

Отчет о проделанной работе с использованием оборудования ИВЦ НГУ

1. Аннотация. Создание новых материалов с заданными характеристиками является одной из ключевых задач современного материаловедения. Большой интерес представляют низкоразмерные гибридные материалы, которые позволяют создавать высокоэффективные устройства нового поколения. В данной работе в рамках метода теории функционала плотности были смоделированы новые наноразмерные вертикальные гетероструктуры на основе монослоёв дителлурида ванадия и графена, VTe_2 /графен и VTe_2 /графен/ VTe_2 , изучены их структура и свойства. Смоделировано влияния дополнительного слоя селена, расположенного между монослоем FeSe и подложкой, на электронную структуру FeSe/ $SrTiO_3$. Показано, что графен оказывает существенное влияние на монослой VTe_2 . По сравнению с изолированным монослоем фрагмент $T-VTe_2$ в T /графен демонстрирует полуметаллический ферромагнетизм с непрямой запрещённой зоной в состояниях со спином «вверх». Полученные в ходе исследования результаты показывают перспективность использования трёхслойной гетероструктуры $T-VTe_2$ /графен/ $T-VTe_2$ в качестве магнитной туннельной структуры в новых наноустройствах спинтроники, управляемых туннельным магнитным сопротивлением или переносом спинового момента. В гетероструктуре FeSe/ $SrTiO_3$ дополнительный слой селена в присутствии вакансий кислорода локализует на себе заряд, что препятствует его переносу на монослой FeSe и, как следствие, не способствует исчезновению дырочных карманов в Γ точке.

2. Тема работы. Структура и свойства новых материалов на основе слоистых соединений переходных металлов

3. Состав коллектива.

Михалев Юрий Глебович, д.-р. хим. наук, профессор, профессор кафедры физической и неорганической химии Института цветных металлов и

материаловедения ФГАОУ ВО «Сибирский федеральный университет», email: y.mihalev@bk.ru – научный руководитель.

Коршунов Максим Михайлович, д.-р. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник лаборатории Физики магнитных явлений Института физики им. Л.В. Киренского СО РАН, профессор кафедры теоретической физики и волновых явлений Института инженерной физики и радиоэлектроники ФГАОУ ВО «Сибирский федеральный университет», email: mkorshunov@gmail.com – консультант.

Овчинников Сергей Геннадьевич, д.-р. физ.-мат. наук, профессор, зав. кафедрой теоретической физики и волновых явлений ФГАОУ ВО «Сибирский федеральный университет», руководитель научного направления «Магнетизм» ИФ СО РАН.

Куклин Артем Валентинович, старший научный сотрудник Департамента науки и инновационной деятельности ФГАОУ ВО «Сибирский федеральный университет».

Бегунович (Тихонова) Людмила Витальевна, младший научный сотрудник Департамента науки и инновационной деятельности ФГАОУ ВО «Сибирский федеральный университет».

4. Информация о гранте. Фонд развития теоретической физики и математики «БАЗИС», «Спиновые флуктации как источник сверхпроводящего спаривания в селенидах железа» (2017-2020 годы), руководитель – Коршунов Максим Михайлович.

Государственное задание Министерства науки и высшего образования Российской Федерации Сибирскому федеральному университету, грант № 16.1455.2017/ПЧ «Исследование наноразмерных слоистых структур на основе соединений переходных металлов» (2017-2019 годы), руководитель – Овчинников Сергей Геннадьевич.

5. Научное содержание работы.

5.1 Постановка задачи. Изучение структуры и свойств гетероструктур на основе монослоёв дителлурида ванадия и селенида железа.

5.2 Современное состояние проблемы. Большое количество исследований посвящено изучению и разработке новых материалов с улучшенными техническими характеристиками для современных устройств электроники, спинтроники и техники. Одним из важных направлений является разработка новых материалов для магниторезистивной оперативной памяти. Последние исследования в данном направлении выявили проблемы, связанные с уменьшением размеров ячеек, с термостойкостью, контролем толщины оксидных барьеров, допустимостью отжига, надёжностью устройств [1]. Использование двумерных материалов, в частности, гетероструктур, может решить некоторые из этих проблем и даже добавить преимущества новым устройствам, например такие как, гибкость [2], лёгкость масштабирования и др. Другим перспективным направлением исследования является область высокотемпературных сверхпроводников. Открытие высокотемпературной сверхпроводимости в монослое селенида железа на таких подложках как: (001)SrTiO₃, (110) SrTiO₃, рутил, анатацен [2, 3] вызвало высокий резонанс в научном сообществе, поскольку в объемных образцах величина T_c достигает порядка нескольких Кельвин. На данный момент рекордсменом по значению T_c является гетероструктура FeSe / SrTiO₃ [3,4]. До настоящего времени причины высокого значения T_c неизвестны. Данные ARPES показывают наличие только одной поверхности Ферми-электронного кармана вокруг точки M. Дырочный карман около Gamma-точки отсутствует. С ростом числа монослоев появляется дырочный карман в Gamma-точке и одновременно исчезает сверхпроводимость. Воспроизведение наблюдаемой в ARPES электронной структуры в ходе квантово-химических расчетов является важной задачей на пути к пониманию механизма сверхпроводимости. До сих пор неизвестно, что именно приводит к формированию такой электронной структуры:

электронные корреляции, реконструкция поверхности, наличие вакансий или что-то другое [5], поэтому одним из актуальных направлений является исследование структуры интерфейса и возможных реконструкций поверхности SrTiO₃.

