

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ СТРОЕНИЯ И СВОЙСТВ МОНОСЛОЯ НИТРИДА ВАНАДИЯ(111) НА ПОВЕРХНОСТИ ОКСИДА МАГНИЯ(111)

Куклин А.В.

научный руководитель канд. физ.–мат. наук Кузубов А.А.

Сибирский федеральный университет

Исследования спинзависимого транспорта в твердом теле важны с научной точки зрения и направлены на разработку новых методов активного управления спинами электронов и создание эффективно работающих элементов спинтроники. При поиске материалов для спинтроники существует необходимость создания этих материалов на основе полупроводников, так как только в этом случае возможны одновременное управление спиновым и зарядовым транспортом. В настоящее время наибольший интерес представляют системы типа «металл-полупроводник» из-за возможности появления в них отдельной спиновой проводимости. Подобными свойствами могут обладать соединения переходных металлов.

Переходные металлы образуют нитриды с преимущественной металлической связью. Эти вещества обладают значительной твердостью, высокой электропроводностью, высокими температурами плавления, большой энтальпией образования. Одним из них является VN. До температуры 2620 К он имеет кубическую модификацию (структурный тип NaCl). Известно, что VN обладает металлической проводимостью. Плёнки VN получают, используя в качестве субстрата MgO или Pt. Постоянная решетки MgO на 2% больше VN, что позволяет вырастить плёнку без существенных дефектов. К тому же, обе кристаллические решетки в направлении (111) представляют ячейку с гексагональной укладкой.

Таким образом, подобрав необходимые условия, можно было бы синтезировать монослой нитрида ванадия на подходящей подложке MgO, который обладал бы свойством разбавленного магнитного проводника. В связи с этим есть необходимость теоретического исследования возможности существования данного свойства и геометрических особенностей равновесного состояния в структуре $(111)_{VN}|| (111)_{MgO}$.

Расчеты были выполнены с помощью программного пакета VASP в рамках теории функционала плотности с помощью обменно-корреляционного потенциала PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof). Число k -точек в первой зоне Бриллюэна было выбрано на основе сетки, полученной с помощью метода Монхорста – Пака, $6 \times 6 \times 1$. Энергия обрезания была равна 400 eV. Оптимизация велась до тех пор, пока разница по энергии между соседними геометриями одной структуры составит менее 0,0001 eV.

На первом этапе, на основе рассчитанной равновесной геометрии элементарной ячейки, были смоделированы и оптимизированы монослой $(111)_{VN}$ и пластина $(111)_{MgO}$. Рассчитывалось разное количество слоев пластины. При этом вычислялась энергия поверхности. Была рассмотрена зависимость изменения энергии поверхности от числа слоёв. При изменении числа слоёв от 9 к 10, разница в энергии поверхности составила менее 0,01 эВ/Å², что говорит о достаточном количестве атомных слоев в пластине, необходимых для адекватного описания подложки.

Энергия связи между монослоем и поверхностью рассчитывалась по формуле:

$$E = E_{VN/MgO} - (E_{MgO} + E_{VN}), \quad (1)$$

где $E_{VN/MgO}$ – полная энергия структуры, E_{MgO} – энергия пластины MgO, E_{VN} – энергия монослоя VN.

Для оценки проводящих свойств рассчитаны плотности состояний, а также зонная структура монослоя $(111)_{\text{VN}}$. Для построения зонной структуры, вдоль каждого направления обратное пространство разбивалось на 20 промежуточных k -точек.

Из расчетов видно, что монослой $(111)_{\text{VN}}$ обладает свойствами разбавленного магнитного полупроводника (рисунок 2), так как в плотности состояний для электронов со спином α наблюдается ненулевая плотность, а для электронов со спином β – нулевая. Но в реальности его необходимо синтезировать на какой-то подложке. Поэтому следует проверить влияние подложки на структуру в целом.

