

## Оригинальная статья / Original article

УДК 538.9

<https://doi.org/10.21869/2223-1528-2024-14-3-132-146>

## Моделирование квантовых состояний в твердотельных ферромагнитных наноструктурах

А. А. Родионова<sup>1,2✉</sup>, В. В. Филиппов<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup> Елецкий государственный университет имени И. А. Бунина  
ул. Коммунаров, д. 28, г. Елец 399770, Российская Федерация

<sup>2</sup> Липецкий государственный педагогический университет имени П. П. Семенова-Тян-Шанского  
ул. Ленина, д. 42, г. Липецк 398020, Российская Федерация

<sup>3</sup> Московский государственный университет технологий и управления имени К. Г. Разумовского  
(Первый казачий университет), Липецкий казачий институт технологий и управления (филиал)  
ул. Краснознаменная, влд. 4, г. Липецк 398006, Российская Федерация

✉ e-mail: [nastya97zhidkova@yandex.ru](mailto:nastya97zhidkova@yandex.ru)

### Резюме

**Цель работы.** Выявление и анализ математических выражений для энергетического спектра носителей заряда в наноразмерных магнитных пленках никеля и структурах Ni-Cu (подложка), а также NiO-Ni-Cu (подложка).

**Методы.** В работе на основе основных квантово-механических представлений, с учетом граничных условий для связанных квантовых ям получены выражения для энергетического спектра электронов. Ферромагнитные свойства никеля учитываются посредством величины эффективной массы. Решение нелинейных уравнений, определяющих дискретные энергетические уровни, достигалось численными методами с использованием математического пакета Mathcad.

**Результаты.** Получены трансцендентные выражения для энергий свободных носителей заряда в квантовых ямах ферромагнитных пленок никеля, показано влияние положения никеля на медной подложке. Показано, что использование медной подложки приводит к увеличению плотности энергетических уровней в никелевой нанопленке. В рамках модели Андерсона рассмотрено влияние оксидного слоя на одноэлектронные состояния в нанопленках никеля и его оксида. На основе численного решения полученных в работе трансцендентных уравнений показано влияние соотношения толщин ферромагнитного металла и его оксида на энергетические уровни электронов, локализованных в оксидном слое.

**Заключение.** Представленные в работе формулы для спектра энергий учитывают энергетический рельеф сложной квантовой ямы, размеры пленки, поверхностного оксида и значительную эффективную массу в области ферромагнитной пленки. Показано, что увеличение эффективной массы в магнитных гетероструктурах приводит к повышению электронной плотности состояний. Обнаружено, что плотность электронных состояний в области поверхностного оксида никеля практически независима от толщины никелевой пленки. Результаты и выводы работы могут быть использованы для теоретического прогнозирования физических свойств магнитных наноструктур, в частности элементов спинтроники.

**Ключевые слова:** нанопленка никеля; квантовая яма; сложная форма; гетероструктура; энергетический спектр; спинтроника.

**Конфликт интересов:** Авторы декларируют отсутствие явных и потенциальных конфликтов интересов, связанных с публикацией настоящей статьи.

**Для цитирования:** Родионова А. А., Филиппов В. В. Моделирование квантовых состояний в твердотельных ферромагнитных наноструктурах // Известия Юго-Западного государственного университета. Серия: Техника и технологии. 2024. Т. 14, № 3 С. 132–146. <https://doi.org/10.21869/2223-1528-2024-14-3-132-146>

Поступила в редакцию 21.06.2024

Подписана в печать 21.08.2024

Опубликована 24.09.2024

## Simulation of quantum states in solid-state ferromagnetic nanostructures

Anastasiia A. Rodionova<sup>1,2</sup> ✉, Vladimir V. Filippov<sup>2,3</sup>

<sup>1</sup> Yelets State University named after I.A. Bunin  
28 Kommunarov Str., Yelets 399770, Russian Federation

<sup>2</sup> Lipetsk State Pedagogical University named after P.P. Semenov-Tyan-Shansky  
42 Lenina Str., Lipetsk 398020, Russian Federation

<sup>3</sup> Moscow State University of Technologies and Management named after K.G. Razumovsky  
(First Cossack University), Lipetsk branch  
4 Krasnoznamennaya Str., Lipetsk 398006, Russian Federation

✉ e-mail: nastya97zhidkova@yandex.ru

### Abstract

**Purpose of the article.** Identification and analysis of mathematical expressions for the energy spectrum of charge carriers in nano-sized magnetic films of nickel and Ni-Cu (substrate), as well as NiO-Ni-Cu (substrate) structures.

**Methods.** In this work, based on basic quantum mechanical concepts and taking into account the boundary conditions for coupled quantum wells, expressions for the energy spectrum of electrons are obtained. The ferrimagnetic properties of nickel are taken into account through the effective mass value. The solution of nonlinear equations that determine discrete energy levels was achieved by numerical methods using the Mathcad mathematical package.

**Results.** Transcendental expressions for the energies of free charge carriers in quantum wells of ferromagnetic nickel films are obtained, and the influence of the position of nickel on the copper substrate is shown. It has been shown that the use of a copper substrate leads to an increase in the density of energy levels in the nickel nanofilm. The influence of the oxide layer on single-electron states in nanofilms of nickel and its oxide is considered within the framework of the Anderson model. Based on the numerical solution of the transcendental equations obtained in the work, the influence of the ratio of the thicknesses of a ferromagnetic metal and its oxide on the energy levels of electrons localized in the oxide layer is shown.

**Conclusions.** The formulas presented in the work for the energy spectrum take into account the energy relief of a complex quantum well, the dimensions of the film, surface oxide, and the significant effective mass in the region of the ferromagnetic film. It has been shown that an increase in the effective mass in magnetic heterostructures leads to an increase in the electron density of states. It was found that the density of electronic states in the region of surface nickel oxide is practically independent of the thickness of the nickel film. The results and conclusions of the work can be used for theoretical prediction of the physical properties of magnetic nanostructures, in particular spintronic elements.

**Keywords:** nickel nanofilm; complex-shaped quantum well; heterostructure; energy spectrum; spintronics.

**Conflict of interest:** The authors declare no apparent or potential conflicts of interest related to the publication of this article.

**For citation:** Rodionova A.A., Filippov V.V. Simulation of quantum states in solid-state ferromagnetic nanostructures. *Seriya: Tekhnika i tekhnologii = Proceedings of the Southwest State University. Series: Engineering and Technologies.* 2024;14(3):132–146. (In Russ.) <https://doi.org/10.21869/2223-1528-2024-14-3-132-146>

Received 21.06.2024

Accepted 21.08.2024

Published 24.09.2024

\*\*\*

## Введение

Согласно литературным данным [1], перспективными материалами современной спинтроники являются квантоворазмерные структуры на основе никеля [2] и его оксида (NiO) [3]. Самостоятельные пленки и покрытия на основе никеля получили широкое применение также благодаря своим механическим и химическим свойствам [4]. В электронике наноструктуры из Ni и NiO получили распространение благодаря своим электромагнитным свойствам и химической стойкости к агрессивным внешним воздействиям [3].