1. Bhatti S, Sbiaa R, Hirohata A, Ohno H, Fukami S and Piramanayagam S N 2017 Spintronics based random access memory: a review *Mater. Today* **20** 530–48
2. Tan C, Liu Z, Huang W and Zhang H 2015 Non-volatile resistive memory devices based on solution-processed ultrathin two-dimensional nanomaterials *Chem. Soc. Rev.* **44** 2615–28
2. Wang, Q.Y. Interface-Induced High-Temperature Superconductivity in Single Unit-Cell FeSe Films on SrTiO₃ / Q.Y. Wang, L. Zhi, Z. Wen, Z. Zuo, Z. Jin-Song, L. Wei, D. Hao, O. Yun-Bo, D. Peng, C. Kai // *Chin. Phys. Lett.* – 2012. – V. 29. – P. 037402.
3. Ge, J.-F. Superconductivity above 100 K in single-layer FeSe films on doped SrTiO₃ / J.-F. Ge, Z.-L. Liu, C. Liu, C.-Li Gao, D. Qian, Q.-K. Xue, Y. Liu, J.-F. Jia // *Nature Materials.* – 2015. – V. 14. – P. 285.
4. Qing-Yan W, Zhi L, Wen-Hao Z, Zuo-Cheng Z, Jin-Song Z, Wei L, Hao D, Yun-Bo O, Peng D, Kai C, Jing W, Can-Li S, Ke H, Jin-Feng J, Shuai-Hua J, Ya-Yu W, Li-Li W, Xi C, Xu-Cun M and Qi-Kun X 2012 Interface-induced high-temperature superconductivity in single unit-cell FeSe films on SrTiO₃ *Chin. Phys. Lett.* **29** 037402
5. Sadovskii, M.V. High-temperature superconductivity in FeSe monolayers / M.V. Sadovskii // *Phys. Usp.* – 2016. – V. 59. – P. 947–967.

5.3 Подробное описание работы, включая используемые алгоритмы. Квантово-химические расчёты для гетероструктур на основе монослоёв VTe₂ и графена проводились в программном пакете VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package) [1] с использованием базиса плоских волн и PAW формализма [2]. Энергия обрезания плоской волны была равна 400 эВ. Критерий полной минимизации энергии был равен 10⁻⁴ эВ, максимальное значение сил, действующих на атомы в оптимизированных структурах, составляло 10⁻² эВ Å⁻¹. Расчёты для гетероструктуры FeSe / SrTiO₃ осуществлялось в программном пакете OpenMX (Open source package for Material eXplorer) с использованием сохраняющих норму псевдопотенциалов [3-7] и локализованных псевдоатомных базисных функций [8]. Энергия

обрезания плоской волны была равна 150 Ry. Максимальное значение сил, действующих на атомы в оптимизированных структурах, составляло $1 \cdot 10^{-6}$ Hartree/Borh. Критерий полной минимизации энергии был равен $1 \cdot 10^{-8}$ Hartree. Все исследования проводились в рамках теории функционала плотности (DFT). Для учёта обменно-корреляционных эффектов использовались обменно-корреляционный PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) [9] и гибридный HSE06 (Heyd-Scuseria-Ernzerhof) [10] функционалы. Учёт сил Ван-дер-ваальса между монослоями осуществлялся с помощью эмпирической поправки Гримма D2 [11]. Чтобы исключить взаимодействие соседних образцов задавался вакуумный промежуток 20 Å вдоль нормали к поверхности гетероструктур. Первая зона Бриллюэна была разбита на $12 \times 12 \times 1$ сетку, выбранную по схеме Монхорста-Пака [12]. Расчет зонной структуры проводился вдоль высокосимметричных направлений $\Gamma(0,0,0)$ - $M(1/2,0,0)$ - $K(1/3,1/3,0)$ - $\Gamma(0,0,0)$ для гетероструктур на основе VTe_2 и вдоль направлений $\Gamma(0,0,0)$ - $X(1/2,0,0)$ - $M(1/2,1/2,0)$ - $\Gamma(0,0,0)$ для гетероструктур с FeSe в первой зоне Бриллюэна. Программное обеспечение VESTA (Visualization for Electronic and Structural Analysis) [13] использовалось для представления атомных структур.

1. Kresse, G.; Furthmuller J 1996 Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set *Phys. Rev. B* 54 11169–86
2. Bloch P E 1994 Projector augmented-wave method *Phys. Rev. B* 50 17953–79
3. Bachelet G B, Hamann D R and Schluter M 1982 Pseudopotentials that work: From H to Pu *Phys. Rev. B* 26 4199
4. Troullier N and Martins J L 1993 Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations *Phys. Rev. B* 43
5. Kleinman L and Bylander D M 1982 Efficacious Form for Model Pseudopotentials *Leonards Phys. Rev. Lett.* 48 1425–8
6. Blochl P E 1990 Generalized separable potentials for electronic-structure calculations *Phys. Rev. B* 41 5414–6
7. Morrison I, Bylander D M and Kleinman L 1993 Nonlocal Hermitian norm-conserving Vanderbilt psendopotential *Phys. Rev. B* 47 6728–31

8. Ozaki T and Kino H 2004 Numerical atomic basis orbitals from H to Kr *Phys. Rev. B* 69 195113
9. Perdew J P, Burke K and Ernzerhof M 1996 Generalized Gradient Approximation Made Simple *Phys. Rev. Lett.* 77 3865–8
10. Krukau A V, Vydrov O A, Izmaylov A F and Scuseria G E 2006 Influence of the exchange screening parameter on the performance of screened hybrid functionals *J. Chem. Phys.* 125
11. J. Harl, L. Schimka and G K 2010 Assessing the quality of the random phase approximation for lattice constants and atomization energies of solids *Phys. Rev. B* 81 115126
12. H. J. Monkhorst and J. D. Pack, Special points for Brillouin-zone integrations *Phys. Rev. B*, 1976, 13, 5188–5192.
13. Momma K and Izumi F 2011 VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data *J. Appl. Crystallogr.* 44 1272–6

