $\hat{U} = \exp(iqy\tau_z/2)$. Конечный импульс центра масс q учитывает спиральное состояние. Парный потенциал $\Delta(x)$ – это вещественная функция, определяемая следующим образом

$$\Delta(x) = \begin{cases} \Delta_1(x), & -d_{s1} - \frac{L}{2} < x < -\frac{L}{2} \\ 0, & -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} \\ \Delta_2(x), & \frac{L}{2} < x < d_{s2} + \frac{L}{2} \end{cases}$$

Здесь Δ_1 и Δ_2 рассчитаны самосогласованно и соответствуют сверхпроводящим областям S_1 и S_2 соответственно (рисунок 1). Наконец, L – это ширина обнаженной поверхности TI (нормальная часть N), а $d_{s1}(d_{s2})$ - ширина области S_1 (S_2). Важно подчеркнуть, что, хотя геометрия рассматриваемого устройства соответствует Джозефсоновскому переходу, в данной работе мы рассматриваем нулевую макроскопическую разность фаз между областями S_1 и S_2 , так что Джозефсоновский сверхток отсутствует. Аномальный фазовый сдвиг основного состояния ϕ_0 также отсутствует, поскольку мы предполагаем, что составляющая обменного поля $h_y = 0$. С другой стороны, компонент h_x в системе считается конечным и определяется следующим образом

$$h_x = \begin{cases} h_1, & -d_{s1} - \frac{L}{2} < x < -\frac{L}{2} \\ 0, & -\frac{L}{2} < x < \frac{L}{2} \\ h_2, & \frac{L}{2} < x < d_{s2} + \frac{L}{2} \end{cases}$$

Мы решаем поставленную задачу для гамильтониана в виде уравнения. (1) в рамках микроскопического подхода, основанного на квазиклассических функциях Грина в диффузионном пределе. Такая модель может быть описана уравнениями Узаделя

$$D\widehat{\nabla}(\widehat{g}\widehat{\Delta}\widehat{g}) = [\omega_n\tau_z + i\widehat{\Delta}_s, \widehat{g}]$$

Здесь D - постоянная диффузии, τ_z - матрица Паули в пространстве частиц и дырок. В общем случае оператор $\widehat{\nabla}X = \nabla X + i(h_x\hat{e}_y - h_y\hat{e}_x)[\tau_z, \widehat{g}]/\alpha$. Матрица функций Грина также преобразуется в виде $\widehat{g} = \widehat{U}\widehat{g}_q\widehat{U}^\dagger$.

Для упрощения процедур решения нелинейных уравнений Узаделя мы используем θ параметризацию функций Грина,

$$\widehat{g}_q = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}$$

Подставляя приведенную выше матрицу в уравнение Узаделя (4), мы получаем в сверхпроводящих частях при $|x| > L/2$:

$$\xi_s^2 \pi T_{cs} \left[\partial_x^2 \theta_i^s - \frac{q_i^2}{2} \sin 2\theta_i^s \right] = \omega - n \sin \theta_i^s - \Delta_i(x) \cos \theta_i^s$$

Где индекс $i = 1, 2$ относится к сверхпроводящим частям S_1 и S_2 , $q_i = q + 2h_i/\alpha$ и в нормальной части $-L/2 < x < L/2$:

$$\xi_N^2 \pi T_{cs} \left[\partial_x^2 \theta_N - \frac{q^2}{2} \sin 2\theta_N \right] = \omega_n \sin \theta_N$$

где $\theta_{s(N)}$ обозначает значение θ $S(N)$ поверхности П. Мы ввели характеристическую длину $\xi_{s(N)} = \sqrt{D_{s(N)}/2\pi T_{cs}}$, где T_{cs} - температура перехода в открытой S области. Уравнения самосогласованности для парных потенциалов могут быть записаны в виде

$$\Delta_i(x) \ln \frac{T_{cs}}{T} = \pi T \sum_{\omega_n > 0} \left(\frac{\Delta_i(x)}{\omega_n} - 2 \sin \theta_i^s \right)$$

Наконец, мы дополняем приведенные выше уравнения двумя парами граничных условий (по два для каждой границы раздела S/N) следующего типа

$$\gamma \xi_l \widehat{g}_l \nabla \widehat{g}_l = \xi_r \widehat{g}_r \nabla \widehat{g}_r$$

$$\gamma_B \xi_l \widehat{g}_l \nabla \widehat{g}_l = [\widehat{g}_l, \widehat{g}_r]$$

Здесь параметры $\gamma_B = R_B \sigma_l / \xi_l$, $\gamma = \xi_r \sigma_l / \xi_l \sigma_r$, где $\sigma_{l(r)}$ - проводимость материала слева (справа) от границы раздела. Параметр γ управляет наклоном функций Грина на границе раздела, тогда как γ_B управляет несоответствием между функциями на границе раздела. В то время как для идентичных материалов $\gamma = 1$, в общем случае, этот параметр может иметь произвольное значение. γ_B - это параметр, определяющий прозрачность S/F интерфейса.

Величина сверхтока в диффузионном пределе может быть найдена из следующего выражения

$$J_s(N) = -\frac{i\pi\sigma_{s(N)}}{4e} T \sum_{\omega_n} \text{Tr}[\tau_z \hat{g}_{s(N)} \hat{v} \hat{g}_{s(N)}]$$

Выполняя унитарное преобразование U , плотность тока преобразуется следующим образом:

$$j_y^{s1(2)}(x) = -\frac{\pi\sigma_{s1(2)}}{2e} \left[q + \frac{2h_{1(2)}}{\alpha} \right] T \sum_{\omega_n} \sin^2 \theta_{s1(2)}$$

$$j_y^n(x) = -\frac{\pi\sigma_n q}{2e} T \sum_{\omega_n} \sin^2 \theta_n$$

Суммарный сверхток, протекающий через систему в направлении y , может быть рассчитан путем интегрирования плотности тока от общей ширины F/S/TI/S/F:

$$I = I_{s1} + I_{s2} + I_N$$

где I_{s1} , I_{s2} и I_N - суммарные сверхтоки, проинтегрированные вдоль направления x в областях S_1 , S_2 и N соответственно.

3.3 Результаты

В ходе обсуждения результатов зафиксируем следующие параметры системы: $d_{s1} = d_{s2} = 1.2\xi$, $\gamma_1 = \gamma_2 = 0.5$, $T = 0.1T_{cs}$. Начнем с анализа соотношений $I(q)$, когда обменные поля H_1 и H_2 одинаковы в обеих сверхпроводящих областях. На рисунке 2а мы наблюдаем характерное поведение сверхтока при $I(q0) = 0$, где $q_0 \neq 0$ – импульс куперовской пары основного состояния, который отражает спиральную природу основного состояния сверхпроводника. Мы также можем заметить некоторую неравномерность сверхтока, т.е. $I_c^+ \neq I_c^-$, что является следствием спирального состояния. Как мы увидим ниже, эффективность диода довольно низкая и, в данном случае, не превышает нескольких процентов. В отсутствие какого-либо обменного поля $I(q = 0) = 0$, что означает, что основным состоянием является обычное состояние с нулевым импульсом куперовской пары. Чтобы получить более полное представление, построим график плотности сверхтока J_y на рисунке 3.2.b Следовательно, в ситуации, когда H_1 и H_2 идеально выровнены, мы ожидаем хорошо известного поведения суммарного сверхтока.

Теперь рассмотрим случай, когда обменные поля H_1 и H_2 ориентированы в противоположных направлениях (рисунок 3.2.b). Когда расстояние между S_1 и S_2 велико ($L = 4\xi$), сверхпроводящие области хорошо разделены и действуют практически независимо друг от друга с отчетливыми критическими сверхтоками I_{c1}^{\pm} и I_{c2}^{\pm} , соответствующими S_1 и S_2 соответственно. Это обстоятельство хорошо видно из

зависимости $I(q)$ для $L = 4\xi$, и в этом смысле расстояние L можно представить как силу связи между S_1 и S_2 . Поведение $I(q)$ резко меняется, если L становится меньше. Области кривой $I(q)$, которые ранее можно было легко отнести к каждому сверхпроводящему островку, начинают «перекрываться», отражая более сильную связь между S_1 и S_2 . В результате мы можем достичь ситуации, когда критический ток гибридной структуры в одном направлении существенно перенормируется. Например, мы можем наблюдать, что I_c^+ определяется относительно левого максимума $I(q)$ при $L = \xi$, в то время как I_c^- остается примерно на том же значении. Более сильная связь между сверхпроводящими областями приводит к более сложному распределению плотности сверхтока по гибридной структуре (как показано на рисунке 3.2.d). Получение такого нетривиального поведения $I(q)$ является ключевой идеей, лежащей в основе достижения большей эффективности диода η . В данной работе рассматривается поверхность Ферми с одной спиральной полосой. Однако в нашей системе мы можем использовать S_1 и S_2 с противоположными h_1 и h_2 , как показано на рисунке 3.1, что можно рассматривать как эффективную систему из двух спиральных полос.

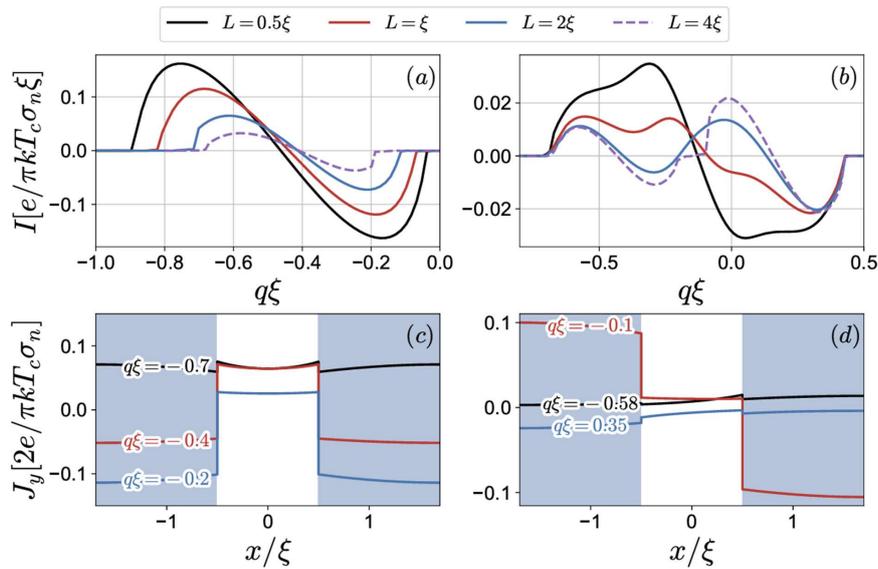


Рисунок 3.2 – Сверхток I как функция от q при $h_1 = h_2 = 0.25$ (a) и при $h_1 = -0.1$, $h_2 = 0.25$ (b). Нижние панели иллюстрируют распределения плотности тока при различных q , соответствующие верхним панелям для $L = \xi$

Эффективность диода может быть определена следующим стандартным образом

$$\eta = \frac{I_c^+ - |I_c^-|}{I_c^+ + |I_c^-|}$$

На рисунке 3.3 эффективность диода наряду с критическими токами построена как функция от H_1 , в то время как значение H_2 зафиксировано на уровне $H_2 = 0.25$. Из рисунка 3 видно несколько характерных особенностей поведения η . Во-первых, эффективность диода довольно низкая при больших положительных значениях H_1 , оставаясь менее 5% при $H_1 = 0.1$. Это ожидаемое поведение диодов с одиночной спиральной полосой в пределе рассеяния наблюдалось в ранних работах [19]. При уменьшении H_1 КПД диода повышается до определенного значения, а затем η быстро меняет знак, достигая максимального значения. В тот момент, когда диод меняет свою полярность, происходит переход между S_1 и S_2 в их вкладе в критические токи. Мы предполагаем, что в окрестности $\eta = 0$ сверхпроводящие области S_1 и S_2 сильно конкурируют друг с другом, поскольку по отдельности они обладают противоположными эффективностями, поскольку значения H_1 и H_2 имеют противоположные знаки. Можно сказать, что при определенном значении H_1 критические токи I_c^+ и I_c^- всей системы в основном определяются параметрами S_1 и S_2 , т.е. сверхток в основном проходит через одну из сверхпроводящих областей в противоположных направлениях. Еще одно важное наблюдение из рисунка 3 заключается в том, что изменение знака КПД диода происходит при более низких значениях критических токов. Это означает, что более высокие КПД диода из-за конкуренции S_1 и S_2 имеют место при существенно подавленном сверхпроводящем состоянии. Наконец, мы можем видеть, как прозрачность интерфейса влияет на η . Более высокая прозрачность может повысить КПД до 40%, однако при меньших критических токах.