Пленки никеля получают, как правило, на поверхности металлов, используя методы вакуумного осаждения [5], электрохимического [6] или химического выделения [7]. Для стабилизации структур или для управления электромагнитными свойствами зачастую пленки Ni покрывают слоем NiO. Данные оксидные пленки могут быть получены высокотемпературным окислением Ni [8] или вакуумным осаждением NiO [9]. Теоретические [10] и экспериментальные исследования [11] указывают, что NiO проявляет свойства полупроводника  $p$ -типа с шириной запрещенной зоны порядка 3,5–4 эВ. Остальные известные окисы никеля практически не образуются и в данной работе их влияние не оценивается.

Таким образом, при практическом использовании пленок Ni необходимо рассматривать структуру NiO-Ni на металлической или полупроводниковой поверхности. Наноструктуры ферромагнитный металл-оксид представляют особый интерес благодаря возможностям управления их электронными свойствами за счет размерных и полевых эффектов.

В известной литературе [12] подробно описывается энергетический спектр свободных электронов при движении в области потенциальных барьеров и квантовых ям различной сложности [13],

однако на практике при образовании твердотельных наноструктур необходимо учитывать не только сложный рельеф потенциальной энергии, но и изменение эффективной массы. Для большинства металлов эффективная масса электрона близка к массе свободного электрона, однако для ферромагнетиков это условие существенно нарушается.

В данной работе теоретически рассмотрено взаимовлияние контактирующих слоев NiO-Ni на энергетическую структуру квантовых пленок. Показана необходимость учета величины эффективной массы при расчетах свойств гетероструктур. Рассмотрены три физико-математические модели: самостоятельная квантовая яма Ni на неактивной диэлектрической подложке, например, SiO<sub>2</sub>, гетероструктура Ni-Cu на подложке меди и оксидированная нанопленка никеля на подложке.

## Материалы и методы

### Моделирование самостоятельной квантовой точки Ni

Для дальнейшего теоретического анализа используем модель идеализированного резкого гетероперехода, которая была предложена Р. Андерсоном [14], в рамках которой изменение параметров металла (полупроводника) происходит на гетерогранице скачком, отсутствуют локализованные на гетерогранице дополнительные электронные состояния, вблизи гетерограницы не образуются электрические диполи атомарного масштаба [15].

Характерной особенностью ферромагнитных материалов в намагниченном состоянии [16] является значимое изменение эффективной массы свободных электронов  $m^* \gg m_e$  ( $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31}$  кг) [17]. Параметры, необходимые для расчета свойств нанопленок конкретных размеров, представлены в таблице 1.

**Таблица 1.** Параметры магнитных материалов Ni и подложки (Cu) [8; 18–22]**Table 1.** Parameters of magnetic materials Ni and substrate (Cu) [8; 18–22]

Материал	Работа выхода (глубина потенциальной ямы), эВ	Эффективная масса электрона, $m^*/m_e$
NiO	5,35–5,55	1
Ni	4,91–5,01	10–12
Cu (подложка)	4,36–4,7	1,0–1,3

Известно, что ферромагнетизм никеля обусловлен особенностями строения внешних электронных оболочек его атомов: электроны недостроенной 3d-оболочки (вследствие параллельной ориентации атомных магнитных моментов) создают не скомпенсированный спиновый магнитный момент со средней величиной на один атом  $0,6\mu_B$  ( $\mu_B$  – магнетон Бора) [23]. Значимое электрон-электронное взаимодействие ведет также к существенному возрастанию эффективной массы электрона  $m^*$ . Эффективная масса электрона в теории ферми-жидкости связана с коэффициентом электронной теплоемкости  $\gamma$  (коэффициент Зоммерфельда) [16; 22]:

$$\frac{m^*}{m_e} = \frac{\gamma \hbar^2 (3\pi^2 z n)^{2/3}}{\pi^2 k_B^2 N_A z m_e}, \quad n = \frac{\rho N_A}{M}, \quad (1)$$

где  $k_B$  – постоянная Бора;  $N_A$  – постоянная Авогадро;  $z$  – валентность металла ( $z(\text{Ni}) = 2$ );  $n$  – концентрация атомов в единице объема (определяемая плотностью  $\rho$

и молярной массой  $M$ ). Размерный параметр  $\gamma$  (мДж/(моль·К<sup>2</sup>)) зависит от степени коррелированности электронных систем, например, для ферромагнетиков:  $\gamma(\text{Ni}) = 7,04$ ;  $\gamma(\text{Fe}) = 4,9$ , а для немагнитных металлов (диа- и парамагнетиков):  $\gamma(\text{Cu}) = \gamma(\text{Au}) = 0,69$ ,  $\gamma(\text{Ag}) = 0,64$  [22]. Таким образом, на основании экспериментальных данных обзорной работы [22] коэффициент Зоммерфельда в ферромагнитных материалах на порядок превышает аналогичные значения в диа- и парамагнетиках, что соответствует современным теоретическим представлениям о металлической связи [16].

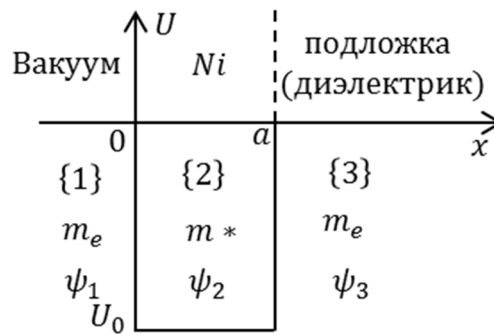
Рассмотрим последовательно виды квантовых ям (КЯ), образуемых на основе материалов, представленных в таблице 1. В дальнейших расчетах выбираем наиболее применяемые в известных работах экспериментальные величины, представленные в таблице 2. Приведенные ниже расчеты выполнены в математическом пакете Mathcad.

**Таблица 2.** Параметры материалов, моделируемых квантовых структур**Table 2.** Parameters of materials, simulated quantum structures

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

Первоначально рассмотрим наиболее простую, качественную модель нанопленки металла, которой является

модель квантовой ямы конечной глубины (рис. 1,  $U_0 \neq \infty$ ).



**Рис. 1.** Энергетическая модель одномерной квантовой ямы

**Fig. 1.** Energy model of a one-dimensional quantum well

Здесь и далее учитываем размер  $a$  – глубину КЯ (работа выхода электрона  $U_0$ ), а также эффективную массу электрона  $m^*$  [21; 22].