5.4 Полученные результаты. Были сконструированы бислойные гетероструктуры из монослоя VTe_2 с T или H конфигурацией, расположенного над слоем графена (рисунок 1). С целью обеспечения наилучшего совпадения параметров решётки VTe_2 и графена, при конструировании элементарных ячеек гетероструктур использовались суперячейки 2×2 VTe_2 и 3×3 графена. Разница между параметрами кристаллической решётки составила 3,21%, что привело к небольшому растяжению фрагмента VTe_2 и сжатию фрагмента графена. В оптимизированной гетероструктуре T /графен наблюдается деформация фрагмента $T-VTe_2$: у каждого атома V три связи $V-Te$ длиннее по сравнению с другими тремя. Связи $V-Te$ во фрагменте $H-VTe_2$ эквивалентны и немного длиннее по сравнению с изолированным монослоем. Основные структурные параметры представлены в таблице 1. Магнитные моменты на атомах V и Te увеличились по абсолютной величине по сравнению с таковыми в изолированном монослое. Полный магнитный момент $T-VTe_2$ увеличился в 1,5 раза и равен $4,799 \mu_B$, а для $H-VTe_2$ - на $\sim 6\%$ и составляет $4,130 \mu_B$. Фрагменты связаны между собой силами Ван-дер-Ваальса. Образование данных гетероструктур энергетически выгодно, при этом гетероструктура T /графен энергетически предпочтительна (таблица 1). Фрагмент $H-VTe_2$ так

же, как изолированный монослой $H-VTe_2$ является ху магнетиком. В отличие от монослоя $T-VTe_2$, фрагмент $T-VTe_2$ имеет лёгкую ось намагничивания вдоль направления x , что вызвано деформацией структуры.

Из рисунков 2 и 3 видно, что фрагмент $T-VTe_2$ обладает 100% спиновой поляризацией и характеризуется как спиновый полуметалл. В состояниях для спина «вверх» наблюдается непрягая запрещённая зона $\sim 0,3$ эВ. Электронная подсистема $H-VTe_2$ – полупроводник с шириной запрещённой зоны $0,33$ эВ, что больше по сравнению с изолированным монослоем $H-VTe_2$ ($0,18$ эВ). С целью оценки влияния растяжения монослоёв VTe_2 при образовании гетероструктур на их электронную структуру, были изучены изолированные монослои $T-VTe_2$ и $H-VTe_2$, вектор трансляции a которых был увеличен до значения соответствующего a для гетероструктуры. Результаты расчётов показывают, что взаимодействие с π -системой графена играет ведущую роль в формировании электронных свойств фрагментов VTe_2 по сравнению с приложенным растяжением. Такой же анализ был проведён и для фрагмента графена. Плотности состояний сжатого графена, совпадают с плотностями состояний изолированного графена, следовательно, изменения в электронной структуре графена вызваны добавлением фрагмента VTe_2 . Включение в расчёт спин-орбитального (СО) взаимодействия уменьшает ширину запрещённой зоны во фрагменте $H-VTe_2$ с $0,33$ до $0,28$ эВ.

Расположение конуса Дирака в Γ точке является следствием эффекта репродукции зон. В обеих гетероструктурах перенос заряда с графена на VTe_2 смещает уровень Ферми ниже точки Дирака на $\sim 0,2$ эВ (рисунок 3), вызывая дырочное допирование графена. Перераспределение заряда не является результатом образования ковалентных связей между атомами C и Te , так как не было выявлено локализации электронов в области между монослоями. Снятие вырождения по спину в точке Дирака (см. вставки на рисунке 3) вызвано как наличием магнитного поля подложки, так и перекрыванием волновых функций $C-p_z$ состояний $\Psi_i(i)$ со спин-поляризованными состояниями атомов теллура $\Psi_j(j)$. Данное перекрывание

приводит к обменному взаимодействию в соответствии с принципом Паули, вследствие чего конусы разных спинов становятся неэквивалентными по энергии. Со взаимодействие не меняет характер расщепления, а только корректирует энергию расположения зон. Результаты согласуются с работой [1], в которой авторы выявили обменное расщепление конуса Дирака в графене с адатомами Ni на поверхности.

Далее были смоделированы трёхслойные гетероструктуры, которые конструировались добавлением слоя T - или H -VTe₂ на фрагмент графена двухслойной гетероструктуры. Два спиновых упорядочения смежных ферромагнитных слоёв дителлурида ванадия: параллельное и антипараллельное – были изучены для всех конфигураций трёхслойных гетероструктур. Геометрия и структурные параметры оптимизированных трёхслойных гетероструктур представлены на рисунке 4 и в таблице 1. Гетероструктуры нечувствительны к способам укладки монослоёв. Маленькая энергетическая разница между параллельным и антипараллельным спиновыми упорядочениями указывает на возможность лёгкого перемагничивания верхнего слоя без изменения магнитного упорядочения нижнего слоя. Слоистые структуры, сформированные из двух монослоёв T -VTe₂ и графена энергетически предпочтительны, при этом конфигурация $T_gr_T_AA'$ является самой выгодной по энергии.