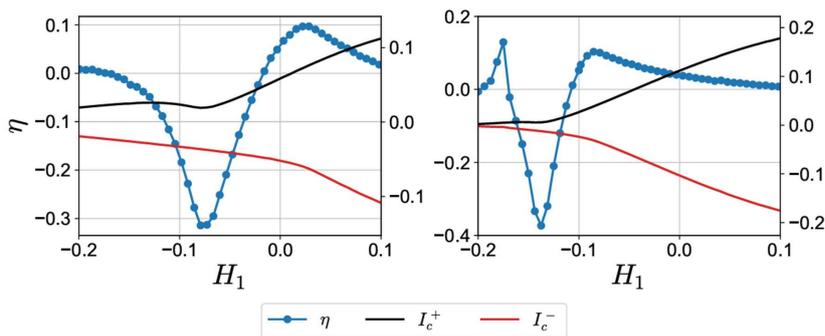


Рисунок 3.3 – Критические значения сверхтоков I_c^+ , I_c^- (правая вертикальная шкала) и КПД диода η (левая вертикальная шкала) как функции H_1 для $L = \xi$. Левый и правый графики соответствуют $\gamma_{B1} = \gamma_{B2} = 0.4$ и $\gamma_{B1} = \gamma_{B2} = 0.2$ соответственно. Шкала критических токов измеряется в единицах $2e/\pi kT_c \sigma_n \xi$.

Прозрачность интерфейса γ_B является важным параметром системы, который, в принципе, может быть использован в качестве параметра настройки в эксперименте. Регулирование этого параметра может быть достигнуто путем подачи стробирующего напряжения на интерфейс. Более подробный анализ влияния прозрачности интерфейса на диодный эффект представлен на рисунке 3.4. Мы замечаем, что наибольшая эффективность достигается при меньшем $\gamma_B = 0.2$ для $L = \xi$. Однако, как мы видим из графиков, это не общая тенденция. Например, наибольшее значение η достигается при $\gamma_B = 0.5$ для $L = 4\xi$. Следовательно, существует оптимальное значение прозрачности интерфейса для достижения максимальной эффективности. Также важно подчеркнуть, что поле обмена H_1 , при котором происходит "основное" изменение знака η , смещается в сторону больших значений по мере уменьшения γ_B . Это означает, что полярность диода может быть изменена с помощью управления прозрачностью интерфейса, чего нельзя достичь в диффузионном однополосном сверхпроводящем диоде. Наконец, на рисунке 3.4 мы наблюдаем многократное изменение знака добротности. Это может отражать конкурентный характер поведения S_1 и S_2 в невзаимном сверхтоке.

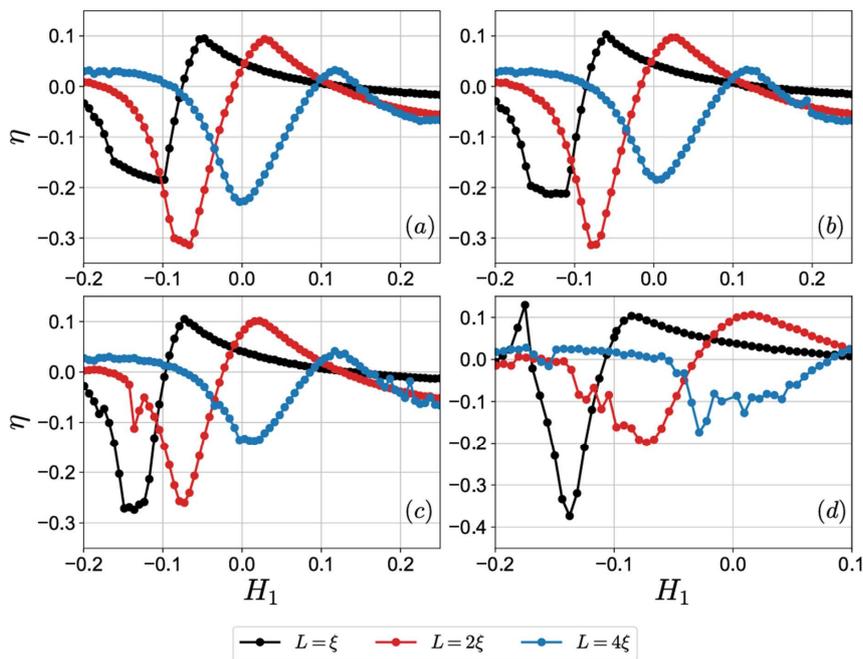


Рисунок 3.4 – Эффективность сверхпроводящего диода η рассчитанная при различной прозрачности границы раздела γ_B . График (a) соответствует $\gamma_{B1} = \gamma_{B2} = 0.5$, (b) – $\gamma_{B1} = \gamma_{B2} = 0.4$, (c) – $\gamma_{B1} = \gamma_{B2} = 0.3$ и (d) – $\gamma_{B1} = \gamma_{B2} = 0.2$.

3.4 Заключение

В заключение, в данной работе был рассмотрен эффект сверхпроводящего диода в гибридной структуре F/S/TI/S/F. Было показано, что при определенных условиях, когда обменные поля ферромагнитных областей противоположны, эффективность диода может быть значительно увеличена. Такое улучшение можно объяснить конкурентным поведением сверхпроводящих областей с одиночными спиральными лентами. Полученные результаты могут быть полезны для создания высокоэффективных сверхпроводящих диодов в отсутствие внешнего магнитного поля. Более того, знак эффективности диода может быть изменен в зависимости от прозрачности поверхности раздела. По данной работе была опубликована статья в журнале *Physica Scripta* [16].

В качестве направления дальнейших исследований можно изучить Джозефсоновский диодный эффект в гибридной структуре, о которой идет речь в данной работе. В этом случае достигается невзаимность критического тока Джозефсона.

4 Проведение первопринципных расчетов магнитных и электронных свойств квазидвумерных магнетиков на основе халькогенидов переходных металлов

Расчеты *ab initio* DFT проводились с использованием пакета Vienna Ab initio Simulation Package (VASP). Функционал Пердью–Берка–Эрнцерхофа (PBE) совместно с методом проекционно-увеличенной волны. Для описания электрон-ионных взаимодействий использовалась энергия отсечки 300 эВ для базисного набора плоских волн. Критерий сходимости энергии для расчетов электронной структуры составил 10^{-5} эВ, а силовой критерий релаксации структуры составил 0,02 эВ/Å. Дисперсионные взаимодействия рассматривались с помощью модели Гримме D3. Мы построили модели $\Sigma 5$ (120) ГЗ, объединив две пластины CsPbBr₃ (120) (кубическая фаза) в противоположных направлениях с использованием кода AtomsK, и мы изменили осевую длину, чтобы ввести деформацию. Четырехслойные пластины были приняты для предотвращения взаимодействия между двумя ГЗ в периодической ячейке. Более того, мы удвоили модели плит вдоль направления [001], чтобы учесть эффект скольжения. Модели GB включают несколько элементарных ячеек и содержат 200 атомов. Использовалась только G-точка зоны Бриллюэна, что снижает вычислительные затраты и минимизирует нефизические взаимодействия между периодическими изображениями ГЗ, возникающими из-за конечного размера системы. ML силового поля обучалось с помощью пакета DeePMD-kit и реализовано в коде LAMMPS для моделирования MD. Мы использовали дескриптор *se_e2_a* с радиусом обрезания 9 Å для построения потенциала нейронной сети. Размеры слоев внедрения и подгонки составляли 25×50×100 мм и 240×240×240 мм соответственно. Мы обучили один ML силового поля для всех моделей ГЗ, и его точность была проверена путем сравнения предсказанных ML потенциальных энергий с результатами расчетов DFT (RMSE < 10 мэВ/атом). Все моделирования MD проводились при 300 К в каноническом ансамбле. Визуализация структур была выполнена с помощью программного пакета VESTA.

На рисунке 4.1a показана структура построенной модели межзеренной границы $\Sigma 5$ (120) CsPbBr₃. Эта структура соответствует зеркально-симметричной двойной границы зерен, состоящей из двух зерен CsPbBr₃ вдоль поверхности кристалла (120). $\Sigma 5$ представляет собой число точек решетки в элементарной ячейке решетки узлов совпадения ГЗ, определяя угол наклона 36,9°. Наша предыдущая работа показывает, что эта система находится в метастабильном состоянии, и ГЗ спонтанно скользит в направлении оси X (фронтальный вид на рисунке 1a) в течение нескольких пикосекунд в MD моделировании. Скольжение изменяет взаимодействие между боковыми зернами, нарушает исходную равновесную структуру и вызывает напряжение в осевом

направлении. На рисунке 4.1b показаны относительные изменения энергии модели ГЗ по отношению к эффектам скольжения и деформации, где положения атомов полностью расслаблены, но размер ячейки моделирования фиксирован. Мы вводим деформацию, изменяя осевую длину с шагом 1%. Начальная структура лежит близко к минимуму энергетической кривой до скольжения, поскольку постоянная решетки взята из оптимизированного объемного CsPbBr₃. Скольжение резко снижает энергию системы, а положительный наклон энергетической кривой после скольжения указывает на наличие растягивающей деформации в модели. После уменьшения осевой длины на 2% скользящая система близка к минимуму энергетической кривой и становится свободной от деформации. Более того, мы дополнительно вводим изменение длины на -2%, чтобы учесть условие деформации сжатия. Следует отметить, что такие деформации сопоставимы с наблюдаемыми в экспериментах. Моделирование AIMD проводится для исследования влияния деформации на структурные флуктуации. Мы запустили 10 пс траекторий AIMD для каждой модели ГЗ. Первые 5 пс предназначены для нагрева системы до равновесного состояния, а последние 5 пс траекторий используются для анализа. На рисунке 4.1c,d показаны флуктуации потенциальной энергии и статистические результаты соответственно. Среднеквадратичное значение (RMS – root mean square) потенциальной энергии уменьшилось в модели растяжения-деформации по сравнению с моделью без деформации, что согласуется с диаграммой энергия-деформация. Однако деформация сжатия лишь немного увеличивает потенциальную энергию, а флуктуация подавляется, на что указывают изменения стандартного отклонения. Эти результаты показывают, что деформация в ГЗ CsPbBr₃ не только влияет на межатомную потенциальную энергию, но и мешает структурным колебаниям.

Плотность состояний (DOS) различных моделей ГЗ представлена на рисунке 4.2a. Структура ГЗ создает электронные состояния вблизи края зоны, которые редко подвергаются воздействию деформации. Тем не менее, ГЗ CsPbBr₃ демонстрирует крупномасштабные движения при тепловых флуктуациях, а структурное искажение помещает эти состояния глубоко в запрещенную зону. Рисунок 4.2b иллюстрирует схему этого процесса, а эволюция уровня энергии модели ГЗ с деформацией сжатия за последние 2 пс показана на рисунке 4.2c в качестве примера. Наивысшая занятая молекулярная орбиталь (HOMO) и низшая незанятая молекулярная орбиталь (LUMO) могут быть изолированы от других орбиталей во время колебаний, как указано стрелками. Ожидается, что такие электронные состояния будут захватывать фотогенерированные носители и способствовать их рекомбинации, что приведет к потерям энергии. Рисунок 4.2d показывает оптимизированную структуру CsPbBr₃ после скольжения. Ненасыщенные

атомы Pb и Br образуются на границах и отвечают за состояния ГЗ на краю зоны. Когда структура ГЗ искажается, расстояние между атомами Br может быть сокращено, а электростатическое отталкивание делает систему менее стабильной, повышая уровень энергии НОМО. С другой стороны, когда атомы Pb становятся ближе, гибридизация между их пустыми бр-орбиталями усиливается, понижая энергетический уровень LUMO. Эти два эффекта вместе способствуют появлению состояний ловушек в середине щели. Поэтому подавление структурного искажения представляет собой многообещающий подход к предотвращению образования этих состояний ловушек.

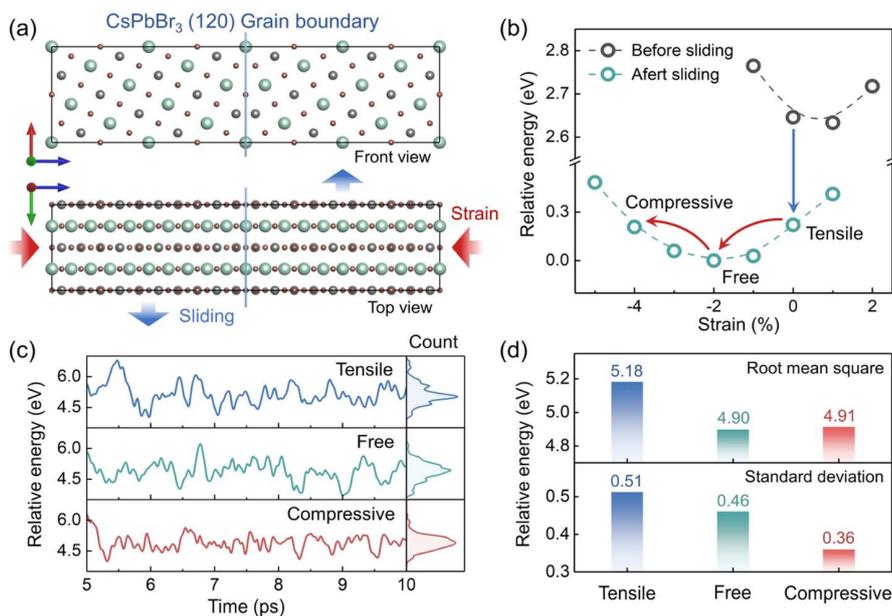


Рисунок 4.1 – (а) Вид спереди и сверху модели ГЗ CsPbBr₃. Цветовые коды: зеленый для Cs, серый для Pb и коричневый для Br. (b) Относительное изменение энергии системы ГЗ по отношению к скольжению и деформации. (c) Относительная флуктуация потенциальной энергии различных моделей ГЗ в последние 5 пс из 10 пс траекторий AIMD. (d) Среднеквадратичное и стандартное отклонение результатов относительной потенциальной энергии в последних 5 пс