Условия квантования энергетического спектра в данном случае являются известными [12; 13] и представляются в виде

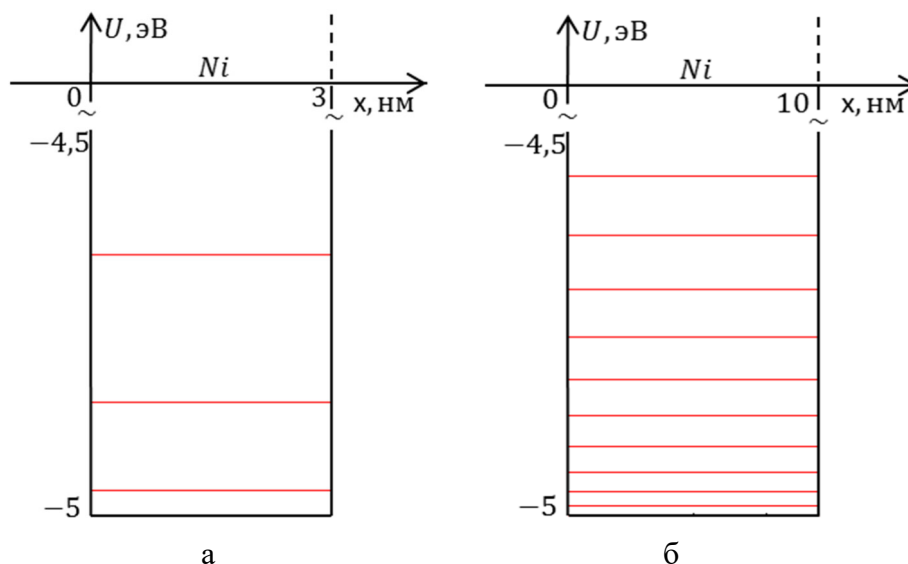
$$\left[ 1 - \left( \frac{m_e k_2(E)}{m^* k_1(E)} \right)^2 \right] \sin(k_2(E)a) + 2 \frac{k_2(E)}{m^*} \frac{m_e}{k_1(E)} \cos(k_2(E)a) = 0, \quad (2)$$

где

$$k_1 = \sqrt{2m_e(E - U_0)} / \hbar, \quad k_2 = \sqrt{2m^*E} / \hbar. \quad (3)$$

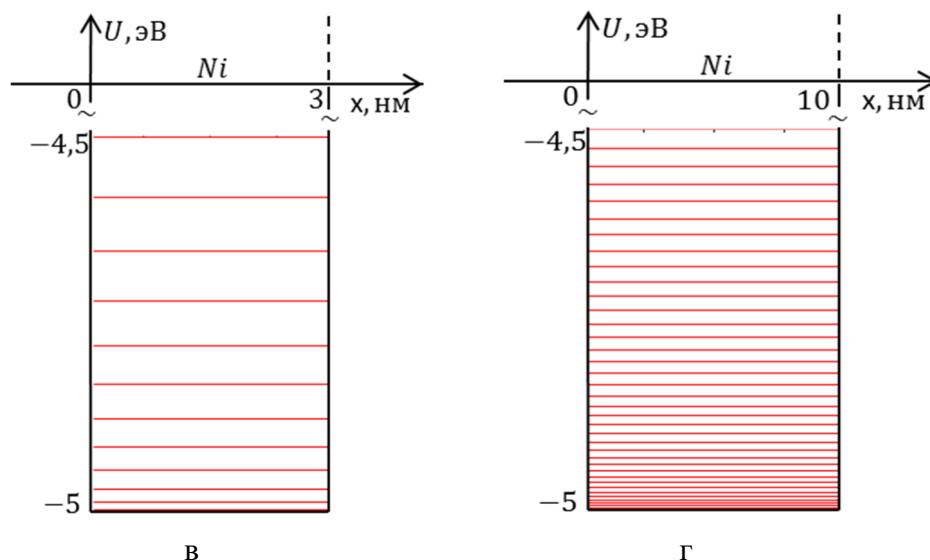
Согласно приведенному выражению (2) можно определять положения энергетических уровней электронов в пленке Ni в зависимости от толщины пленки  $a$ .

Выполненное моделирование (рис. 2) показывает существенное влияние эффективной массы на плотность электронных состояний в КЯ.



**Рис. 2.** Структура энергетических уровней в квантовой яме Ni: а, б – положение уровней для случая  $m^* = m_e$

**Fig. 2.** Structure of energy levels in a Ni quantum well: а, б – the position of the levels for the case



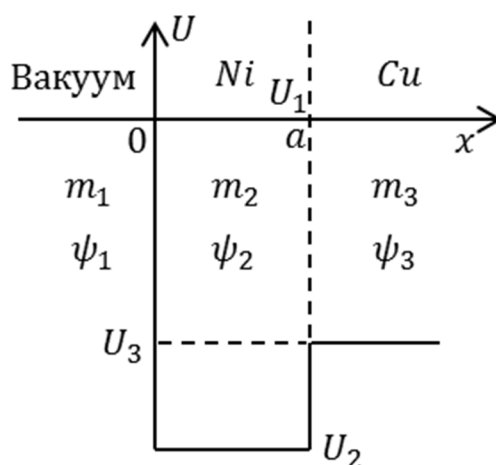
**Рис. 2.** Структура энергетических уровней в квантовой яме Ni: в, г – положение уровней с учетом величины  $m^*$

**Fig. 2.** Structure of energy levels in a Ni quantum well: в, г – position of levels taking into account the magnitude

### Модель квантовой ямы Ni на подложке Cu

Рассмотрим моделирование энергетических спектров в нанопленке никеля толщиной  $a$  на медной подложке (рис. 3). Использование медной подложки (для получения структур Ni-Cu) позволяет получать

хорошее сцепление с никелевой пленкой. Используемая медная подложка, как показано в работе [7], практически не окисляется в процессе электрохимического образования функциональной пленки никеля.