Парциальные плотности состояний для энергетически предпочтительной трёхслойной гетероструктуры $T_gr_T_AA'$ с антипараллельным упорядочением (рисунок 5) показывают распределение плотностей состояний со спином «вверх» и спином «вниз» в верхнем и нижнем фрагментах T -VTe₂. Рассчитанные значения спиновой поляризации на уровне Ферми составляют 76 и 69% для верхнего и нижнего фрагментов T -VTe₂, соответственно. Разные поляризации фрагментов T -VTe₂ являются результатом более сильного взаимодействия одного фрагмента VTe₂ с графеном по сравнению с другим. Рассчитанное в рамках модели Жюльера [2, 3] значение туннельного магнитного сопротивления для гетероструктуры

$T_{gr}T_{[AA]}$ равно 220%, что свидетельствует о возможности её использования в качестве туннельной магнитной структуры для новых устройств спинтроники, управляемых туннельным магнитным сопротивлением или эффектом переноса спинового момента.

На следующем этапе было рассмотрено влияние дополнительного слоя селена, существование которого было предсказано в работе [4], на электронную структуру FeSe/SrTiO₃. Дополнительный слой селена располагается между монослоем FeSe и двойным Ti-O слоем подложки. Рассматривали два случая: с вакансиями кислорода и без них в двойном Ti-O слое. Для простоты расчёта и для демонстрации общего эффекта от присутствия вакансий кислорода в расчётах рассматривалась только одна концентрация вакансий (50% вакансий в Ti-O слое: 1 вакансия на элементарную ячейку). Поскольку из экспериментального исследования точное положение атомов Se неизвестно, рассматривается несколько положений дополнительного селена в элементарной ячейке (рисунок 6): над атомами *Ti*, над верхними и нижними атомами O двойного Ti-O слоя, над вакансией кислорода – при этом монослой FeSe располагался так, чтобы дополнительный Se находился под атомами *Fe*. В ходе оптимизации дополнительный Se сместился в положения над верхними атомами O двойного титанового слоя (рисунок 6 (a)) или над вакансиями кислорода (рисунок 6 (e)). Равновесные конфигурации FeSe/Se/(2Ti-O_x)SrTiO₃ с и без вакансий кислорода представлены на рисунке 7.

В структуре без кислородных вакансий дополнительный Se расположился над верхними атомами кислорода двойного Ti-O слоя на расстоянии 1,70 Å от поверхности подложки (2Ti-O_x)SrTiO₃. Расстояние между монослоем FeSe и дополнительным селеном составляет 2,35 Å. Перенесённый заряд на монослой селенида железа составляет -0,032 ē/FeSe. Заряд на дополнительном атоме Se положительный (+0,058 ē/Se). Рисунок 7 (a) показывает, что на уровне Ферми (E_f) в Γ точке появился электронный карман. Дырочные карманы по-прежнему пересекают уровень Ферми и

заканчиваются на 0,23 эВ выше E_f . Полученное положение электронных карманов в Γ точке не согласуется с экспериментом и на 0,03 эВ выше, чем в системе без дополнительного Se и без вакансий кислорода. Наличие вакансий в верхнем слое Ti-O способствует расположению дополнительного селена на 0,22 Å ближе к подложке. Расстояние от монослоя до дополнительного слоя селена составляет 3,15 Å. Перенос заряда на монослой FeSe равен -0,045 \bar{e}/FeSe , что всего лишь на 0,013 \bar{e} больше, чем в бездефектной системе. Заряд на дополнительном селене равен -0,265 \bar{e}/Se . Таким образом, большая часть заряда локализована на дополнительном слое селена. Как видно из рисунка 7 (b), такое небольшое увеличение перенесённого на монослой FeSe заряда не привело к смещению электронного и дырочных карманов в Γ точке. Из вышесказанного следует, что дополнительный слой селена не способствует исчезновению электронных карманов в Γ точке на уровне Ферми.

1. Abdelouahed S, Ernst A, Henk J, Maznichenko I V. and Mertig I 2010 Spin-split electronic states in graphene: Effects due to lattice deformation, Rashba effect, and adatoms by first principles *Phys. Rev.* **82** 125424
2. Julliere M 1975 Tunneling between ferromagnetic films *Phys. Lett. A* **54** 225–6
3. Volkov N V 2012 Spintronics: manganite-based magnetic tunnel structures *Uspekhi Fiz. Nauk* **55** 250–69
4. Zhao W, Li M, Chang C, Jiang J, Wu L, Liu C, Moodera J S, Zu Y and Chan M H W 2018 Direct imaging of electron transfer and its influence on superconducting pairing at FeSe / SrTiO₃ interface *Sci. Adv.* **4** eaao2682

5.5 Иллюстрации, визуализация результатов.

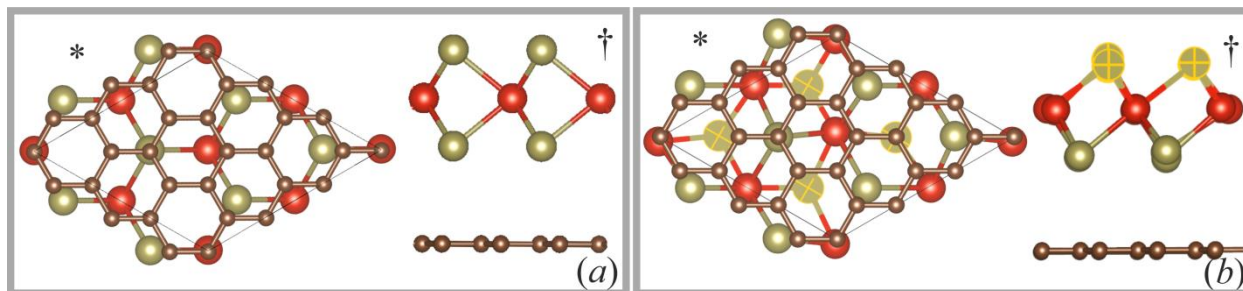


Рисунок 1 – Гетероструктуры *H*/графен и *T*/графен. Атомы *V*, *Te* и *C* обозначены красным, оливковым и коричневым цветами, соответственно. В случае *T*/графен, атомы *Te*, расположенные дальше от плоскости графена, подсвечены жёлтым. Элементарные ячейки гетероструктур обозначены черным. (*) Вид сверху; (†) Вид сбоку.