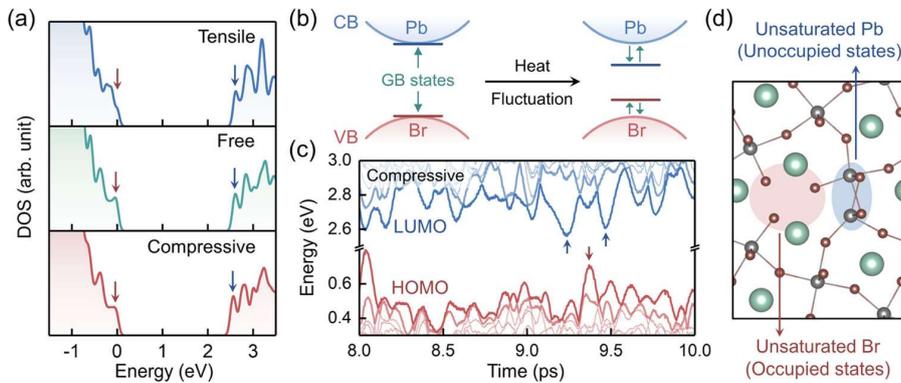


Рисунок 4.2 – (а) Графики плотности состояний (DOS) моделей ГЗ. Красные и синие стрелки указывают на состояния края зоны. (b) Схема изменений электронной структуры ГЗ при тепловых флуктуациях. (c) Эволюция уровня энергии модели сжатия-деформации в последние 2 пс траектории AIMD длительностью 10 пс. (d) Структуры ненасыщенных атомов Pb и Br в области ГЗ

Время жизни носителей заряда в CsPbBr₃ измеряется наносекундами, и в этот период могут происходить некоторые медленные колебания и редкие события, создание ловушечных состояний и содействие рекомбинации носителей. Однако моделирование AIMD ограничено несколькими пикосекундами из-за дорогостоящих квантово-механических расчетов. Чтобы решить эту проблему временного масштаба, разработано ML силового поля для прогнозирования межатомных взаимодействий непосредственно из локальных конфигураций. Мы выполняем моделирование ML-основанной MD (MLMD) длительностью 1 нс для каждой модели ГЗ, чтобы получить геометрическую эволюцию структуры, и вычисляем уровни энергии каждые 1 пс с помощью DFT, чтобы отслеживать эволюцию электронной структуры. На рисунке 4.3а показано распределение атомов в траекториях MLMD длительностью 1 нс (диаграмма рассеяния) и их средние положения (модель шара и стержня) в области ГЗ. Атомы в объемной области в основном колеблются вокруг положений равновесия, в то время как конфигурация ГЗ, особенно в синих треугольниках, изменяется под действием аксиальной деформации. В частности, соседние атомы Br мигрируют, чтобы координироваться с ненасыщенными атомами Pb, как указано коричневыми кружками, и исходная координация Pb–Pb нарушается в модели сжатия-деформации. На рисунке 4.3b показана эволюция среднеквадратичного смещения (RMSD) для всех атомов в различных моделях ГЗ. Модель растяжения-деформации демонстрирует медленные структурные флуктуации с периодом в несколько сотен пикосекунд, в то время как такие флуктуации эффективно подавляются в моделях без деформации и с деформацией сжатия. Кроме того, кривые RMSD также показывают, что структурные искажения в моделях без деформации и с деформацией сжатия происходят в течение 100

пс, что намного быстрее, чем рекомбинация носителей. Структурные изменения далее исследуются с помощью функции радиального распределения (RDF), как показано на рисунке 4.3с. Мы вычисляем RDF между атомами Pb в области ГЗ (т. е. синей треугольной области) и атомами Br, координированными с ними в исходной структуре. Аксиальная деформация в основном влияет на координацию Pb–Pb, в то время как локализованное взаимодействие Pb–Br почти сохраняется. RDF Pb–Pb можно разделить на две части (около 4 и 6 Å), которые соответствуют атомам Pb, разделенным двумя и одним атомом Br соответственно. Сжатие модели растяжения-деформации в аксиальном направлении увеличивает отношение первой части кривой RDF Pb–Pb, указывая на структурный переход от исходной структуры перовскита к искаженной конфигурации ГЗ. Этот вывод согласуется со структурными изменениями, наблюдаемыми на рисунке 3а. Более того, деформация сжатия приводит к более равномерному распределению RDF Pb–Pb около 4 Å, что подразумевает появление аморфноподобной структуры. По сравнению с результатами эволюции RMSD такая деформационная реконструкция ГЗ повышает ее устойчивость к структурным флуктуациям.

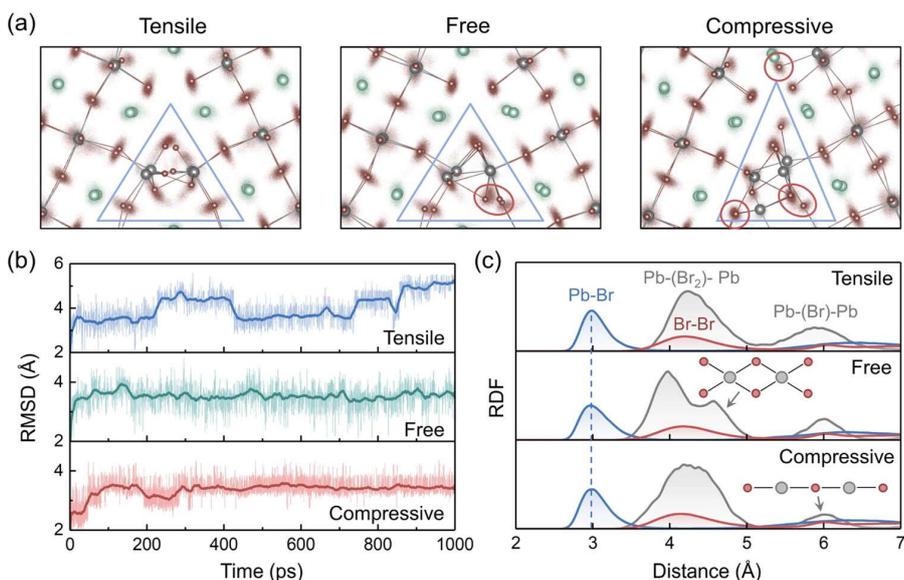


Рисунок 4.3 – (а) Структурные колебания моделей ГЗ в траекториях MLMD длительностью 1 нс. Облака представляют атомные распределения в траекториях MLMD, а усредненные по времени структуры показаны шаростержневыми моделями. Искажение ГЗ и миграция атомов Br обозначены синими треугольниками и красными кружками соответственно. (б) Эволюция среднеквадратичного смещения (RMSD) моделей ГЗ в траекториях MLMD. Толстые линии отображают скользящие средние значения за 20 пс. (с) Усредненные по времени радиальные функции распределения (RDF) атомов Pb и Br в области ГЗ в траекториях MLMD

Кроме того, в данной работе проведены экспериментальные и теоретические исследования тонких пленок $\text{Cd}_x\text{Pb}_{1-x}\text{S}$, а также механизмов их формирования, и наноструктурной морфологии. Комбинируя различные экспериментальные методы и первопринципные расчеты, мы показали, что свойства пленок имеют сильную зависимость от механизма их роста. Различные механизмы роста приводят к различной концентрации элементов в образце, что, в свою очередь, приводит к различной морфологии поверхности, различным электронным и оптическим свойствам. Физико-химическая модель, построенная на основе расчетов методом функционала плотности (DFT) подтвердила стабильность соединения $\text{Cd}_x\text{Pb}_{1-x}\text{S}$ и хорошо описывает экспериментально наблюдаемые результаты, полученные на тонких пленках этого соединения. Конкретно, расчетные значения ширины оптической щели для различных концентраций кадмия находятся в хорошем соответствии с экспериментальными данными. Подтверждена термодинамическая стабильность растворов $\text{Cd}_x\text{Pb}_{1-x}\text{S}$ в области концентраций $x \leq 0.2$.

Таким образом, в нашей работе доказана возможность изменения свойств образцов $\text{Cd}_x\text{Pb}_{1-x}\text{S}$ путем легирования кадмием. Экспериментальные исследования с использованием метода EDX и Оже-спектроскопии подтвердили равномерное распределение элементов в нанокристаллах пленок $\text{Cd}_x\text{Pb}_{1-x}\text{S}$.

Оптимизация геометрии, полные энергии и расчет электронных структур были выполнены с использованием пакета моделирования Vienna ab initio (VASP) в рамках теории функционала плотности (DFT). Метод проекционно-дополненных волн (PAW) использовался для электрон-ионных взаимодействий, а обобщенное градиентное приближение (GGA) Пердю, Берка и Эрнцехофа (GGA-PBE) использовалось для описания обменно-корреляционной функции. Использовалась энергия отсечки 500 эВ, а неприводимая зона Бриллюэна была выбрана с помощью регулярной сетки Монкхорста-Пака из $5 \times 5 \times 5$ и $4 \times 5 \times 5$ k -точек для расчета полной энергии объемного кубического $\text{Pb}_{1-x}\text{Cd}_x\text{S}$ соответственно, и $4 \times 4 \times 1$ и $5 \times 5 \times 1$ k -точек для расчета поверхности кубического и орторомбического Tl_2NiCu соответственно.

Для расчета поверхности была добавлена область вакуума в 20 ангстрем, чтобы избежать нежелательного взаимодействия между пластинами и ее периодическими изображениями. Все атомы были полностью расслаблены, пока величина сил на каждом атоме не свелась к значению менее 0,05 эВ/А. Для расчета поверхности в рамках метода суперъчеек для кубического $\text{Pb}_{1-x}\text{Cd}_x\text{S}$, рассматриваются четыре типа ориентированных поверхностей, где происходит наибольшая перестройка атомов во время мартенситного превращения. Это окончания Pb/Cd и S. Для расчета поверхности орторомбического

Ti₂NiCu мы рассматривали четыре типа поверхностей окончания направления. Чтобы гарантировать, что две стороны поверхностных пластин, используемых в расчете, достаточно толстые, чтобы демонстрировать объемные внутренние области, мы провели расчеты поверхностной энергии относительно достаточно толстых пластин, а затем выполнили полную релаксацию поверхности.

5 Синтез и экспериментальные исследования образцов Gd_2BaNiO_5

5.1 Введение

Существует несколько основных сценариев поведения квази-одномерных магнитных систем при низких температурах. В случае соединений, содержащих цепочки магнитных ионов со спином $S = 1$ (халдейновские цепочки) с антиферромагнитным внутрицепочечным обменным взаимодействием J , реализуется халдейновское щелевое состояние [36], как основное состояние системы с достаточно низкими значениями анизотропии ионов вдоль легкой оси D и/или легкой плоскости E , и межцепочечного обменного взаимодействия J' . Соединение Y_2BaNiO_5 , в кристаллической структуре которого NiO_6 октаэдры, соединенные по вершине, образуют цепочки, стало первой неорганической системой, свойства которой удовлетворяли строгим критериям существования халдейновского щелевого состояния. Установлено, что в Y_2BaNiO_5 щель в спектре магнитных возбуждений порядка 10 мэВ [37]. В изоструктурных соединениях семейства R_2BaNiO_5 (R - редкоземельный ион или ион иттрия) цепочки ионов Ni^{2+} спинов $S=1$ вытянуты вдоль оси a и разделены в плоскости bc ионами R^{3+} и Ba^{2+} . В соединениях R_2BaNiO_5 полная или частичная замена иона Y^{3+} на редкоземельный магнитный ион R^{3+} приводит к антиферромагнитному упорядочению [38].

Среди соединений R_2BaNiO_5 особое место принадлежит Gd_2BaNiO_5 из-за низкой анизотропии ионов Gd^{3+} , имеющих «сферическое» электронное распределение с конфигурацией $4f^7$. Как правило, параметры халдейнского состояния определяются измерениями неупругого рассеяния нейтронов. Однако чрезвычайно большое сечение рассеяния нейтронов на ионах Gd^{3+} исключает исследование неупругого рассеяния нейтронов. Представляется, что единственным способом определения параметра внутрицепочечного обменного взаимодействия J является его определение путем прямых измерений халдейнской щели Δ .

Исследование магнитной восприимчивости и теплоемкости на монокристалле Gd_2BaNiO_5 [39] показали, что в этом соединении наблюдается последовательность установления антиферромагнитного дальнего порядка при $T_N = 55$ К и спин-переориентационный переход при $T_{SR} = 24$ К. При приложении внешнего магнитного поля наблюдается спин-флоп-переход при $T < T_{SR}$ в магнитных полях $H \parallel b$ -оси кристалла и при $T_{SR} < T < T_N$ в магнитном поле $H \parallel a$ -оси кристалла [40]. Дальний магнитный порядок в Gd_2BaNiO_5 , происходящий в подсистеме Gd, сосуществует с квантово-неупорядоченным халдейнским состоянием в цепочках Ni.

5.2 Образцы и методы исследования

Поликристаллические образцы Gd_2BaNiO_5 были получены методом твердофазного синтеза. Качество и состав образцов контролировалось рентгеновскими методами. Температурные зависимости магнитной восприимчивости были получены на магнетометре MPMS-XL5 SQUID (Quantum Design). Полевые зависимости намагниченности были исследованы при низких температурах в сверхвысоких магнитных полях до 300 Тл, полученных путем сжатия взрывного потока.