**Рис. 3.** Схема дна зоны проводимости в слоистой структуре вакуум-никель-металлическая подложка

**Fig. 3.** Scheme of the bottom of the conduction band in a layered vacuum-nickel-metal substrate structure

Значение потенциальных энергий, эффективных масс и волновых функций определяются следующим образом в областях 1–3:

$$U_i = \begin{cases} U_1, x \leq 0; \\ U_2, 0 < x \leq a; \\ U_3, x > a; \end{cases} \quad (4)$$

$$m_i^* = \begin{cases} m_1, x \leq 0; \\ m_2, 0 < x \leq a; \\ m_3, x > a; \end{cases} \quad (5)$$

$$\psi_i = \begin{cases} \psi_1, x \leq 0; \\ \psi_2, 0 < x \leq a; \\ \psi_3, x > a. \end{cases} \quad (6)$$

Тогда уравнение Шредингера имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m_i} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi_i + U \psi_i = E \psi_i. \quad (7)$$

Для области 1

$$-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} + U_1 \psi_1 = E \psi_1; \quad (8)$$

$$\frac{\partial^2 \psi_1}{\partial x^2} - \frac{2m_1}{\hbar^2} (U_1 - E) \psi_1 = 0; \quad (9)$$

$$\psi_1 = A_1 e^{\zeta_1 x} + B_1 e^{-\zeta_1 x};$$

$$\zeta_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_1(U_1 - E)}. \quad (10)$$

Для области 2

$$-\frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{\partial^2 \psi_2}{\partial x^2} + (U_2 - E) \psi_2 = 0; \quad (11)$$

$$\psi_2 = A_2 \sin \zeta_2 x + B_2 \cos \zeta_2 x;$$

$$\zeta_2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_2(E - U_2)}. \quad (12)$$

Для области 3

$$-\frac{\hbar^2}{2m_3} \frac{\partial^2 \psi_3}{\partial x^2} + (U_3 - E) \psi_3 = 0; \quad (13)$$

$$\psi_3 = A_3 e^{\zeta_3 x} + B_3 e^{-\zeta_3 x},$$

$$\zeta_3 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_3(U_3 - E)}. \quad (14)$$

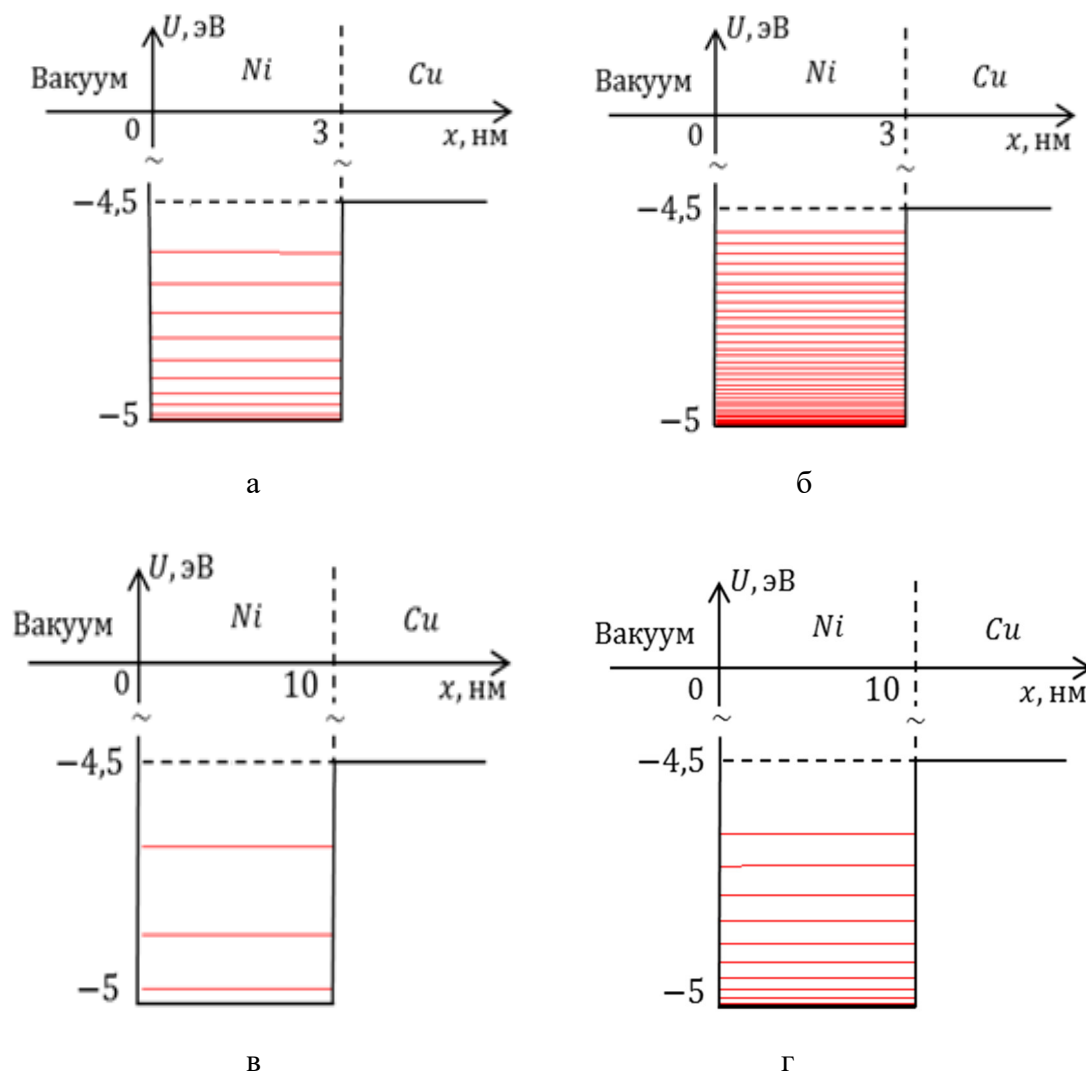
Граничные условия, следующие из требований непрерывности волновой функции и плотности потока вероятности, образуют систему уравнений:

$$\left\{ \begin{aligned} B_1 &= 0; \\ A_3 &= 0; \\ A_1 &= B_2; \\ A_2 \sin(\zeta_2 a) + B_2 \cos(\zeta_2 a) &= B_3 \exp(-\zeta_3 a); \\ \frac{\zeta_2}{m_2} (A_2 \cos(\zeta_2 a) - B_2 \sin(\zeta_2 a)) &= -\frac{\zeta_3}{m_3} B_3 \exp(-\zeta_3 a); \\ A_1 \frac{\zeta_1}{m_1} \frac{m_2}{\zeta_2} \sin(\zeta_2 a) + A_1 \cos(\zeta_2 a) &= B_3 \exp(-\zeta_3 a). \end{aligned} \right. \quad (15)$$

Решая уравнения (15), получаем дисперсионное соотношение для уровней энергии в яме, которое можно представить в виде

$$\frac{\zeta_3}{\zeta_1} - \frac{m_1}{m_3} + \left( \frac{\zeta_3}{\zeta_2} \frac{m_2}{m_3} - \frac{\zeta_2}{\zeta_1} \frac{m_1}{m_2} \right) \operatorname{tg} \zeta_2 a + 1 = 0. \quad (16)$$

Численные модели, представленные на рисунке 4, позволяют увидеть, что наличие медной подложки усиливает влияние величины эффективной массы. Расстояние между нижними энергетическими уровнями в никеле на подложке становится порядка 0,1 эВ. Для наблюдения эффектов размерного квантования необходимо условие  $kT \ll \Delta E$ , температура менее 100 К.