Таблица 1 – Структурные и магнитные характеристики двух - и трёхслойных гетероструктур. *P* и *AP* обозначают параллельную и антипараллельную взаимную ориентацию смежных ферромагнитных фрагментов VTe_2 в трёхслойных гетероструктурах. Индексами (*) обозначены расстояния между графеном и вторым фрагментом VTe_2 в случае, если они отличаются от расстояний до первого фрагмента VTe_2 . Относительная энергия – это разность между полной энергией двухслойной (трёхслойной) гетероструктуры и полной энергией энергетически предпочтительной двухслойной (трёхслойной) гетероструктуры.

Гетероструктура	Спиновое упорядочение: параллельное (<i>P</i>), антипараллельное(<i>AP</i>)	Вектор трансляции $a=b$, Å	Межслоевое расстояние, Å	Толщина гетероструктуры, Å	Относительная энергия, эВ	Энергия связи монослоёв на ячейку E_{bind} эВ	ΔE (<i>P-AP</i>), эВ
<i>H</i> /графен	-	7,35	3,55	7,00	0,386	-0,660	-
<i>T</i> /графен	-	7,36	3,42	6,71	0,000	-0,991	-

Продолжение таблицы 1

$H_{gr}H_{[AA]}$	P	7,33	3,51	13,93	0,743	-1,471	0,001
	AP	7,33	3,51	13,93	0,742	-1,472	
$H_{gr}H_{[AB]}$	P	7,33	3,51/3,54*	13,95	0,733	-1,482	0,000
	AP	7,33	3,51/3,54*	13,95	0,733	-1,482	
$T_{gr}T_{[AA]}$	P	7,36	3,49	13,73	0,000	-2,104	0,000
	AP	7,36	3,49	13,73	0,000	-2,104	
$T_{gr}T_{[AA]}$	P	7,35	3,39/3,42*	13,67	0,002	-2,103	-0,001
	AP	7,35	3,39/3,42*	13,67	0,003	-2,101	
$T_{gr}H_{[AA]}$	P	7,34	3,46/3,52*	14,00	0,377	-1,782	0,002
	AP	7,34	3,46/3,52*	14,00	0,379	-1,780	
$T_{gr}H_{[AB]}$	P	7,34	3,46/3,51*	14,00	0,372	-1,787	-0,001
	AP	7,34	3,46/3,51*	14,00	0,373	-1,786	