Схема экспериментальной установки для исследования полевых зависимостей намагниченности представлена на вставке к рисунку 5.2. Разряд конденсаторной батареи формирует импульс тока силой около 2 МА в тонкостенном многопроводном соленоиде. Он создает затравочное магнитное поле около 16 Тл в цилиндрической области. Соленоид помещается внутрь кольцеобразного заряда взрывчатого вещества, в котором инициируется сходящаяся детонационная волна. Ударная волна приближается к соленоиду в максимальном затравочном магнитном поле, сваривает провода и образует проводящий полый цилиндр с захваченным магнитным потоком. Быстрое сжатие потока продуктами взрыва создает сверхсильное магнитное поле в центральной части генератора.

Измерения намагниченности проводили с помощью компенсированных катушек захвата. Четыре компенсированные катушки (с четырьмя разными образцами) были приклеены с двух сторон тонкой пластины из стекловолна. Порох помещался в отверстия, выполненные в одной из оболочек компенсированных катушек.

5.3 Результаты эксперимента и обсуждение

5.3.1 Температурные зависимости магнитной восприимчивости

Для характеристики исследуемых поликристаллических образцов Gd_2BaNiO_5 было проведено исследование температурной зависимости магнитной восприимчивости, измеренной в режимах ZFC (охлаждение в нулевом поле) и FC (охлаждения в присутствии поля) в поле $\mu_0H=0.1$ Тл, и представленной на рисунке 5.1. Стрелками указаны температуры дальнего магнитного порядка $T_N = 55$ К и температура спин-переориентационного перехода $T_{SR} = 24$ К. Измерения магнитной восприимчивости $\chi(T)$ на порошковом образце Gd_2BaNiO_5 не дают четкой сигнатуры фазового перехода при T_N , но фазовый переход на T_{SR} характеризуется изломом кривых $\chi(T)$, полученных в режимах ZFC и FC. Критические температуры фазовых переходов совпадают с обнаруженными при измерениях на монокристаллах Gd_2BaNiO_5 [39].

5.3.2 Полевые зависимости намагниченности (экспериментальные данные)

Полевые зависимости намагниченности Gd_2BaNiO_5 представлена на рисунке 5.2. Экспериментальные данные представлены сплошными линиями. Всего было выполнено четыре успешных выстрела на образцах Gd_2BaNiO_5 с результатами, совпадающими в пределах экспериментальной погрешности. В одном из выстрелов было два образца в компенсационных катушках разной конструкции, чтобы исключить систематические погрешности.

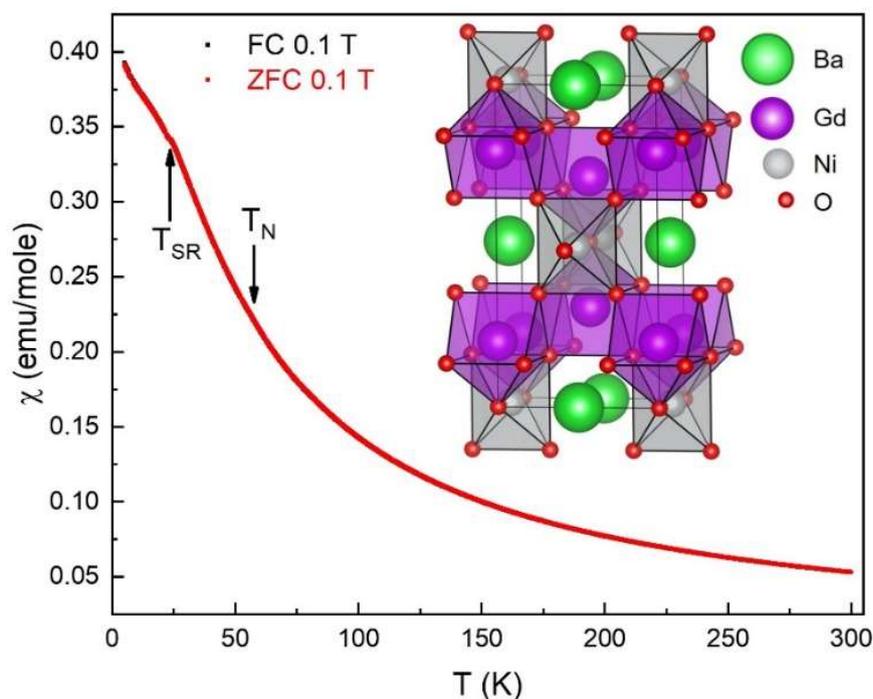


Рисунок 5.1 – Температурная зависимость магнитной восприимчивости, измеренная в режимах ZFC и FC в поле $\mu_0H=0.1$ Тл. Стрелками указаны температуры дальнего магнитного порядка T_N и температура спин-переориентационного перехода T_{SR} . На вставке к рисунку показана кристаллическая структура Gd_2BaNiO_5 в полиэдрическом представлении

При увеличении магнитного поля намагниченность быстро возрастает до уровня, превышающего 14 μ_B , что соответствует насыщению гадолиниевой подсистемы. Как было показано в экспериментах по рассеянию нейтронов на R_2BaNiO_5 , магнитные моменты в упорядоченном состоянии возникают не только на ионах редкоземельных элементов, но и на никеле [5]. Под действием внешнего магнитного поля моменты на никеле могут поляризоваться внешним магнитным полем, что может сопровождаться

появлением дополнительного вклада в намагниченность в точке $H < H_{C1}$. При первом критическом поле $H_{C1} = 90 \pm 20$ Т намагниченность вновь начинает увеличиваться, что можно объяснить подавлением халдейнской щели в никелевой подсистеме.

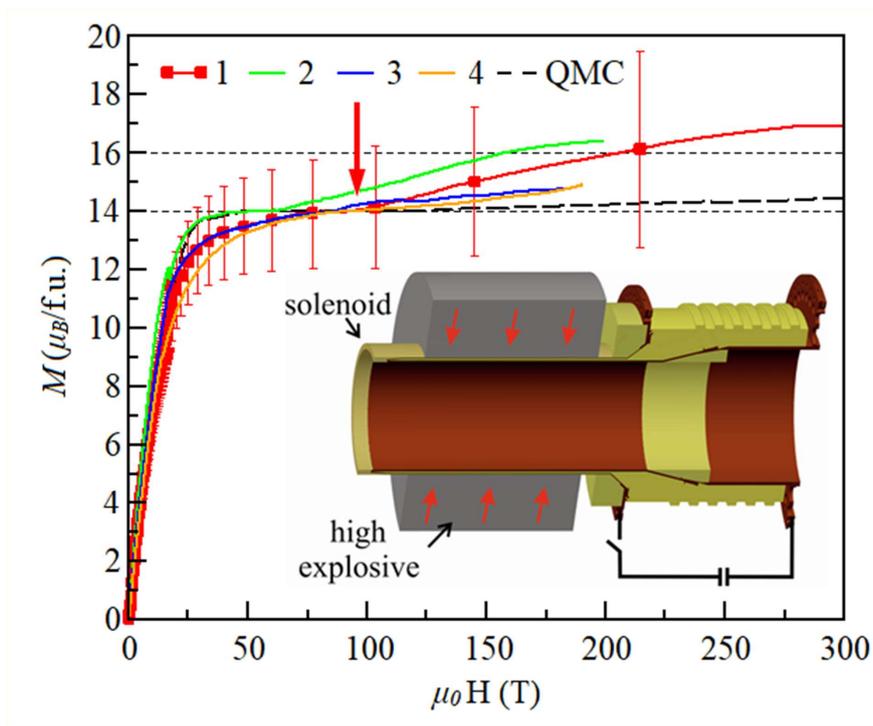


Рисунок 5.2 – Полевые зависимости намагниченности Gd_2BaNiO_5 . Экспериментальные данные представлены сплошными линиями. Цифрами обозначены результаты эксперимента четырех успешных выстрелов. Стрелкой показано первое критическое поле H_{C1} . Расчеты по методу квантового Монте-Карло представлены пунктирной линией. На вставке к рисунку представлена схема генератора, в котором индуцировалось поле до 300 Тл

5.3.3 Теория и расчеты

Для теоретического анализа полученных результатов были выполнены расчеты теории функционала плотности (DFT) с учетом сильного кулоновского отталкивания (U) для оценки параметров обмена. Значения U - J_H локального взаимодействия Хаббарда (U) и внутриатомного обмена (J_H) были приняты 6,1 эВ (для ионов Ni) и 8 эВ (для ионов Gd). Расчет плотности состояний из теории DFT+U показывает, что Gd_2BaNiO_5 представляет собой изолятор с запрещенной зоной $\sim 2,5$ эВ, 4f - состояния Gd локализованы и образуют отчетливые узкие пики на 7,5 эВ ниже и на 6 эВ выше уровня Ферми. Полосы

ниже уровня Ферми образованы р-состояниями ионов кислорода, которые гибридизуются с 3d-состоянием ионов Ni. Валентная полоса имеет преимущественно 3d характер никеля, в результате чего $\text{Gd}_2\text{BaNiO}_5$ можно классифицировать как изолятор с переносом заряда.

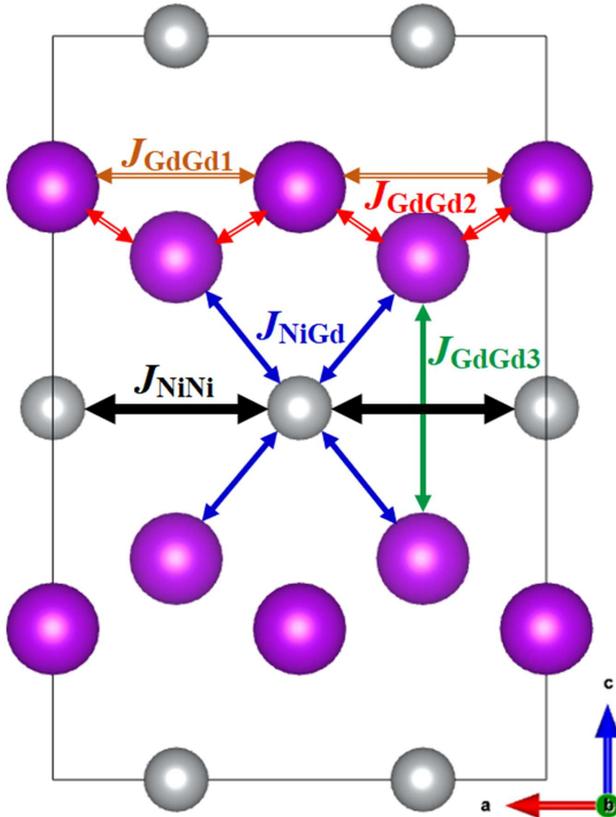


Рисунок 5.3 – Пути обмена в $\text{Gd}_2\text{BaNiO}_5$. Цветовая палитра соответствует рисунку 5.1

Мы рассчитали параметры обменного взаимодействия J_{ij} в модели Гейзенберга: $H = \sum_{i>j} J_{ij} S_i S_j$. Мы рассмотрели пять путей обмена, как показано на рисунке 1.3.3: J_{NiNi} — внутрипечечный обмен Ni-Ni вдоль оси a кристалла, J_{NiGd} - обменное взаимодействие между ионами Ni и ближайшими четырьмя ионами Gd. Ионы Gd образуют равносторонние треугольники, так что мы можем ввести два разных пути обмена: J_{GdGd1} вдоль основания треугольника ($d_1^{\text{Gd-Gd}} = 3,79 \text{ \AA}$) и J_{GdGd2} вдоль катетов ($d_2^{\text{Gd-Gd}} = 3,65 \text{ \AA}$). J_{GdGd3} соединяет ближайшие треугольные решетки Gd ($d_3^{\text{Gd-Gd}} = 4,66 \text{ \AA}$). Обратите внимание, что для каждого иона Gd существует только один J_{GdGd3} . Все

остальные пары Gd-Gd имеют гораздо большие расстояния, и поэтому ими можно пренебречь.

Полученные величины: $J_{NiNi} = 265$ К, $J_{NiGd} = 4,2$ К, $J_{GdGd1} = 0,4$ К, $J_{GdGd2} = 0,24$ К, $J_{GdGd3} = 1,33$ К. Значение J_{NiNi} согласуется с имеющимися оценками для Y_2BaNiO_5 . Стоит отметить, что подсистема Gd сильно фрустрирована: она имеет треугольную решетку с аналогичными антиферромагнитными обменными взаимодействиями J_{GdGd1} и J_{GdGd2} .

Для описания зависимости намагниченности в статическом магнитном поле проведено моделирование методом Монте-Карло. Мы смоделировали данные, рассматривая только подрешетку Gd с $S = 7/2$. Мы применили классический алгоритм метода Монте-Карло, чтобы избежать известной знаковой задачи на треугольной решетке. Наилучшее согласие с экспериментом достигнуто при увеличении параметров обменных взаимодействий между ионами Gd на 30% по сравнению с полученными в расчетах DFT+U, т.е. при $J_{GdGd1} = 0,52$ К, $J_{GdGd2} = 0,31$ К, $J_{GdGd3} = 1,73$ К.