Система $(111)_{\text{VN}}|| (111)_{\text{MgO}}$ рассчитывалась с 6 различными расположениями монослоя VN (top, hcp и fcc) относительно подложки MgO (рисунок 1).

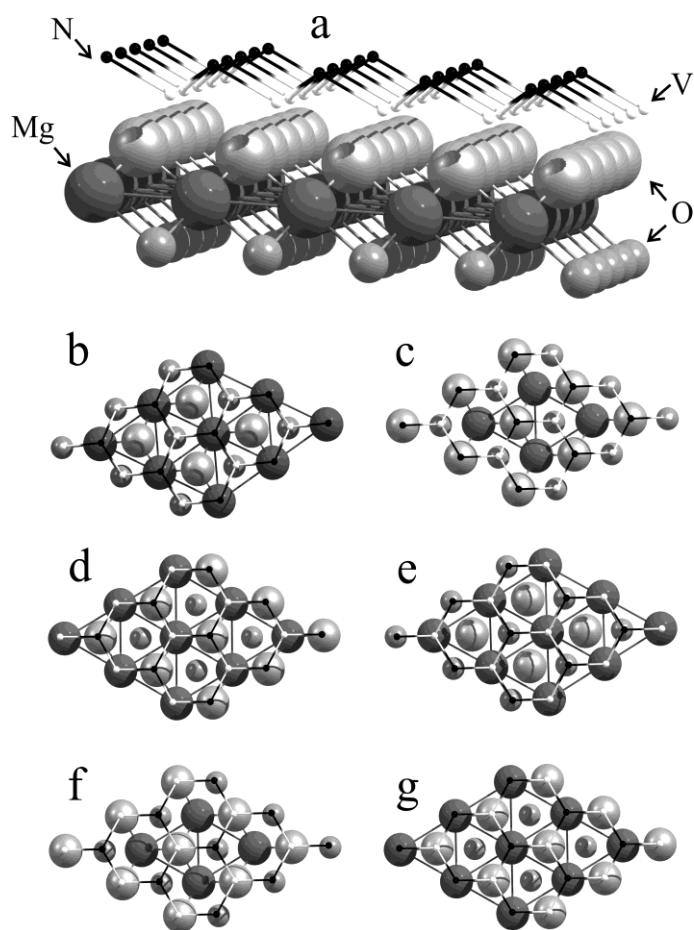


Рисунок 1 - Расположение монослоя VN относительно подложки MgO с O-завершённой поверхностью: а) общий вид структуры; б) положение $N_{\text{hcp}}-V_{\text{fcc}}$; в) положение $N_{\text{top}}-V_{\text{fcc}}$; д) положение $N_{\text{top}}-V_{\text{hcp}}$; е) положение $N_{\text{fcc}}-V_{\text{hcp}}$; ф) положение $V_{\text{top}}-N_{\text{fcc}}$; г) положение $V_{\text{top}}-N_{\text{hcp}}$

Монослой располагался поочередно с обеих сторон. С одной стороны подложка заканчивалась атомами магния, с другой - кислорода. Так для поверхности, заканчивающейся атомами кислорода (рисунок 1): положение top, означает расположение ванадия или азота над первым слоем кислорода, hcp – над вторым слоем с атомами магния, fcc – над третьим слоем с атомами кислорода. Для поверхности, заканчивающейся атомами магния: top - над магнием, hcp - над кислородом, fcc – над третьим слоем, состоящим из атомов магния соответственно. В таблице 1 приведены энергии связи монослоя VN с поверхностью MgO, а также средняя величина выхода атомов азота и ванадия из плоскости монослоя.