**Рис. 4.** Структура энергетических уровней в КЯ Ni на медной подложке с учетом толщины ямы:

а, в – положение уровней для случая  $m^* = m_e$ ; б, г – положение уровней с учетом величины  $m^*$

**Fig. 4.** Structure of energy levels in a Ni QW on a copper substrate, taking into account the well thickness:

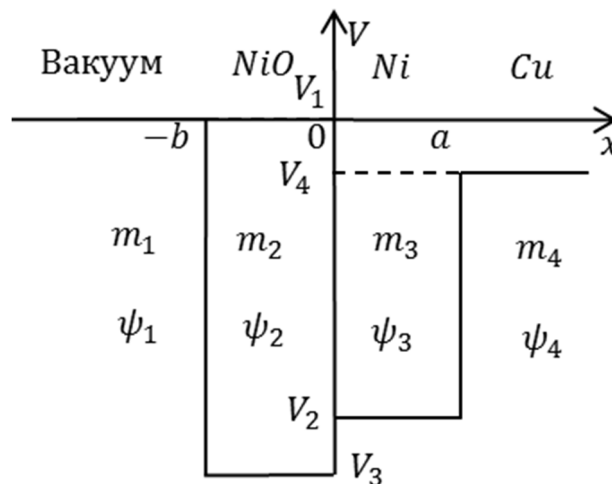
а, в – the position of the levels for the case ; б, г – position of levels taking into account the value

### Оксидированная структура NiO-Ni на подложке Cu

Рассмотрим энергетический спектр носителей заряда в сложной яме, содержащей «провал», учитывая, что эффективные массы носителей зарядов изменяются в зависимости от рельефа потенциальной ямы. Проанализируем модель, представляющую квантовую яму, состоящую из

4 областей, схема которой указана на рисунке 5. На данном рисунке  $m_i$  – эффективная масса носителей заряда в каждом из материалов структуры;  $V_1$  и  $V_2$  – положения дна зоны проводимости (для никеля) и потолка валентной зоны (для NiO);  $a$ ,  $b$  – толщины нанослоев, образующих среднюю область резонансно-туннельной структуры.





**Рис. 3.** Энергетическая диаграмма носителей заряда в слоистой структуре оксид-металл (пленка) – подложка

**Fig. 5.** Energy diagram of charge carriers in a layered structure of oxide-metal (film) – substrate

Как известно, в каждой из областей сложной ямы квантование энергии описывается уравнением

$$\frac{\hbar^2}{2m_i^*} \frac{d^2\psi_i(x)}{dx^2} + (E - V_i)\psi_i = 0, \quad (17)$$

$$i = 1, 2, \dots, 5$$

Значение потенциальных энергий и эффективных масс в выражении (17) определяются следующим образом:

$$V_i = \begin{cases} V_1, x \leq -b; \\ V_2, -b < x \leq 0; \\ V_3, 0 < x \leq a; \\ V_4, x > a; \end{cases} \quad (18)$$

$$m_i^* = \begin{cases} m_1, x \leq -b; \\ m_2, -b < x \leq 0; \\ m_3, 0 < x \leq a; \\ m_4, x > a. \end{cases} \quad (19)$$

Решение уравнения Шредингера для каждой из областей представляется в виде

$$\begin{cases} \psi_1(x) = A_1 \exp \kappa_1 x; \\ \psi_2(x) = A_2 \sin \kappa_2 x + B_2 \cos \kappa_2 x; \\ \psi_3(x) = \\ = \frac{m_3}{m_2} A_2 \frac{\kappa_2}{\kappa_3} \sin \kappa_3 x + B_2 \cos \kappa_3 x; \\ \psi_4(x) = B_4 \exp(-\kappa_4 x), \end{cases} \quad (20)$$

где

$$\begin{cases} \kappa_1 = \sqrt{2m_1(V_1 - E)} / \hbar; \\ \kappa_2 = \sqrt{2m_2(E - V_2)} / \hbar; \\ \kappa_3 = \sqrt{2m_3(V_3 - E)} / \hbar. \end{cases} \quad (21)$$

Требования конечности и непрерывности волновой функции, а также непрерывности плотности потока вероятности образуют систему уравнений:

$$\begin{cases}
B_1 = 0, A_4 = 0; \\
B_2 = B_3, A_2 \frac{\kappa_2}{m_2} = A_3 \frac{\kappa_3}{m_3}; \\
A_1 \exp(-\kappa_1 b) = \\
= A_2 \sin(-\kappa_2 b) + B_2 \cos(-\kappa_2 b); \\
\frac{1}{m_1} A_1 \kappa_1 \exp(-\kappa_1 b) = \\
= \frac{1}{m_2} (A_2 \kappa_2 \cos(-\kappa_1 b) - B_2 \kappa_2 \sin(-\kappa_2 b)); \\
A_2 \frac{m_3}{m_2} \frac{\kappa_2}{\kappa_3} \sin(\kappa_3 a) + B_3 \cos(\kappa_3 a) = \\
= B_4 \exp(-\kappa_4 a); \\
\frac{1}{m_3} \left( A_2 \frac{m_3}{m_2} \kappa_2 \cos(\kappa_3 a) - B_2 \kappa_3 \cos(\kappa_3 a) \right) = \\
= -\frac{1}{m_4} B_4 \kappa_4 \exp(-\kappa_4 a).
\end{cases} \quad (22)$$

Полученная система (22) имеет нетривиальные решения лишь тогда, когда определитель, составленный из коэффициентов при неизвестных ( $A_i, B_i, i = 1-4$ ), равен нулю. В итоге получаем выражение для определения спектра энергии в КЯ, которое удобно представить в виде

$$\begin{aligned}
& -\operatorname{tg}(\kappa_2 b) \operatorname{tg}(\kappa_3 a) \times \\
& \times \left[ \frac{\kappa_1 \kappa_3}{m_1 m_3} + \frac{m_3}{m_2^2 m_4} \frac{\kappa_2^2 \kappa_4}{\kappa_3} \right] + \\
& + \operatorname{tg}(\kappa_2 b) \left[ \frac{\kappa_1 \kappa_4}{m_1 m_4} - \frac{\kappa_2^2}{m_2^2} \right] + \\
& + \operatorname{tg}(\kappa_3 a) \left[ \frac{m_3}{m_1 m_2 m_4} \frac{\kappa_1 \kappa_2 \kappa_4}{\kappa_3} - \frac{\kappa_2 \kappa_3}{m_2 m_3} \right] + \\
& + \frac{\kappa_2 \kappa_4}{m_2 m_4} + \frac{\kappa_1 \kappa_2}{m_1 m_2} = 0.
\end{aligned} \quad (23)$$