Халдейновская цепочка обладает двумя критическими полями: $\mu_0 H_{C1}$ и $\mu_0 H_{C2}$. Цепочка находится в квантовом (немагнитном) халдейновском состоянии до $\mu_0 H_{C1}$. В точке $\mu_0 H_{C1}$ ($= \Delta$) халдейновская щель Δ закрывается, а в диапазоне $\mu_0 H_{C1} < \mu_0 H < \mu_0 H_{C2}$ намагниченность плавно увеличивается. При $\mu_0 H_{C2}$ система достигает намагниченности насыщения. Теоретические значения критических полей для изолированной цепочки $S = 1$ с внутрицепочечным обменным взаимодействием J составляют $\mu_0 H_{C1} = 0,41J$ и $\mu_0 H_{C2} = 4J$. Подставляя $J_{NiNi} = 265$ К, получаем критические поля для Gd_2BaNiO_5 (без учета подсистемы Gd) $\mu_0 H_{C1} = 81$ Т и $\mu_0 H_{C2} = 792$ Т.

Поскольку халдейновская щель является чисто квантовым явлением, расчет намагниченности полной системы Gd_2BaNiO_5 для сверхвысоких полей был выполнен методом квантового Монте-Карло. В данном случае рассматривалась спиновая решетка с атомами двух типов (Ni с $S = 1$ и Gd с $S = 7/2$), включающая все обменные взаимодействия.

Рассчитанная зависимость намагниченности от поля методом квантового Монте-Карло с параметрами обмена $J_{NiNi} = 265$ К, $J_{NiGd} = 4,2$ К, $J_{GdGd1} = 0,52$ К, $J_{GdGd2} = 0,31$ К, $J_{GdGd3} = 1,73$, представлена на рисунке 1.3.4. Полное намагничивание подсистем ионов Gd и Ni, достигающее значения $16 \mu_B/f.u.$, происходит в поле порядка 850 Тл, т. е. значительно выше максимально доступного экспериментального поля. Это согласуется как с трендом, так и с модельной оценкой $\mu_0 H_{C2}$, представленной выше.

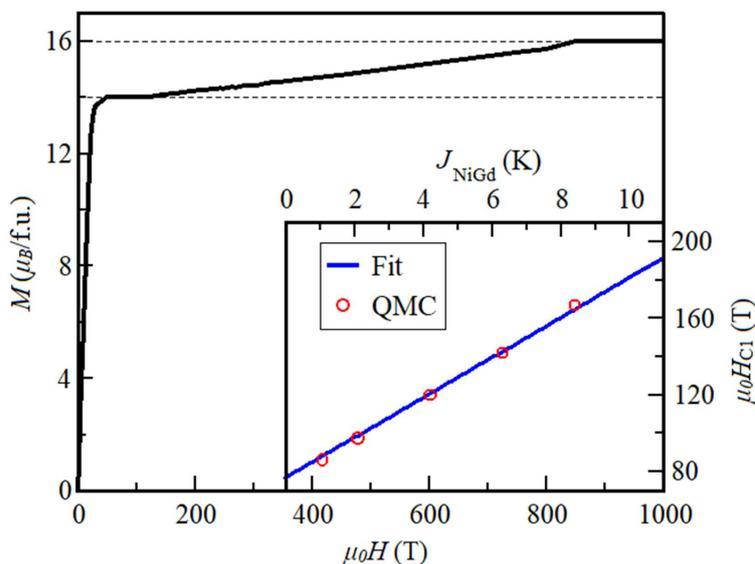


Рисунок 5.4 – Полевая зависимость намагниченности Gd_2BaNiO_5 , рассчитанная методом квантового Монте-Карло. Вставка: зависимость критического поля μ_0H_{C1} от параметра обменного взаимодействия J_{NiGd}

Были проведены дополнительные расчеты с различными значениями J_{NiGd} для определения зависимости сдвига критического поля μ_0H_{C1} от обмена Ni-Gd. Результаты показаны на вставке к рисунку 5.4. Расчеты показали, что H_{C1} сильно подвержено влиянию шахматного поля спинов Gd, что эффективно увеличивает халдейновскую щель за счет обменного взаимодействия.

Помимо μ_0H_{C1} и μ_0H_{C2} , Gd_2BaNiO_5 обладает дополнительным критическим полем $\mu_0H_{Gd}^{крит.}$ при котором подсистема Gd становится полностью намагниченной. Как следует из расчетов методом квантового Монте-Карло, намагниченность достигает плато 14 μ_B , что соответствует максимальному магнитному отклику от двух ионов Gd. Закрывание халдейновской щели происходит в поле около 120 Т. Это больше, чем экспериментальное значение 90 ± 20 Тл и модельное значение $\mu_0H_{C1} = 81$ Тл для изолированной никелевой цепочки. Увеличение критического поля μ_0H_{C1} можно объяснить тем, что ионы Gd создают эффективное магнитное поле вокруг ионов Ni. Из-за антиферромагнитной связи Ni-Gd это поле стремится повернуть соседние спины Ni в направлении, противоположном спинам Gd (которые направлены вдоль внешнего поля). Таким образом, это эффективное поле дополнительно стабилизирует состояние с противоположными спиновыми проекциями ионов Ni и, следовательно, эффективно работает для халдейновой фазы.

6 Теория стационарной динамики трех и более магнитных вихрей в мультислойном спинтрансферном наноосцилляторе

6.1 Введение

Относительно недавно было теоретически и экспериментально показано, что в магнитных наноструктурах между спин-поляризованным током и намагниченностью может возникнуть прямое (контактное) взаимодействие, которое способно привести к процессам перемагничивания и более сложной динамике спинов в магнитных материалах. Этот эффект обусловлен переносом спинового момента и имеет квантовую природу. Важным экспериментальным подтверждением эффекта переноса спина является возбуждение осцилляций намагниченности в спин-вентильных наноструктурах [41-45]. Системы, в которых таким образом возбуждается прецессия намагниченности, называются спин-трансферными наноосцилляторами (СТНО). Частота осцилляций в подобных трехслойных системах зависит от величины приложенного спин-поляризованного тока, и ей можно управлять в достаточно широких для технических приложений пределах. Спин-трансферный наноосциллятор часто представляет собой наностолбик, который имеет два магнитных слоя, разделенных немагнитной прослойкой. В магнитных слоях может существовать, как основное состояние, магнитный вихрь. Интерес к изучению вихревых СТНО связан с большими перспективами их практического применения и некоторыми преимуществами перед традиционными СТНО. Обзор последних достижений в этой области дан в работе.

Магнитная структура вихря, находящегося в условиях равновесия в центре нанодиска, качественно выглядит следующим образом: поле намагниченности лежит в плоскости и закручивается вокруг центра вихря; в его малой окрестности намагниченность выходит из плоскости и ориентируется перпендикулярно ей в центре диска. Как показано в работе, характерной чертой вихревого распределения является наличие центральной части вихря с перпендикулярной компонентой намагниченности. Эта центральная часть называется ядром вихря (диаметр ядра порядка 10 нм). Возможны два направления намагниченности в ядре вихря (полярности) вверх или вниз, что можно использовать, например, в цифровых устройствах памяти.

Изучению динамики магнитостатически связанных магнитных вихрей посвящено много экспериментальных и теоретических работ. Свойства такой системы во многом зависят от взаимной ориентации ядер вихрей. С помощью спин-поляризованного тока можно возбудить гиротропные колебания магнитостатически связанных вихрей с постоянной частотой как с параллельной, так и с антипараллельной полярностью вихрей. Однако, режим существования стационарных связанных колебаний вихрей имеет

ограничения по току. Показано, что ниже первого критического тока существует затухающий режим колебаний вихрей. А выше второго критического тока для наностолбиков большого и среднего диаметра, после достижения вихрем в более толстом слое критической скорости, происходит динамическое переключение полярности этого вихря. Затем вихри с изменившейся полярностью переходят опять на стационарный режим с новой частотой и радиусом. Ранее было показано, что для случая СТНО большого диаметра – 400 нм и начального состояния в виде вихрей с одинаковой полярностью, в диапазоне величин плотностей тока от нуля до $j=14 \times 10^7$ А/см² наблюдались три режима связанной динамики вихрей (рисунок 6.1). При плотности тока менее $j=4,8 \times 10^7$ А/см² наблюдались затухающие колебания вихрей. После дальнейшего увеличения плотности тока выше $j=4,8 \times 10^7$ А/см² наблюдались стационарные связанные колебания вихрей с одинаковой полярностью. Также было показано, что для одиночного диска с увеличением величины тока могут возникать новые динамические эффекты. Для двухвихревого СТНО пока данный вопрос совсем не исследован. В данной работе теоретически, с помощью микромагнитного моделирования, исследуется влияние большого по величине спин-поляризованного тока на связанную динамику вихрей в СТНО большого диаметра – 400 нм, когда из-за геометрических ограничений магнитный вихрь не выходит за границы намагниченности диска.

6.2 Динамика вихрей одинаковой полярности

Рассмотрим наностолбик кругового сечения диаметром 400 нм. Он содержит три слоя: толстый магнитный слой из пермаллоя (толщина 15 нм), промежуточный немагнитный слой (толщина 10 нм) и тонкий магнитный слой из пермаллоя (толщина 4 нм). Магнитные параметры системы следующие: намагниченность насыщения $M_s=700$ Эрг/(Гс×см³) для толстого и $M_s=600$ Эрг/(Гс×см³) для тонкого слоя, обменная жёсткость $A=1.2 \times 10^{-6}$ Эрг/см для толстого, $A=1.12 \times 10^{-6}$ Эрг/см для тонкого слоя, параметр затухания Гильберта $\alpha=0.01$, гиромангнитное отношение $\gamma=2.0023$ (Э×с)⁻¹. Нелинейную динамику вектора намагниченности \mathbf{M} в магнитном слое будем описывать с помощью обобщённого уравнения Ландау-Лифшица. Оно содержит дополнительный вращательный момент, ответственный за взаимодействие тока с намагниченностью, и имеет вид:

$$\dot{\mathbf{M}} = -\gamma[\mathbf{M} \times \mathbf{H}_{\text{eff}}] + \frac{\alpha}{M_s}[\mathbf{M} \times \dot{\mathbf{M}}] + \vec{T}_{s.t.}$$

Эффективное поле \mathbf{H}_{eff} представляет собой сумму полей магнитостатического и обменного взаимодействий, классического магнитного поля Эрстеда, индуцированного током в проводнике, где γ - гиромангнитное отношение, α - параметр затухания, M_s –

намагниченность насыщения. $\vec{T}_{s,t}$ - дополнительный вращательный момент, линейно зависит от величины плотности тока и его поляризации, и имеет вид:

$$T_{s,t} = -\frac{\gamma_0 a_j}{M_s} \mathbf{M} \times [\mathbf{M} \times \mathbf{m}_{\text{ref}}] + \gamma b_j [\mathbf{M} \times \mathbf{m}_{\text{ref}}]$$

$$a_j = \frac{\hbar}{2|e|d} P \frac{1}{M_s} J_e, \quad b = \beta \alpha_j, \quad \beta \sim 0.05 - 0.2$$

где, \hbar - постоянная Планка; e - заряд электрона; d - толщина слоя; J_e - плотность тока; P - поляризация тока; \mathbf{m}_{ref} - единичный вектор вдоль намагниченности опорного слоя.

Для численного моделирования связанной динамики магнитных вихрей использован пакет программ для микромагнитного моделирования SpinPM. Он позволяет численно интегрировать обобщенное уравнение Ландау-Лифшица методом Рунге-Кутты четвертого порядка. Этот пакет оказался эффективным инструментом для численного исследования динамики связанных вихрей. Размер ячейки вычислительной сетки составляет $2 \times 2 \times 5 \text{ нм}^3$ для толстого слоя и $2 \times 2 \times 4 \text{ нм}^3$ для тонкого. При рассматриваемой толщине магнитных дисков считали, что намагниченность в каждой точке магнитного диска зависит только от X и Y . В начальный момент времени магнитные вихри существуют в каждом магнитном слое, и система находится в равновесии. Магнитные вихри с одинаковой полярностью будем называть П-вихрями, с разной полярностью будем называть АП-вихрями. Поляризация тока $P=0.1$.

Далее рассмотрим движение вихрей под влиянием больших чем $j=14 \times 10^7 \text{ А/см}^2$ величин плотности тока не рассмотренных ранее. Отметим, что увеличение тока вполне допустимо, т.к., во-первых: плотность тока при этом остается по порядку величины такой же, как и в рассмотренных ранее случаях; во-вторых: в литературе известны работы, где рассматривался ток до 100 мА. Также во многом результаты моделирования могут быть обобщены для случаев возбуждения вихрей беззарядовым спиновым током, когда нет ограничения на плотность электрического тока, текущего через туннельный барьер.

Численный эксперимент заключался в следующем. В начальный момент имеем два вихря одинаковой полярности и киральности. Затем включаем спин-поляризованный ток и изучаем связанную динамику вихрей. На рисунке 6.1 приведены траектории движения координат центров вихрей в толстом и тонком магнитных слоях при плотности тока $j=20 \times 10^7 \text{ А/см}^2$. Из рисунков видно, что вихрь выходит из центра (точка 1), и некоторое время движется по кривой. Далее вихрь начинает двигаться с ускорением по спирали против часовой стрелки и выходит на стационарную орбиту, где движение происходит с постоянным радиусом и частотой. Точки 1 (момент времени 0 нс) и 2 (момент времени 10 нс) соответствуют начальному и конечному положению вихря на диске. При данной величине тока режим П вихрей не меняется. Вихри располагаются при движении

практически друг под другом и радиусы их траекторий отличаются на единицы нанометров.