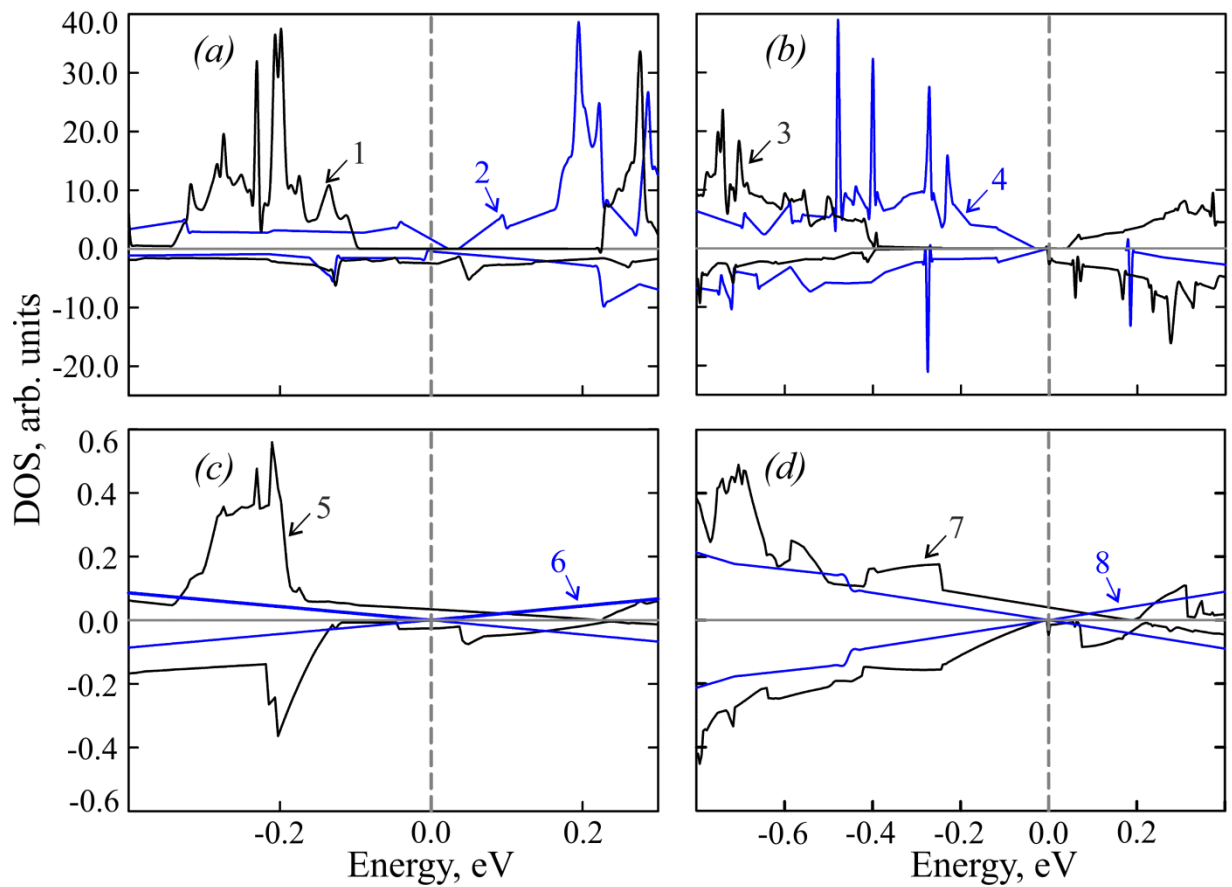


Рисунок 2 – Плотности состояний (DOS) для изолированных монослоёв и фрагментов бислойных гетероструктур: парциальные плотности состояний (PDOS) фрагмента $T\text{-VTe}_2$ (а, сплошная чёрная линия 1), полные плотности

состояний (TDOS) изолированного монослоя $T\text{-VTe}_2$ (a , сплошная синяя линия 2), PDOS фрагмента $H\text{-VTe}_2$ (b , сплошная чёрная линия 3), TDOS изолированного монослоя $H\text{-VTe}_2$ (b , сплошная синяя линия 4), PDOS фрагмента графена для гетероструктуры $T/\text{графен}$ (c , сплошная чёрная линия 5), TDOS изолированного графена (c , d , сплошные синие линии 6 и 8), PDOS фрагмента графена для гетероструктуры $H/\text{графен}$ (d , сплошная чёрная линия 7). Уровень Ферми принят за ноль. Плотностям состояний со спином «вверх» и со спином «вниз» соответствуют положительные и отрицательные значения, соответственно.

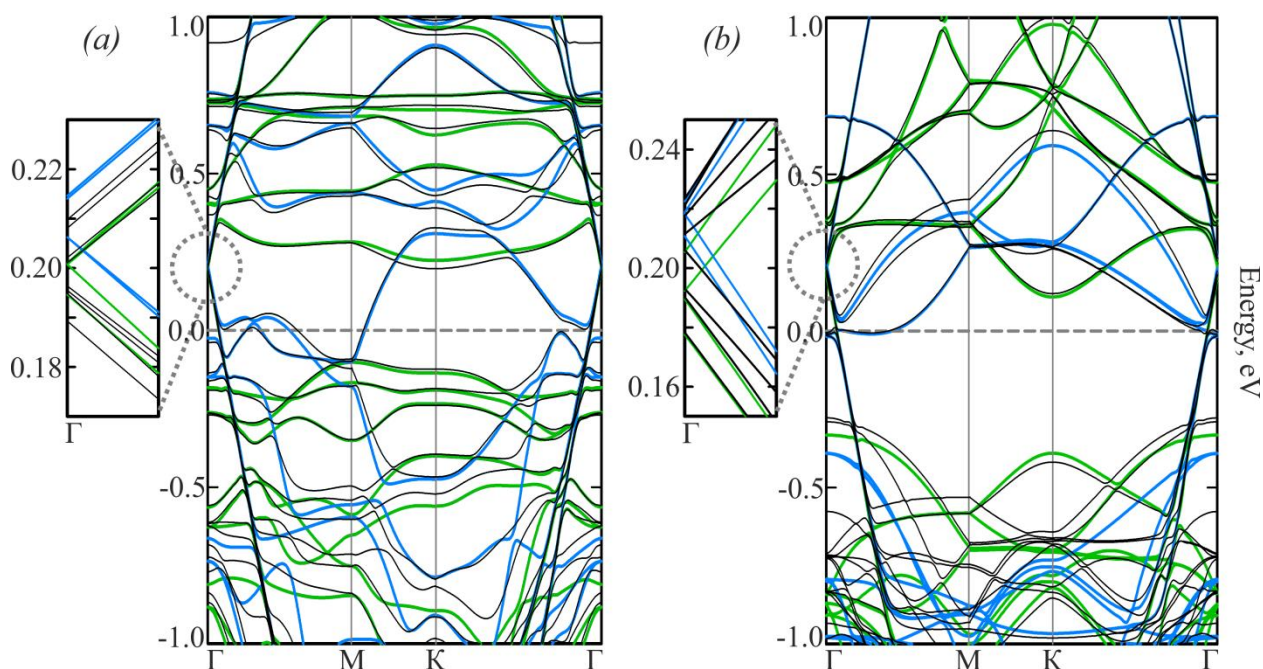


Рисунок 3 – Зонные структуры гетероструктур $T/\text{графен}$ (a) и $H/\text{графен}$ (b), рассчитанные с учётом (черные линии) и без учёта (зелёные и синие линии) спин-орбитального взаимодействия. Зелёные и синие линии соответствуют зонной структуре для состояний со спином «вверх» и спином «вниз», соответственно. Уровень Ферми принят за ноль. На вставках изображено снятие вырождения в точке Дирака для фрагмента графена.