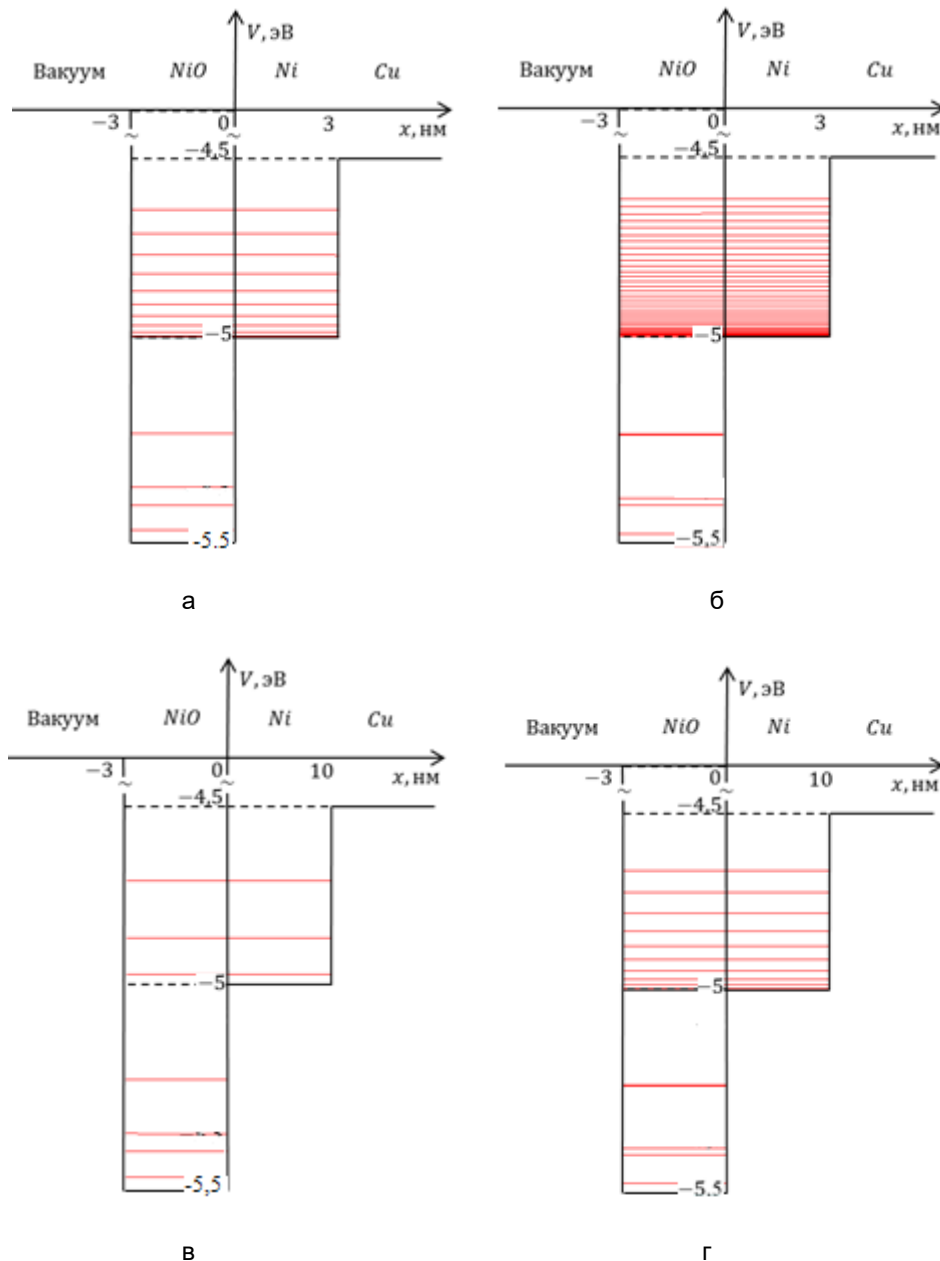
Полученные условия для квантования энергий позволяют проанализировать влияние оксидирования и толщины оксидной пленки на энергетический спектр носителей заряда в структурах нанoeлектроники.

Аналогичным способом, используя модель, указанную на рисунке 3, и уравнения (17)–(22), можно определить условия квантования для структуры NiO-Ni-Cu в области провала ( $E < V_2$ ):

$$\begin{aligned}
& \left( 1 + \frac{\kappa_4}{\kappa_3} \frac{m_3}{m_4} \right) \times \\
& \times \left[ 1 + \frac{\kappa_3}{\kappa_1} \frac{m_1}{m_3} + \right. \\
& \left. + \left( \frac{\kappa_3}{\kappa_2} \frac{m_2}{m_3} - \frac{\kappa_2}{\kappa_1} \frac{m_1}{m_2} \right) \operatorname{tg} \kappa_2 b \right] + \\
& + \left( 1 - \frac{\kappa_4}{\kappa_3} \frac{m_3}{m_4} \right) \times \\
& \times \left[ 1 - \frac{\kappa_3}{\kappa_1} \frac{m_1}{m_3} - \right. \\
& \left. - \left( \frac{\kappa_3}{\kappa_2} \frac{m_2}{m_3} + \frac{\kappa_2}{\kappa_1} \frac{m_1}{m_2} \right) \operatorname{tg} \kappa_2 b \right] \times \\
& \times \exp(-2\kappa_3 a) = 0.
\end{aligned} \quad (24)$$

Условия квантования (24) определяют спектр энергии для электронов в области  $(-b; 0)$ .

Представленное на рисунке 6 численное моделирование показывает, что толщина квантовой ямы Ni и величина эффективной массы Ni на медной подложке практически не влияет на плотность энергетических уровней в КЯ NiO. Снижение толщины пленки прогнозируемо увеличивает разность между соседними энергетическими уровнями.



**Рис. 4.** Структура энергетических уровней в КЯ оксидированной структуры NiO-Ni на подложке Cu с учетом толщины ямы: а, в – положение уровней для случая  $m^* = m_e$ ; б, г – положение уровней с учетом величины  $m^*$

**Fig. 6.** Structure of energy levels in the QW of the oxidized NiO-Ni structure on a Cu substrate, taking into account the well thickness: а, в – the position of the levels for the case; б, г – position of levels taking into account the magnitude

## Результаты и их обсуждение

Представленные выражения позволяют прогнозировать необходимую температуру в тонких магнитных пленках, не-

обходимых для наблюдения квантово-размерных эффектов. В частности, согласно полученным расчетам в нанопленках никеля ширина энергетической щели между нижними энергетическими уровнями со-

ставляет порядка 0,01 эВ. Принимая требование, что  $kT \gg \Delta E$ , получаем требование для температур  $T \leq 10$  К (для условия  $kT \approx 0,1\Delta E$ ).