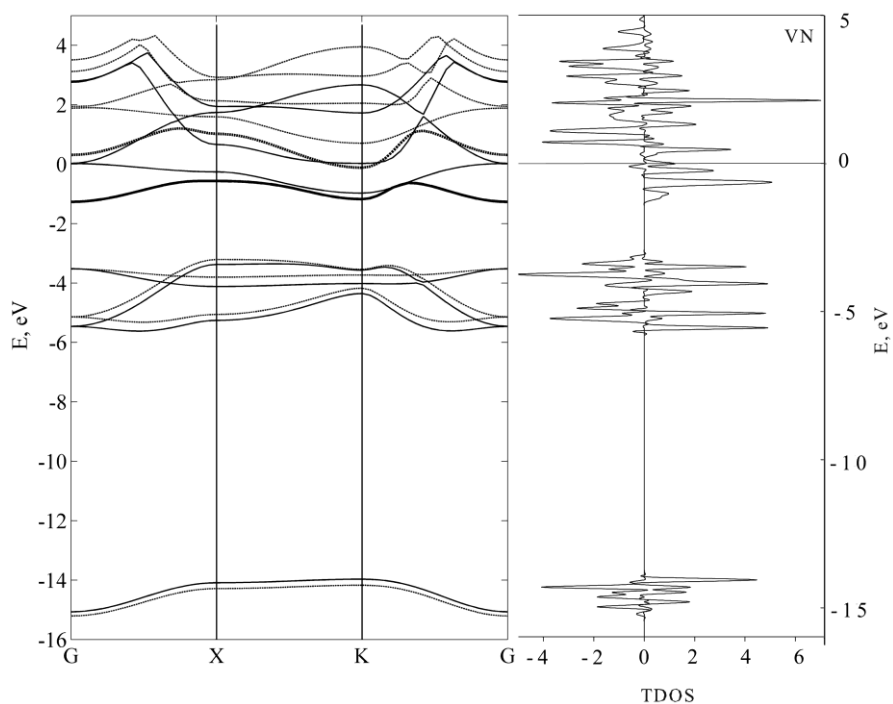


Рисунок 2 - Зонная структура и плотности состояний монослоя (111)_{VN}

Таблица 1. Энергии связи монослоя(111)_{VN} с поверхностью (111)_{MgO} и средняя величина выхода атомов V и N из плоскости монослоя

	E, eV	σ , Å
Поверхность, заканчивающаяся атомами магния		
$N_{top}-V_{hcp}$	-0,8979	0,339
$N_{top}-V_{fcc}$	0,0419	0,103
$V_{top}-N_{hcp}$	0,5801	0,119
$V_{top}-N_{fcc}$	0,6304	0,109
$N_{hcp}-V_{fcc}$	0,1075	0,104
$N_{fcc}-V_{hcp}$	0,5157	0,108
Поверхность, заканчивающаяся атомами кислорода		
$N_{top}-V_{hcp}$	0,7383	0,157
$N_{top}-V_{fcc}$	0,1016	0,157
$V_{top}-N_{hcp}$	-3,4329	0,358
$V_{top}-N_{fcc}$	-4,1295	0,360
$N_{hcp}-V_{fcc}$	-4,0746	0,380
$N_{fcc}-V_{hcp}$	-3,6547	0,379

Исходя из данных таблицы, можно сделать вывод, что наиболее стабильным является расположение над поверхностью, заканчивающейся атомами кислорода. При этом наиболее выгодно, когда атом V расположен непосредственно над O (конфигурация $V_{top}-N_{fcc}$). В результате образуется химическая связь V-O (1,8 Å). Характерным для всех структур является то, что атом азота должен быть достаточно далеко удален от кислорода из-за частичного отрицательного заряда на обоих атомах. Стоит отметить, что при выращивании тонких плёнок VN, их структура будет стремиться принять форму поверхности подложки, об этом свидетельствует средняя величина выхода атомов из плоскости монослоя после DFT оптимизации, приведённые в таблице 1. В реальных условиях поверхность MgO должна быть насыщена кислородом воздуха, что благоприятствует осуществлению выращивания плёнки VN.