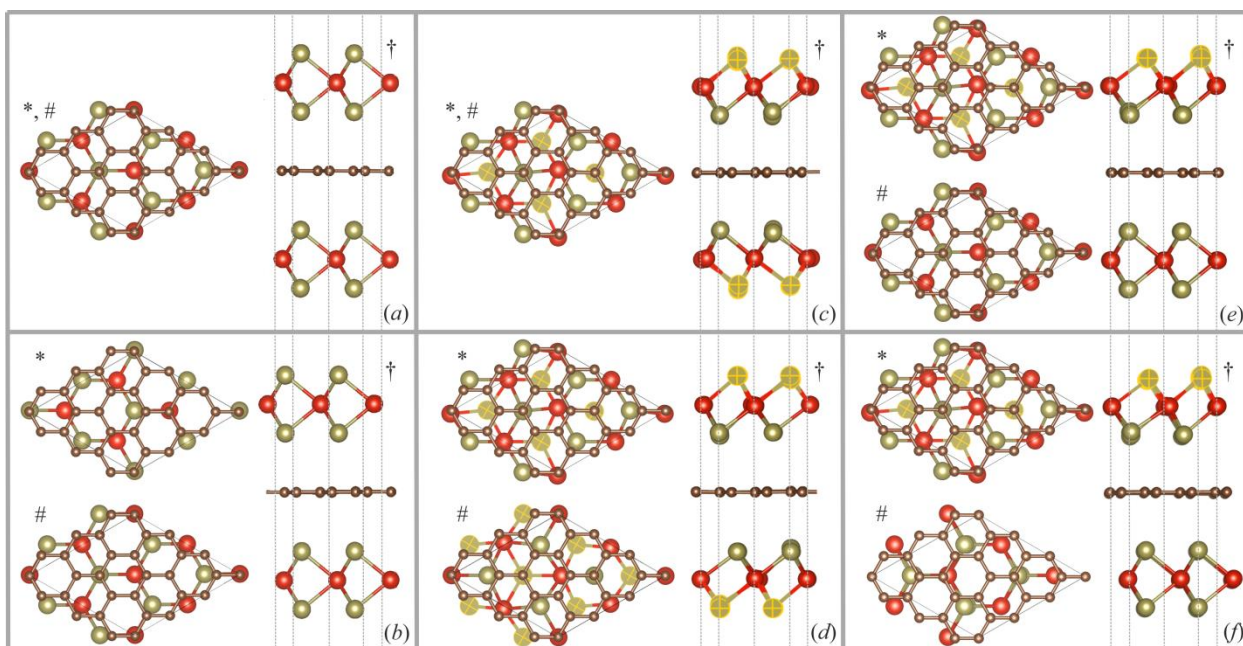


Рисунок 4 – Равновесные конфигурации трёхслойных гетероструктур H - VTe_2 /графен/ H - VTe_2 , T - VTe_2 /графен/ T - VTe_2 и T - VTe_2 /графен/ H - VTe_2 с различными вариантами расположения фрагментов VTe_2 : H _gr_ H _ $[AA]$ (a), H _gr_ H _ $[AB]$ (b), T _gr_ T _ $[AA]$ (c), T _gr_ T _ $[AA]$ (d), T _gr_ H _ $[AA]$ (e) и T _gr_ H _ $[AB]$ (f). Здесь “ H ” и “ T ” обозначают фазу VTe_2 , которая была использована для конструирования гетероструктуры, “gr” – это слой графена. Расположение верхнего фрагмента VTe_2 относительно нижнего фрагмента VTe_2 указано в квадратных скобках. $[AA]$: атомы V над атомами V , «внутренние» атомы Te над «внешними» атомами Te , «внешние» атомы Te над «внутренними» атомами Te ; $[AB]$: атомы Te над атомами V ; $[AA]$: атомы V над атомами V , «внутренние» атомы Te над «внутренними» атомами Te , «внешние» атомы Te над «внешними» атомами Te ; $[AB]$: «внутренние» атомы Te над атомами V , «внешние» атомы Te над «внутренними» атомами Te . * и # – расположение графена на верхнем и нижнем фрагментах VTe_2 , соответственно, в плоскости a - b . *,#. † – Вид сбоку. Атомы V , Te и C обозначены красным, оливковым и коричневым цветами, соответственно. Атомы Te фрагмента T - VTe_2 , расположенные дальше от плоскости графена, выделены жёлтым цветом. Серые пунктирные линии – это направляющие для удобного сравнения положения фрагментов VTe_2 относительно друг друга.

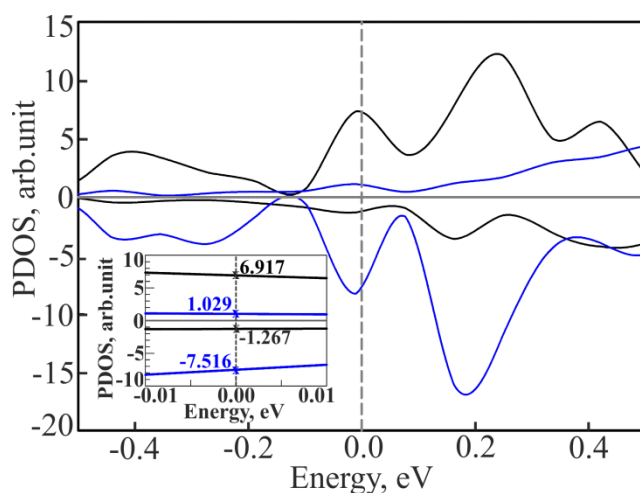


Рисунок 5 – Парциальные плотности состояний (PDOSs) для энергетически предпочтительной трёхслойной гетероструктуры $T_gr_T_[AA]$ с антипараллельным спиновым упорядочением смежных ферромагнитных фрагментов. Синие и черные линии обозначают парциальные плотности состояний фрагментов $T-VTe_2$, расположенных выше и ниже плоскости графена, соответственно. Уровень Ферми принят за ноль. Плотностям состояний со спином «вверх» и со спином «вниз» соответствуют положительные и отрицательные значения, соответственно. Вставка показывает PDOSs на уровне Ферми. Значения PDOSs на уровне Ферми приведены в относительных единицах.