Необходимо также указать, что при туннелировании через полупроводниковые частицы малых размеров заряд молекулы в течение некоторого времени (полупериода  $T/2$ ) изменяется на  $-e$ , вследствие чего происходит значительное изменение энергетической структуры. При этом положение вновь образовавшегося верхнего заполненного уровня не совпадает с нижним свободным для нейтрального кластера. Таким образом, существует неопределенность по энергии, что связано с частотным пределом использования подобных одноэлектронных приборов на молекулярных кластерах  $\omega_{\max} \approx \Delta E/\hbar$ . В случае рассматриваемых наноструктур данная величина  $\omega_{\max}$  составляет  $\sim 10^{12}$  Гц. Полученную граничную частоту можно прогнозировать за счет толщины пленки, влияния подложки и оксидной пленки по представленным в работе выражениям.

## Выводы

На основании полученных моделей можно сделать следующие выводы:

1. Учет эффективной массы ферромагнетика приводит к существенному увеличению плотности энергетических уровней

ней (по отношению к КЯ тех же размеров для немагнитных металлов)

2. Использование медной подложки приводит к увеличению плотности энергетических уровней (по отношению к изолированной пленке Ni с соответствующей толщиной). При этом толщина пленки Ni оказывает наиболее существенное влияние на распределение энергетических уровней.

3. Моделирование оксидированной структуры на медной подложке также показало высокую степень влияния эффективной массы на плотность энергетических уровней. Однако влияние отношения толщин нанослоев проявляется только в слое Ni, изменения плотности распределения энергетических уровней в КЯ NiO из проведенного моделирования не обнаружено.

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

## Список литературы

1. Фетисов Ю. К., Сигов А. С. Спинтроника: физические основы и устройства // РЭНСИТ (Радиоэлектроника. Наносистемы. Информационные технологии). 2018. Т. 10, № 3. С. 343–356. <https://doi.org/10.17725/rensit.2018.10.343>
2. Co/Ni multilayers for spintronics: High spin polarization and tunable magnetic anisotropy / S. Andrieu, T. Hauet, M. Gottwald, A. Rajanikanth, L. Calmels, A. M. Bataille [et al.] // Phys. Rev. Materials. 2018. Vol. 2, no. 6. P. 064410. <https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.2.064410>
3. Особенности магнетронного напыления тонких пленок оксида никеля для применения в составе перовскитных солнечных элементов / А. С. Агликов, Д. А. Кудряшов, А. М. Можаров, С. В. Макаров, А. Д. Большаков, И. С. Мухин // Журнал технической физики. 2019. Т. 89, вып. 3. С. 460–464. <https://doi.org/10.21883/JTF.2019.03.47186.290-18>

4. Магнитные наночастицы: методы получения, строение и свойства / С. П. Губин, Ю. А. Кокшаров, Г. Б. Хомутов, Г. Ю. Юрков // Успехи химии. 2005. Т. 74, № 6. С. 539–574. <https://doi.org/10.1070/rc2005v074n06abeh000897>
5. Fatigue behavior of freestanding nickel–molybdenum–tungsten thin films with high-density planar faults / J. Park, Y. Park, S. Choi, Z. F. Lee, G. Sim // *Nanoscale*. 2024. Vol. 16, is. 25. P. 12050. <https://doi.org/10.1039/D4NR01033G>
6. Tong B., Ichimura M. Electrochemical deposition of transparent p-Type semiconductor NiO // *Electrical Engineering in Japan*. 2018. Vol. 101, is. 2. P. 45–50. <https://doi.org/10.1002/ecj.12043>
7. Условия формирования и топография поверхности никелевых нанопленок на меди / В. В. Филиппов, С. Е. Лузянин, Е. С. Нефедова, Д. В. Токарева // Известия Юго-Западного государственного университета. Серия: Техника и технологии. 2021. Т. 11, № 3. С. 59–76
8. Исследование наноразмерных пленок никеля методом Зауэрбрея / В. Э. Суровая, Л. Н. Бугерко, Э. П. Суровый, С. В. Бин // Ползуновский вестник. 2015. Т. 2, № 4. С. 90–94.
9. Fabrication and characterization of semiconductor nickel oxide (NiO) nanoparticles manufactured using a facile thermal treatment / M. Hashem, E. Saion, N. M. Al-Hada, H. M. Kamari, A. H. Shaari, Z. A. Talib [et al.] // *Results in Physics*. 2016. Vol. 6. P. 1024–1030. <https://doi.org/10.1016/j.rinp.2016.11.031>
10. Efficient p-type doping of sputter-deposited NiO thin films with Li, Ag, and Cu acceptors / K. O. Egbo, C. E. Ekuma, C. P. Liu, K. M. Yu // *Phys. Rev. Materials*. 2020. Vol. 4. P. 104603. <https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.4.104603>
11. Moumen A., Kumarage G. C. W., Comini E. P. P-Type metal oxide semiconductor thin films: synthesis and chemical sensor applications // *Sensors*. 2022. Vol. 22, no. 4. P. 1359. <https://doi.org/10.3390/s22041359>
12. Драгунов В. П. Неизвестный И. Г., Гридчин В. А. Нанoeлектроника. Ч. 1. М.: Юрайт, 2022. 285 с.
13. Размерное квантование. Ч. 1 / В. Э. Гасумянц, С. Н. Лыков, Д. А. Пшенай-Северин, С. А. Рыков, Д. А. Фирсов // Энергетический спектр наноструктур / под ред. С. Н. Лыкова. СПб.: Изд-во политехнического ун-та, 2009. 258 с.
14. Anderson R. I. Experiments on Ge-GaAs heterojunctions // *Solid State Electronics*. 1962. Vol. 5, is. 5. P. 341–344.
15. Рембеза С. И., Рембеза Е. С., Кошелева Н. Н. Низкоразмерные структуры для микро- и нанoeлектроники. Воронеж: Воронеж. гос. техн. ун-т, 2015. 114 с.
16. Мушников Н. В. Магнетизм и магнитные фазовые переходы. Екатеринбург: Урал. федер. ун-т, 2017. 168 с.
17. Игнатенко С. А. Влияние интерфейсного s-d-рассеяния на транспорт в структурах ферромагнетик/диэлектрик/ферромагнетик // Журнал технической физики. 2006. Т. 76, вып. 11. С. 6–11. <https://doi.org/10.1134/S1063784206110028>
18. Controlled p-type to n-type conductivity transformation in NiO thin films by ultraviolet-laser irradiation / P. Gupta, T. Dutta, S. Mal, J. Narayan // *Journal of Applied Physics*. 2012. Vol. 111, no. 1. P. 013706. <https://doi.org/10.1063/1.3671412>
19. Novel NiO-based p-i-n ultraviolet photodiode / F. Sarcan, U. Dogan, A. Althumali, H. B. Vasili, L. Lari, A. Kerrigan [et al.] // *Journal of Alloys and Compounds*. 2023. Vol. 934. P. 167806. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2022.167806>
20. Landolt H., Börnstein R. Landolt-Borstein's zahlenwerte und funktionen aus physik, chemie astronomie, geophysik, thechnik. 6th ed. Vol. 2, pt. 6. Berlin: Springer-Verlag? 1959. P. 1852–1913.
21. Фоменко В. С. Эмиссионные свойства элементов и химических соединений. Киев: Наукова думка, 1981. 339 с.