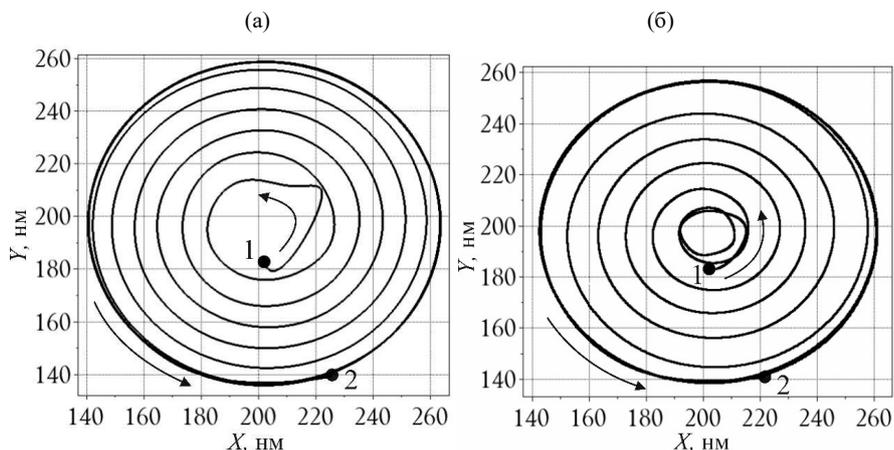


Рисунок 6.1 – Траектория движения центра вихря при плотности тока $j=20 \times 10^7$ А/см². (а) в толстом слое, (б) в тонком слое. Точки 1 и 2 соответствуют моментам времени 0 и 10 нс соответственно

Итак, численный счет показал, что при увеличении величины тока выше некоторого его критического значения, перестает наблюдаться динамическое переключение полярности вихря в толстом магнитном слое. Наблюдается же движение вихрей по круговым траекториям с одинаковым значением частоты. Более детальные расчеты показали, что существует целый диапазон токов от $j=18 \times 10^7$ А/см² до $j=25 \times 10^7$ А/см², где существует режим стационарных колебаний П вихрей. Отметим, что в данном случае, в отличие от случая режима П вихрей для малых токов, радиусы траекторий вихрей в толстом и тонком слое отличаются на единицы нанометров и уменьшаются с увеличением тока.

Время необходимое для выхода на стационарный режим для нашего случая примерно в восемь раз меньше, чем для случая режима П вихрей для малых токов. Кривая зависимости частоты стационарных колебаний вихрей от тока показывает линейное увеличение с увеличением величины тока и является естественным продолжением кривой, полученной для случая стационарного режима колебаний П-вихрей при малых величинах тока.

6.3 Динамика вихрей разной полярности

Далее рассмотрим движение вихрей при еще более высоких значениях плотности тока, ожидая динамическое переключение полярности вихря в одном из магнитных слоев и появления связанных вихрей разной полярности. Например, возьмем величину

плотности тока $j=26 \times 10^7$ А/см². Так же в начальный момент времени имеем вихри одинаковой полярности и киральности. Из рисунка 6.2а видно, что в толстом слое вихрь начинает движение из центра по спирали против часовой стрелки (точка 1). Далее, скорость его движения достигает величины критической скорости равной 384 м/с, после чего происходит динамическое переключение полярности вихря. На рисунке 6.2(а) видно, как вихрь останавливается, затем отклоняясь к центру диска меняет направление своего вращательного движения на противоположное в толстом слое находясь в точках 2 и 3 (рисунок 6.2а). После завершения процесса переключения полярности, вихрь движется уже по часовой стрелке, разгоняется, выходит на стационарную орбиту (рисунок 6.2б). На стационарной орбите вихрь движется с постоянным радиусом и частотой. Точка 4 на рисунке 6.2а,б соответствует моменту времени 15 нс.

Рассмотрим теперь траекторию центра вихря в тонком слое (рисунок 6.2в,г). Отметим, что временные точки на траекториях, сделанных для случая толстого и тонкого слоев, соответствуют одному и тому же времени. После включения тока вихрь так же начинает свое движение по винтовой траектории против часовой стрелки. Далее вихрь набирает максимальную скорость и выходит на стационарную орбиту, где движется с постоянной частотой и радиусом (рисунок 6.2в). Но, как только в толстом слое (в точках 2 и 3) происходит процесс переключения полярности вихря, в тонком слое вихрь двигаясь все еще против часовой стрелки заметно начинает отклоняться от своей стационарной траектории. В точке 3 вихрь в толстом слое начинает двигаться в противоположном направлении, в тонком слое в этот момент начинается процесс торможения вихря. При этом вихрь в тонком слое стремится вернуться в центр диска. В точке 6 (рисунок 6.2г) вихрь в тонком слое меняет свое направление вращения и, так же как вихрь в толстом слое начинает двигаться по часовой стрелке. Т.е. спустя 1,8 нс после переключения в толстом слое произошла смена направления движения и в тонком слое. Далее вихрь снова разгоняется и выходит на новую стационарную орбиту с новой частотой и радиусом.

Такой процесс образования стационарно движущихся АП-вихрей также наблюдается в некотором диапазоне величин токов. Расчет показывает, что частота стационарных колебаний АП-вихрей с увеличением величины тока практически линейно увеличивается, а радиус линейно уменьшается. В данном случае радиус движения вихря в тонком слое намного меньше, чем в толстом слое. Отметим, что угол наклона прямой зависимости частоты от тока к горизонтальной оси практически такой же, как и для случая П-вихрей. Эти зависимости являются естественным продолжением зависимостей, полученных для случая АП -вихрей при малых величинах тока.

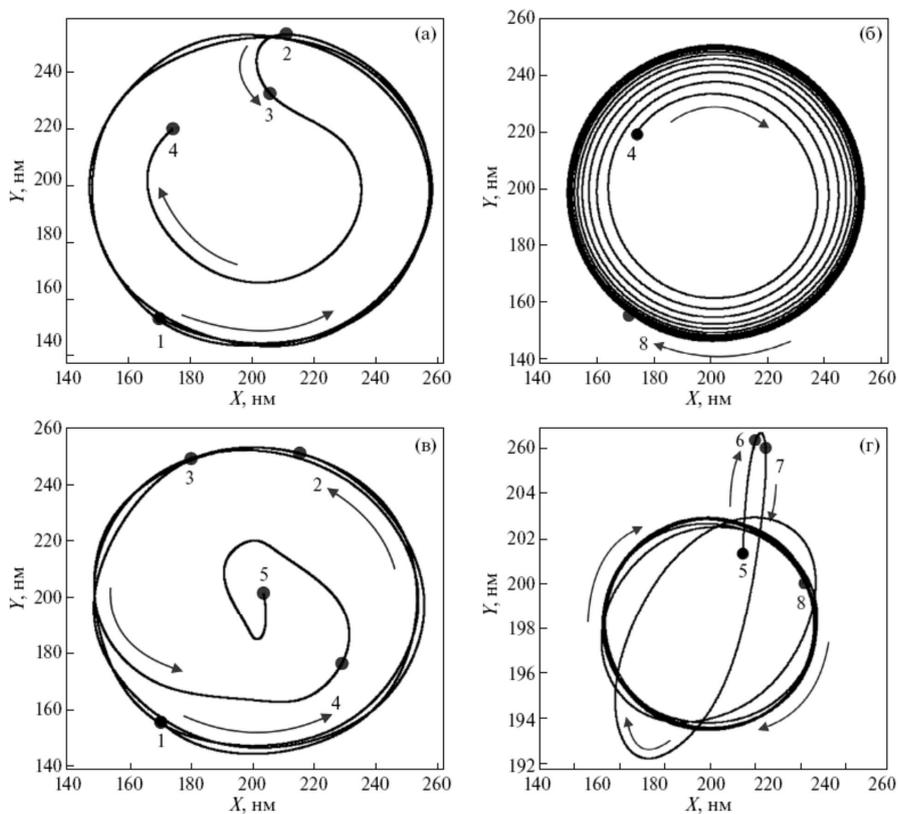


Рисунок 6.2 – Траектория движения вихря при плотности тока $j=26 \times 10^7 \text{ A/cm}^2$ в толстом (а,б) и тонком слоях(в,г). (а) точка 1 – 12 нс, точка 2 – 14,3 нс, точка 3 – 14,4 нс, точка 4 – 15 нс. Точки 2 и 3 соответствуют моменту переключения, (б) продолжение траектории вихря рис.2(а), здесь видно, как вихрь выходит на стационарный режим после переключения полярности. Точка 4 – 15 нс, точка 8 – 25 нс; в тонком слое (в,г) траектория движения вихря при плотности тока $j=26 \times 10^7 \text{ A/cm}^2$. Точка 1 – 12 нс, точка 2 – 14,3 нс, точка 3 – 14,4 нс, точка 4 – 15 нс, точка 5 – 16 нс, точка 6 – 16,1 нс, точка 7 – 16,2 нс, точка 8 - 25 нс

Был подробно рассмотрен процесс изменения структуры вихрей при динамическом переключении, который в нашем случае происходит аналогично уже описанному для случая малых токов для больших и малых диаметров СТНО. На рисунке 6.3 можно видеть трехмерное изображение, на котором видно изменение структуры вихря в толстом слое, сопровождаемое зарождением пары новый вихрь и антивихрь.

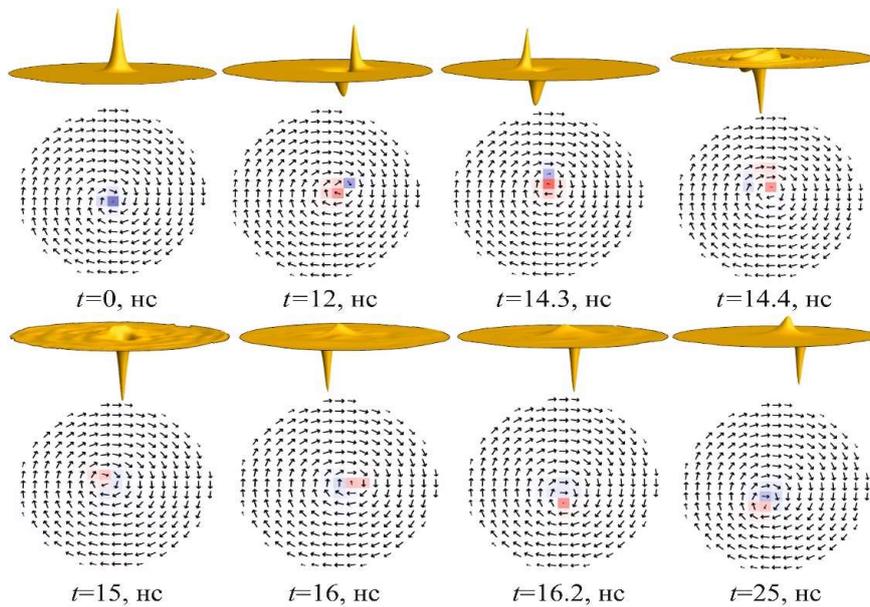


Рисунок 6.3 – Динамическое изменение структуры вихря в толстом слое, плотность тока $j=26 \times 10^7$ А/см². Времена соответствуют точкам на рисунке 6.2

В момент переключения старый вихрь аннигилирует с новым антивихрем и остается новый вихрь с противоположной полярностью. Переключение происходит с излучением спиновых волн. Далее видно, что по истечении некоторого времени, излучение заканчивается и новый вихрь выходит на новую стационарную орбиту с новым радиусом и частотой. В данном случае структура нового вихря более сложная, чем первоначальная. Она содержит «провал» намагниченности рядом с ядром вихря.

Отметим так же, что процесс переключения занимает примерно в два раза меньше времени, чем в случае малых токов.

На рисунке 6.4 изображены результаты трехмерного моделирования динамического изменения структуры вихря в тонком слое. Видно, что в момент аннигилирования пары вихрь-антивихрь в толстом слое, в тонком слое возбуждаются колебания спиновых волн. Так же, как и в толстом слое, спиновые волны исчезают с течением времени необходимого для выхода вихря на новую стационарную орбиту, с новой частотой и радиусом.

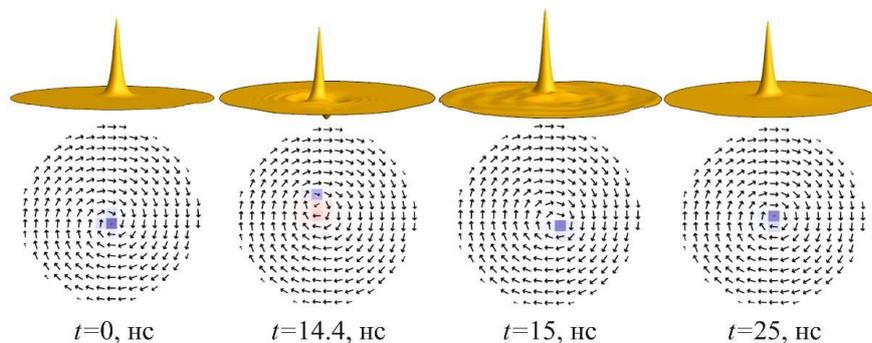


Рисунок 6.4 – Динамическое изменение структуры вихря в тонком слое, плотность тока 26×10^7 А/см². Времена соответствуют точкам на рисунке 6.2

6.4 Заключение

Исследовано динамическое изменение структуры вихрей. Показано, что образуется пара вихрей с противоположными полярностями, которая через некоторое время начинает двигаться по круговым траекториям с одинаковой частотой. Зависимость частоты связанных колебаний магнитных вихрей практически линейно увеличивается с увеличением величины тока как для случая вихрей с одинаковой, так и с разной полярностью. Зависимость радиусов окружностей, по которым движутся вихри в тонком и толстом магнитных слоях практически линейно уменьшаются с увеличением величины тока, как для случая вихрей с одинаковой, так и с разной полярностью.