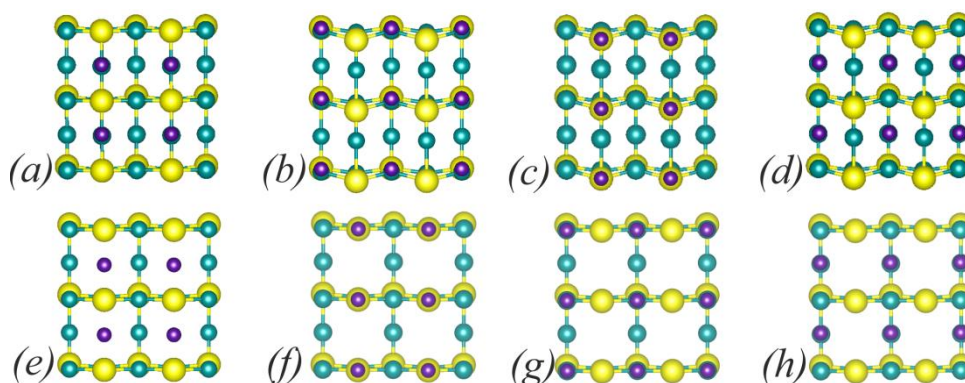


Рисунок 6 – Расположение атомов Se на поверхности $2Ti-O_x$. Жёлтым, голубым, оранжевым, зелёным и фиолетовым цветами обозначены атомы Ti , O , Sr , Fe , Se , соответственно.

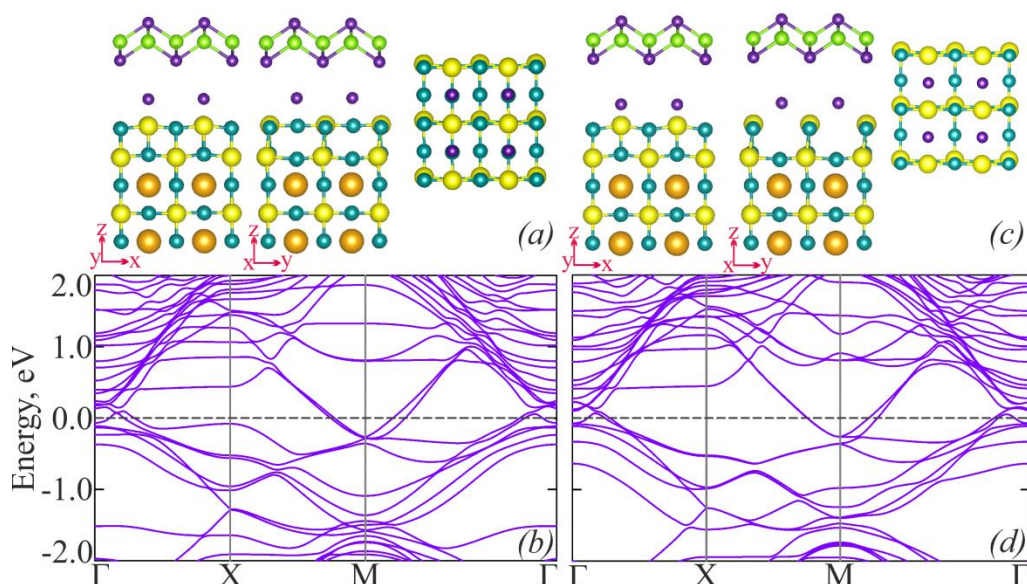


Рисунок 7 – Атомная и зонная структура энергетически выгодных конфигураций гетероструктуры FeSe / Se / (2Ti-O_x)SrTiO₃. Уровень Ферми принят за ноль. Жёлтым, голубым, оранжевым, зелёным и фиолетовым цветами обозначены атомы *Ti*, *O*, *Sr*, *Fe*, *Se*, соответственно. Для наглядности на рисунках подложка вдоль оси *z* показана не полностью, вдоль осей *x* и *y* показано по две элементарные ячейки.

6. Эффект от использования кластера в достижении целей работы.

Все квантово-химические расчеты, результаты которых приведены выше, проводились на базе оборудования ИВЦ НГУ. Проведение таких расчетов невозможно на персональных компьютерах по причине ресурсоемкости оптимизационного алгоритма, как по объему требуемой памяти, так и по времени счета. Таким образом, использование кластера является необходимым условием для успешного достижения целей работы.

7. Перечень публикаций, содержащих результаты работы

1. Triple VTe₂/graphene/VTe₂ heterostructures as perspective magnetic tunnel junctions / **L. V. Begunovich**, A. V. Kuklin, M. A. Visotin, A. A. Kuzubov, F. N. Tomilin, A. S. Tarasov, Y. G. Mikhalev, P. V. Avramov // *Applied Surface Science*. – 2020. – Vol. 510. – P. 145315 (Impact Factor 6.182).

2. Effect of the additional Se layer on the electronic structure of iron-

based superconductor FeSe/SrTiO₃ / **L. V. Tikhonova (Begunovich)**, M. M. Korshunov // Journal of Superconductivity and Novel Magnetism. – 2020. – Vol. 33. – P. 171-176. (Impact Factor 1.244).

3. New nanoscale VTe₂/graphene and VTe₂/graphene/VTe₂ heterostructures for spintronic applications / **L. V. Tikhonova (Begunovich)**, Y. G. Mikhalev // International conference AMM-2019 "Ab-initio modeling of advanced materials": Ekaterinburg, 2019.

4. Nanoscale magnetic tunnel junction / **L. V. Tikhonova (Begunovich)** // International Union of Materials Research Societies – International Conference on Electronic Materials 2018 (IUMRS-ICEM 2018): Daejeon, Korea, 2018.