Для оценки проводящих свойств были рассчитаны полные плотности состояний структуры монослой(111)_{VN}|| (111)_{MgO}, а также составляющих данной структуры по отдельности (монослоя VN и пластины MgO).

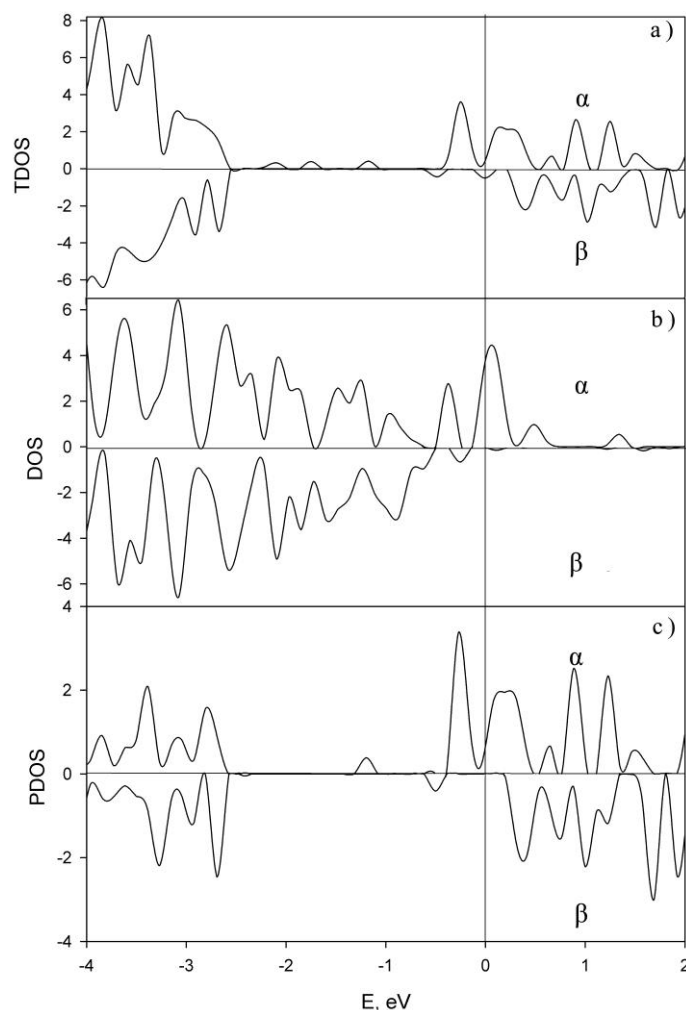


Рисунок 3 - Плотности состояний: а) полной структуры; б) пластины MgO; в) четырёх верхних слоёв пластины с монослоем VN

В работе показано, что структура монослой (111)_{VN}|| (111)_{MgO} обладает свойством проводника (рисунок 3а). Однако, при синтезе, монослой будет располагаться на достаточно толстой подложке, которая исключает влияние нижнего слоя пластины. В то же время, существенный вклад вносят атомы свободной поверхности MgO, которые располагаются вблизи уровня Ферми, что подтверждает плотность состояний пластинки MgO на рисунке 3б. Чтобы исключить данный вклад, была построена парциальная плотность состояний четырёх верхних слоёв пластины (111)_{MgO} с нанесённым монослоем (111)_{VN} (рисунок 3в). В результате, исключая вклад свободной поверхности, установлено, что в данной структуре для электронов со спином α будет наблюдаться ненулевая плотность состояний. В то время как для электронов со спином β в плотностях состояний проводимость отсутствует. Таким образом, в структуре монослой (111)_{VN}|| (111)_{MgO} электроны со спином α будут проводящими, а со спином β – нет. То есть подобная система будет вести себя как разбавленный магнитный полупроводник. Это позволяет считать данный материал перспективным для использования в спинтронике.

Также, нами было теоретически проверено, что при последующем наращивании слоёв VN, свойство разбавленного магнитного полупроводника будет теряться.