Найденный эффект можно использовать для повышения рабочих частот СТНО. По результатам опубликована статья [A13].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В соответствии с планом, проводились исследования различных низкоразмерных сверхпроводящих, полимерных, и магнитных систем.

С целью визуализации путей переноса заряда по наноразмерным проводящим каналам применен метод проводящей атомно-силовой микроскопии. Были исследованы низкоразмерные структуры из субмикронных пленок ПДФ и отдельных полимерных наночастиц. Определены линейные размеры проводящих областей, величина и плотность тока. Установлено, что перенос заряда реализуется в соответствии с общей идеей о филаментации инжекционного тока по локальным каналам. Одновременное наблюдение мест протекания тока и надмолекулярной структуры полимера позволило использовать модель формирования проводящего интерфейса на границе полимер-диэлектрик для описания эффекта. Наблюдаемые данные важны для интерпретации результатов электрофизических измерений в субмикронных полимерных пленках и позволяют целенаправленно влиять на состав и надмолекулярную структуру полимера при изучении свойств резистивного переключения.

Также была разработана технология изготовления планарных трехэлектродных образцов в конфигурации полевого транзистора со сверхпроводящими электродами и двуслойным полимером. Проведены исследования характеристик полевого транзистора. Установлено, что основным носителем заряда в двумерной области, разделяющей полимерные пленки, являются электроны. На основе результатов полевой подвижности и эффективной подвижности носителей заряда в рамках инжекционной модели выявлено, что транспорт носителей заряда преимущественно происходит вдоль интерфейса (границы раздела) двух полимерных пленок. Проведенные испытания полевого транзистора со сверхпроводящими электродами будут в дальнейшем использованы при подготовке заявки на патентование.

В работе в широком температурном диапазоне экспериментально исследовались $R(T)$ и $V-I$ характеристики тонкопленочных слоистых структур сверхпроводник – полидифениленфталид – сверхпроводник. В качестве сверхпроводящих материалов использовались свинец и индий. При температурах ниже соответствующих критических температур наблюдаются особенности, которые могут быть объяснены эффектом наведенной сверхпроводимости в тонкой пленке проводящего полимера, заключенного между двумя массивными сверхпроводниками. С большой степенью вероятности можно исключить наличие тривиальных металлических закороток сквозь толщу полимера. Характер зависимостей критического тока от температуры отличается от типичной для классических сверхпроводников.

Обнаруженные закономерности представляют существенный фундаментальный интерес для физики низкоразмерной сверхпроводимости, физического материаловедения и требуют продолжения исследований.

Была разработана модель для расчета квантового размерного эффекта в тонких алюминиевых пленках и его влияния на сверхпроводящий переход. Численный расчет был с достаточно высокой точностью совпадает с экспериментальными данными.

Проведен расчет диссипации при проникновении абрикосовских вихрей в такие сверхпроводящие пленки.

Также разработан метод для расчета наведенной намагниченности в тонкой сверхпроводящей пленке при эффекте близости с сильным ферромагнетиком, проявляющихся при различных температурах. Обнаружено немонотонное поведение намагниченности по толщине сверхпроводящего слоя.

В работе был исследован сверхпроводниковый диодный эффект в гибридной структуре сверхпроводник / ферромагнетик (S/F) на поверхности топологического изолятора (ТИ). В таких структурах благодаря наличию сильного спин-орбитального и обменного взаимодействий может возникать невзаимность сверхтока. Данное свойство позволяет сконструировать сверхпроводниковый диод. В работе также показано, что использование двух структур S/F на поверхности ТИ может приводить к значительному увеличению эффективности диодного эффекта при условии, что ферромагнитные обменные поля двух областей ориентированы в противоположных направлениях.

Установлено, что предложенный нами подход позволяет выращивать наноструктурированные пленки с заданной морфологией поверхности, а также, отдельные нанокристаллиты высокого качества с высокой степенью гомогенности по элементному составу. Это, в свою очередь, позволит создавать высокочистые материалы для элементной базы датчиков инфракрасного и терагерцового спектра, где необходимые структурные и спектральные характеристики будут получены путем относительно простого и экономически целесообразного химического синтеза.

Были исследованы полевые зависимости намагниченности Gd_2BaNiO_5 в импульсном магнитном поле до 300 Тл, полученном сжатием взрывного потока. Обнаружено, что намагниченность подсистемы Gd быстро насыщается при $\sim 14 \mu V/f.u.$ За этим следует дальнейшее увеличение намагниченности в критическом поле $H_{C1} = 90 \pm 20$ Тл, где халдейновская щель закрывается.

Были проведены теоретические расчеты методом классического и квантового Монте-Карло, которые показали, что H_{C1} сильно подвержено влиянию шахматного поля спинов Gd, что эффективно увеличивает халдейновскую щель за счет обменного

взаимодействия. Полное насыщение намагниченности подсистем Gd и Ni ожидается в критическом поле $H_{C2} \sim 800$ Тл. Расчеты позволили описать экспериментальную полевую зависимость намагниченности и оценить параметры обменного взаимодействия никелевой и гадолиниевой подсистем.

С помощью численных методов исследовано влияние большого по величине спин-поляризованного тока на связанную динамику магнитных вихрей в спин-трансферных наноосцилляторах большого диаметра 400 нм. Обнаружено, что при увеличении величины тока выше некоторого его критического значения, не рассмотренного ранее, перестает наблюдаться динамическое переключение полярности вихря в толстом магнитном слое, а наблюдается стационарное связанное движение вихрей одинаковой полярности по круговым траекториям с одинаковым значением частоты. При дальнейшем увеличении величины тока, выше некоторого его критического значения наблюдается динамическое переключение полярности вихря в толстом магнитном слое, образование пары вихрей разной полярности и их стационарное связанное движение по круговым траекториям с одинаковым значением частоты.

Все результаты исследований были получены впервые.

Поставленные задачи выполнены полностью. Исследования проведены на международном научном уровне, что подтверждается высоким статусом публикаций.

По результатам работ опубликованы или приняты в печать в 2024 г 22 научных работ. Из них 5 статей в сборниках трудов, индексируемых в РИНЦ и 6 статей в периодических изданиях, индексируемых в РИНЦ, из них 3 статьи в журналах, индексируемых в международных базах данных Wos и Scopus, сделано 11 докладов на международных и российских конференциях.

Кроме этого, по проекту проведены 4 совместных научных мероприятия и 1 стажировка.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Paul F., Paul S. To be or not to be—review of electrical bistability mechanisms in polymer memory devices// *Small*. – 2022. – Vol. 18, № 21. – P. 2106442.
2. Лачинов А. Н., Воробьева Н. В. Электроника тонких слоев широкозонных полимеров// *Успехи физических наук*. – 2006. – Т. 176, № 12. – С. 1249-1266.
3. Корнилов В.М., Лачинов А.Н., Карамов Д.Д., Набиуллин, И.Р., Кульвелис Ю.В. Надмолекулярная структура тонких пленок электроактивного полимера// *Физика твердого тела*. – 2016. – Т. 58, № 5. – С. 1030-1035.
4. Lachinov A.N., Kornilov V.M., Zagurenko T.G., Zherebov A.Yu. On the high conductivity of nonconjugated polymers// *ЖЭТФ*. – 2006. – Vol. 102, № 4. – P. 640-645.
5. Lachinov A.N., Tameev A.R., Yusupov A.R., Vannikov A.V. Effect of interface in bilayer polydiphenyleneophthalide film on electron transport// *Russ. J. Electrochem.* – 2012. – Vol. 48, № 3. – P. 316-319.
6. Kornilov V. M., Lachinov A. N. Electrical conductivity in the metal-polymer-metal system: The role of boundary conditions// *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. – 1997. – Vol. 84. – P. 833-838.
7. Скалдин О. А., Жеребцов А. Ю., Лачинов А. Н., Чувывров А. Н., Делев В. А. Зарядовая неустойчивость в тонких пленках органических полупроводников// *Письма в ЖЭТФ*. – 1990. – Т. 51, № 3. – С. 141-144.
8. Арутюнов К.Ю., Беляев К.А., Артемов В.В., Васильев А.Л., Юсупов А.Р., Карамов Д.Д., Лачинов А.Н. Транспортные свойства слоистых гетероструктур на базе проводящего полимера// *ФТТ*. – 2023. – Т. 65, № 1. – С. 151-156.
9. Arutyunov K.Yu., Gurski.A.S., Artemov V.V., Vasiliev A.L., Yusupov A.R., Karamov D.D., Lachinov A.N. Induced electric conductivity in organic polymers// *Beilstein J. Nanotechnol.* – 2022. – Vol. 13. – P. 1551–1557.
10. Арутюнов К.Ю., Гурский А.С., Монахова С.Д., Панарина П.В., Позднякова Е.Ф., Цой Д.Э., Юсупов А.Р., Карамов Д.Д., Лачинов А.Н. Низкотемпературный электронный транспорт в гибридных тонкопленочных наноструктурах на базе электропроводящего полимера// *Известия уфимского научного центра РАН*. – 2023. – № 1. – С. 42–48.
11. Zavyalov V.V., Chernyaev S.A., Shein K.V., Shukaleva A.G., Arutyunov K.Yu. Examination of cryogenic filters for multistage RF filtering in ultralow temperature experiments// *Journal of Physics: Conference series*. – 2017. – Vol. 969. – P. 012086-012089.
12. Wolf M.J. et al. Spin-polarized quasiparticle transport in exchange-split superconducting aluminum on europium sulfide// *Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys.* –

2014. – Vol. 90, № 14. – P. 144509.

13. Kolenda S. et al. Thermoelectric effects in superconductor-ferromagnet tunnel junctions on europium sulfide// *Phys. Rev. B. American Physical Society.* – 2017. – Vol. 95, № 22. – P. 224505.

14. Bergeret F.S., Volkov A.F., Efetov K.B. Induced ferromagnetism due to superconductivity in superconductor–ferromagnet structures// *Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys.* – 2004. – Vol. 69, № 17. – P. 174504.

15. Yagovtsev V.O., Pugach N.G., Eschrig M. The inverse proximity effect in strong ferromagnet–superconductor structures// *Supercond. Sci. Technol.* – 2021. – Vol. 34, № 2. – P. 025003.

16. Яговцев В.О. et al. Намагниченность в бислоях сверхпроводник–ферромагнитный металл, вызванная обратным эффектом близости// *Физика металлов и металловедение.* – 2021. – Vol. 122, № 9. – P. 908–916.

17. Ouassou J.A. et al. Triplet Cooper pairs induced in diffusive s-wave superconductors interfaced with strongly spin-polarized magnetic insulators or half-metallic ferromagnets// *Sci. Rep.* – 2017. – Vol. 7, № 1. – P. 1932.

18. Eschrig M. et al. General boundary conditions for quasiclassical theory of superconductivity in the diffusive limit: Application to strongly spin-polarized systems// *New J. Phys.* – 2015. – Vol. 17, № 8. – P. 083037.

19. Nadeem M., Fuhrer M. S., and Wang X. The superconducting diode effect// *Nature Reviews Physics.* – 2023. – Vol. 5. – P. 558-577.

20. Soloviev I. I., Klenov N. V., Bakurskiy S. V., Kupriyanov M. Y., Gudkov A. L., and Sidorenko A. S. Beyond Moore’s technologies: operation principles of a superconductor alternative// *Beilstein Journal of Nanotechnology.* – 2017. – Vol. 8. – P. 2689-2710.

21. Linder J., Robinson J. W. Superconducting spintronics// *Nature Physics.* – 2014. – Vol. 11. – P. 307-315.

22. Eschrig M. Spin-polarized supercurrents for spintronics: a review of current progress// *Reports on Progress in Physics.* – 2015. – Vol. 78. – P. 104501.

23. Golod T., Krasnov V. M. Demonstration of a superconducting diode-with-memory, operational at zero magnetic field with switchable nonreciprocity// *Nature Communications.* – 2022. – Vol. 13. – P. 3658.

24. Wu H., Wang Y., Xu Y., Sivakumar P. K., Pasco C., Filippozzi U., Parkin S. S. P., Zeng Y.-J., McQueen T., and Ali M. N. The field-free Josephson diode in a van der Waals heterostructure// *Nature.* – 2022. – Vol. 604. – P. 653-656.

25. Ando F., Miyasaka Y., Li T., Ishizuka J., Arakawa T., Shiota Y., Moriyama T.,

Yanase Y., and Ono T. Observation of superconducting diode effect// *Nature*. – 2020. – Vol. 584. – P. 373-376.

26. Narita H., Ishizuka J., Kawarazaki R., Kan D., Shiota Y., Moriyama T., Shimakawa Y., Ognév A. V., Samardak A. S., Yanase Y., and Ono T. Field-free superconducting diode effect in noncentrosymmetric superconductor/ferromagnet multilayer// *Nature Nanotechnology*. – 2022. – Vol. 17. – P. 823.

27. Suri D., Kamra A., Meier T. N., Kronseder M., Belzig W., Back C. H., and Strunk C. Non-reciprocity of Vortex-limited Critical Current in Conventional Superconducting Micro-bridges// *Applied Physics Letters*. – 2022. – Vol. 121. – P. 102601.

28. Lyu Y.-Y., Jiang J., Wang Y.-L., Xiao Z.-L., Dong S., Chen Q.-H., Milošević M. Milorad., Wang H., Divan R., Pearson J.E., Wu P., Peeters F.M. and Kwok W.-K. Superconducting diode effect via conformal-mapped nanoholes// *Nature communications*. – 2021. – Vol. 12, № 3. – P. 2703.

29. Scammell H. D., Li J. I. A., and Scheurer M. S. Theory of zero-field superconducting diode effect in twisted trilayer graphene// *2D Materials*. – 2022. – Vol. 9. – P. 025027.

30. Devizorova Z., Putilov A. V., Chaykin I., Mironov S., and Buzdin A. I. Phase transitions in superconductor/ferromagnet bilayer driven by spontaneous supercurrents// *Physical Review B*. – 2021. – Vol. 103. – P. 064504.

31. Grein R., Eschrig M., Metalidis G. and Schon G. Spin-Dependent Cooper Pair Phase and Pure Spin Supercurrents in Strongly Polarized Ferromagnets// *Physical Review Letters*. – 2009. – Vol. 102. – P. 227005.

32. He J. J., Tanaka Y. and Nagaosa N. The supercurrent diode effect and nonreciprocal paraconductivity due to the chiral structure of nanotubes// *Nature Communications*. – 2023. – Vol. 14. – P. 3330.

33. Picoli T., Blood Z., Lyanda-Geller Y. and Vayrynen J. I. Superconducting diode effect in quasi-one-dimensional systems// *Physical Review B*. – 2023. – Vol. 107. – P. 224518.

34. Fominov Y. V. and Mikhailov D. S. Asymmetric higher-harmonic SQUID as a Josephson diode// *Physical Review B*. – 2022. – Vol. 106. – P. 134514.

35. Roig M., Kotetes P. and Andersen B. M. Superconducting diodes from magnetization gradients// *Physical Review B*. – 2024. – Vol. 109. – P. 144503.

36. Haldane F.D.M. Nonlinear field theory of large-spin Heisenberg antiferromagnets: semiclassically quantized solitons of the one-dimensional easy-axis Néel state// *Phys. Rev. Lett.* – 1983. – Vol. 50. – P. 1153-1156.

37. Darriet J., Regnault L.P. The compound Y2BaNiO5: A new example of a Haldane gap in a $S = 1$ magnetic chain// *Solid State Commun.* – 1993. – Vol. 86. – P. 409-412.

38. Yokoo T., Zheludev Z., Nakamura M., and Akimitsu J. Ni-chain gap excitations in $(\text{Nd}_x\text{Y}_{1-x})_2\text{BaNiO}_5$: One-dimensional to three-dimensional crossover// *Phys. Rev. B.* – 1997. – Vol. 55. – P. 11516-11520.
39. E. A. Popova, R. Klingeler, N. Tristan, B. Buchner, and A. N. Vasiliev, Thermodynamic studies on single-crystalline $\text{Gd}_2\text{BaNiO}_5$ // *Phys. Rev. B* – 2012. – Vol. 85. – P.174402.
40. T. Yokoo, S. Raymond, A. Zheludev, S. Maslov, E. Ressouche, I. Zaliznyak, R. Erwin, M. Nakamura, and J. Akimitsu Magnetic ordering, spin waves, and Haldane-gap excitations in $(\text{Nd}_x\text{Y}_{1-x})_2\text{BaNiO}_5$ linear-chain mixed-spin antiferromagnets// *Phys. Rev. B* – 1998. – Vol. 58. – P. 14424.
41. Slonczewski J.C., Current-driven excitation of magnetic multilayers// *Journal of Magnetic Materials.* – 1996. – Vol. 159. – L1-L7.
42. Berger L., Emission of spin waves by a magnetic multilayer traversed by a current// *Physical Review.* – 1996. – Vol. 54. – P. 9353.
43. Tsoi M., Jansen A. G. M., Bass J., Chiang W.-C., Seck M., Tsoi V., and Wyder P., Excitation of a Magnetic Multilayer by an Electric Current// *Physical Review Letters.* – 1998. – Vol. 80. – P. 4281.
44. Kiselev, S., Sankey, J., Krivorotov, I. et al., Microwave oscillations of a nano-magnet driven by a spin-polarized current// *Nature.* – 2003.– Vol. 425. – P. 380-383.
45. Grollier J., Boulenc P., Cros V., Hamzić A., Vaurès A., Fert A., Faini G., Switching a spin valve back and forth by current-induced domain wall motion// *Applied Physics Letters.* – 2003. – Vol. 83, № 3. – P. 509-511.

ПРИЛОЖЕНИЕ А. Публикации по проекту

Добавлено примечание ([A1]): Нумерация A1, A2,...

A1. Karabassov T., Bobkova I.V., Silkin V.M., Lvov B.G., Golubov A.A. and Vasenko A.S. Phase diagrams of the diode effect in superconducting heterostructures// Physica Scripta. – 2024. – Vol. 99. – P. 015010.

A2. Галиев А.Ф., Карамов Д.Д., Каримов В.Р., Ишмухаметов М.С., Буланкин Н.С. Размерные эффекты в субмикронных пленках полиарилефталидов// Межвузовская научно-техническая конференция студентов, аспирантов и молодых специалистов имени Е.В. Арменского. Материалы конференции. – М., МИЭМ НИУ ВШЭ. – 2024. – С. 206-207.

A3. Kornilov V. M., Lachinov A. N., Yusupov A. R. Visualization of Conducting Channels in Polymer Layers by Atomic Force Microscopy with a Conducting Probe// Technical Physics. – 2024. – Vol. 69, №. 4. – P. 906-911.

A4. Корнилов В.М., Карамов Д.Д., Кохов А.Ю., Квашнина Е.О., Ильин И.П., Исламгулов А.Р. Получение и исследование полимерных наночастиц// Известия Уфимского научного центра РАН. – 2024. – № 1. – С. 41-48.

A5. Арутюнов К.Ю., Смазнова Х.Т., Завьялов В.В., Юсупов А.Р., Галиев А.Ф., Лачинов А.Н. Электрическая проводимость слоистых структур индий-полидифениленфталид-индий при низких температурах// Известия уфимского научного центра РАН. – 2024. – №1. – С. 79–84.

A6. Арутюнов К.Ю., Завьялов В.В., Смазнова Х.Т., Юсупов А.Р., Карамов Д.Д., Лачинов А.Н. Приглашенный доклад «Наведенная сверхпроводимость в электроактивном полимере»// XXI Конференция «Сильно коррелированные электронные системы и квантовые критические явления» 23 мая 2024, ФИАН, Москва.

A7. Смазнова Х.Т., Арутюнов К.Ю., Завьялов В. В., А. Р. Юсупов, Д. Д. Карамов, А. Н. Лачинов. Электрическая проводимость слоистых структур индий-полидифениленфталид-индий при низких температурах// Труды межвузовской научно-технической конференции студентов, аспирантов и молодых специалистов им. Е. В. Арменского, Москва, апрель 2024.

A8. Арутюнов К. Ю., Завьялов В. В., Лачинов А. Н., Карамов Д. Д., Юсупов А. Р. Электронные транспортные характеристики гетероструктур сверхпроводник-полидифениленфталид-сверхпроводник// XV Международная школа-конференция студентов, аспирантов и молодых ученых, посвященная 300-летию Российской академии наук. Тезисы докладов. –Уфа. – 2024 (6–9 октября). – С. 124-125.

A9. Безмянных Д. Г., Пугач Н. Г., Седов Е. А., Арутюнов К. Ю., Екомасов Е. Г., Львов Б. Г. Квантовый размерный эффект в чистых пленках алюминия// Известия Уфимского научного центра РАН. – 2024. – № 1. – С. 55-60.

А10. Безымянных Д.Г., Пугач Н.Г., Седов Е.Г., Арутюнов К.Ю. Исследование влияния квантово-размерного эффекта на сверхпроводящий переход в тонких пленках алюминия// Межвузовская научно-техническая конференция студентов, аспирантов и молодых специалистов имени Е.В. Арменского. Материалы конференции. – М., МИЭМ НИУ ВШЭ. – 2024. – С. 214-215.

А11. Безымянных Д.Г., Пугач Н.Г., Седов Е.А., Арутюнов К.Ю. Квантовый размерный эффект в тонких сверхпроводящих пленках алюминия// III Всероссийская Молодежная школа-конференция «Современные физика, математика, цифровые и нанотехнологии в науке и образовании» (ФМЦН-24). Сборник тезисов. – Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы. – Уфа. – 2024. – С. 45.

А12. Пашковская В.Д. Моделирование сверхпроводящих тонких пленок с использованием нестационарных уравнений гинзбурга-ландау с помощью переменных связи// Межвузовская научно-техническая конференция студентов, аспирантов и молодых специалистов имени Е.В. Арменского. Материалы конференции. – М., МИЭМ НИУ ВШЭ. – 2024. – С. 225-227.

А13. Антонов Г.И., Екомасов Е.Г., Звездин К.А., Пугач Н.Г. Новый стационарный режим связанных колебаний вихрей в трехслойном спин-трансферном наноосцилляторе при больших значениях токов// Физика металлов и металловедение. – 2024. – Т. 125, № 1. – С. 40-47.

А14. Милютин Д.П., Безымянных Д.Г. (научный руководитель Пугач Н.Г.) Влияние спинового рассеяния на гетероструктуры сверхпроводник-ферромагнетик// III Всероссийская Молодежная школа-конференция «Современные физика, математика, цифровые и нанотехнологии в науке и образовании» (ФМЦН-24). Сборник тезисов. – Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы. – Уфа. – 2024. – С. 74.

А15. Лекомцев Н.В., Пугач Н.Г. Управляемый эффект близости в структуре сверхпроводник-геликоидальный магнетик// Межвузовская научно-техническая конференция студентов, аспирантов и молодых специалистов имени Е.В. Арменского. Материалы конференции. – М., МИЭМ НИУ ВШЭ. – 2024. – С. 216-218.

А16. Пугач Н.Г., Селезнев Д.В., Туркин Я.В., Екомасов Е.Г. Триплетная сверхпроводимость в синглетных сверхпроводниках// III Всероссийская Молодежная школа-конференция «Современные физика, математика, цифровые и нанотехнологии в науке и образовании» (ФМЦН-24). Сборник тезисов. – Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы. – Уфа. – 2024. – С. 87

A17. Милютин Д.П., Безмянных Д.Г., Пугач Н.Г. Поведение функций Грина в гетероструктуре сверхпроводник-ферромагнетик при наличии спинового рассеяния // XV Международная школа-конференция студентов, аспирантов и молодых ученых, посвященная 300-летию Российской академии наук. Тезисы докладов. –Уфа. – 2024 (6–9 октября). – С. 138.

A18. Пашковская В.Д., Васенко А.С., Сарайва Т.Т. Исследование эффектов диссипации в сверхпроводниковых тонких плёнках вблизи точки богомольного// III Всероссийская Молодежная школа-конференция «Современные физика, математика, цифровые и нанотехнологии в науке и образовании» (ФМЦН-24). Сборник тезисов. – Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы. – Уфа. – 2024. – С. 82-85.

A19. Ихсанов Р.Ш., Карцев А.И. Нанокристаллические пленки PbS, легированные Cd: расчеты свойств и эксперимент// III Всероссийская Молодежная школа-конференция «Современные физика, математика, цифровые и нанотехнологии в науке и образовании» (ФМЦН-24). Сборник тезисов. – Башкирский государственный педагогический университет им. М. Акмуллы. – Уфа. – 2024.

A20. Ихсанов Р.Ш., Усков А.В., Сметанин И.В., Проценко И.Е. Влияние таммовских уровней на характеристики объемного фотоэффекта в структурах металл-полупроводник// XV Международная школа-конференция студентов, аспирантов и молодых ученых, посвященная 300-летию Российской академии наук. Тезисы докладов. – Уфа. – 2024 (6–9 октября). – С. 256

A21. Пугач Н.Г., Туркин Я.В., Лекомцев Н.В., Селезнев Д.В. Обратный эффект близости в статически и динамически неколлинеарных магнитных гетероструктурах со сверхпроводниками// Труды XXVIII Международного симпозиума «Нанофизика и наноэлектроника». – Нижний Новгород. – 2024 (11–15 марта). – Т. 2 – С. 1030с.

A22. Пугач Н.Г., Лекомцев Н.В., Львов Б.Г., Екомасов Е.Г. Наноэлектроника на сверхпроводниках — челлендж или альтернатива// Научная конференция «ЭКБ и микроэлектронные модули». Российский форум «Микроэлектроника 2024». Тезисы докладов. – Сочи. Университет «Сириус». – 2024 (16–25 сентября). – С.15-16.