22. Non-extensive statistics in free-electron metals and thermal effective mass / A. Khuntia, G. Sahu, R. Sahoo, D. P. Mahapatra, N. Barik // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 2019. Vol. 523. pp. 852–857. <https://doi.org/10.1016/j.physa.2019.02.043>
23. Kittel C. *Introduction to solid state physics*. 8th ed. John Wiley & Sons, Inc., 2005. 700 p.

## References

1. Fetisov Yu.K., Sigov A.S. Spintronics: physical principles and devices. *RENSIT (Radioelektronika. Nanosistemy. Informatsionnye tekhnologii) = RENSIT (Radio electronics. Nanosystems. Information technologies)*. 2018;10(3):343–356. (In Russ.) <https://doi.org/10.17725/rensit.2018.10.343>
2. Andrieu S., Hauet T., Gottwald M., Rajanikanth A., Calmels L., Bataille A. M., et al. Co/Ni multilayers for spintronics: High spin polarization and tunable magnetic anisotropy. *Physical Review Materials*. 2018;2(6):064410. <https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.2.064410>
3. Aglikov A.S., Kudryashov D.A., Mozharov A.M., Makarov S.V., Bolshakov A.D., Mukhin I.S. Sputtering of Nickel oxide thin films for use in perovskite solar cells. *Zhurnal tekhnicheskoi fiziki = Technical Physics*. 2019;64(3):422–426. <https://doi.org/10.1134/S1063784219030022>
4. Gubin S.P., Koksharov Yu.A., Khomutov G.B., Yurkov G.Yu. Magnetic nanoparticles: preparation, structure and properties. *Uspekhi khimii = Russian Chemical Reviews*. 2005;74(6):489–520. <https://doi.org/10.1070/rc2005v074n06abeh000897>
5. Park J., Park Y., Choi S., Lee Z.F., Sim G. Fatigue behavior of freestanding Nickel–Molybdenum–Tungsten thin films with high-density planar faults. *Nanoscale*. 2024;16(25):12050. <https://doi.org/10.1039/D4NR01033G>
6. Tong B., Ichimura M. Electrochemical deposition of transparent p-type semiconductor NiO. *Electrical Engineering in Japan*. 2018;101(2):45–50. <https://doi.org/10.1002/ecj.12043>
7. Filippov V.V., Luzyanin S.E., Nefedova E.S., Tokareva D.V. Formation conditions and surface topography of nickel nanofilms on copper. *Izvestiya Yugo-Zapadnogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya: Tekhnika i tekhnologii = Proceedings of the Southwest State University. Series: Engineering and Technologies*. 2021;11(3):59–76. (In Russ.)
8. Surovaya V.E., Bugerko L.N., Surovy E.P., Bin S.V. Study of nanosized nickel films by the Sauerbrey method. *Polzunovskij vestnik = Polzunovsky Bulletin*. 2015;2(4):90–94. (In Russ.)
9. Hashem M., Saion E., Al-Hada N.M., Kamari H.M., Shaari A.H., Talib Z.A., et al. Fabrication and characterization of semiconductor nickel oxide (NiO) nanoparticles manufactured using a facile thermal treatment. *Results in Physics*. 2016;6:1024–1030. <https://doi.org/10.1016/j.rinp.2016.11.031>
10. Egbo K.O., Ekuma C.E., Liu C.P., Yu K.M. Efficient p-type doping of sputter-deposited NiO thin films with Li, Ag, and Cu acceptors. *Physical Review Materials*. 2020;4(10):104603. <https://doi.org/10.1103/PhysRevMaterials.4.104603>
11. Moumen A., Kumarage G.C.W., Comini E. P. P-Type metal oxide semiconductor thin films: synthesis and chemical sensor applications. *Sensors*. 2022;22(4):1359. <https://doi.org/10.3390/s22041359>
12. Dragunov V.P., Neizvestny I.G., Gridchin V.A. *Nanoelectronics. Part 1*. Moscow: Yurait; 2022. 285 p. (In Russ.)
13. Gasumyants D.E., Lykov S.N., Pshenay-Severin D.A., Rykov S.A., Firsov D.A. Dimensional quantization. Part 1. In: Lykov S. N. (ed.) *Energy spectrum of nanostructures*. St. Petersburg: Izd-vo Polytechnicheskogo un-ta; 2009. 258 p. (In Russ.)
14. Anderson R.I. Experiments on Ge-GaAs heterojunctions. *Solid State Electronics*. 1962;5(5):341–344.

15. Rembeza S.I., Rembeza E.S., Kosheleva N.N. Low-dimensional structures for micro- and nanoelectronics. Voronezh: Voronezh. gos. tekhnicheskii un-t; 2015. 114 p. (In Russ.)
16. Mushnikov N.V. Magnetism and magnetic phase transitions. Ekaterinburg: Ural feder. un-ta; 2017. 168 p. (In Russ.)
17. Ignatenko S.A. Effect of interfacial s-d scattering on transport in structures ferromagnet/insulator/ferromagnet. *Zhurnal tekhnicheskoi fiziki = Technical Physics*. 2006;5(11):1398–1404. (In Russ.) <https://doi.org/10.1134/S1063784206110028>
18. Gupta P., Dutta T., Mal S., Narayan J. Controlled p-type to n-type conductivity transformation in NiO thin films by ultraviolet-laser irradiation. *Journal of Applied Physics*. 2012;111(1):013706. <https://doi.org/10.1063/1.3671412>
19. Sarcan F., Dogan U., Althumali A., Vasili H.B., Lari L., Kerrigan A., et al. Novel NiO-based p-i-n ultraviolet photodiode. *Journal of Alloys and Compounds*. 2023;934:167806. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2022.167806>
20. Landolt H., Börnstein R. Landolt-Bornstein's Zahlenwerte und Funktionen aus Physik, Chemie Astronomie, Geophysik, Thechnik. 6th ed. Vol. 2, pt. 6. Berlin: Springer-Verlag; 1959. P. 1852–1913.
21. Fomenko V.S. Emission properties of elements and chemical compounds. Kyiv: Naukova Dumka; 1981. 339 p. (In Russ.)
22. Khuntia A., Sahu G., Sahoo R., Mahapatra D.P., Barik N. Non-extensive statistics in free-electron metals and thermal effective mass. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 2019;523:852-857. <https://doi.org/10.1016/j.physa.2019.02.043>
23. Kittel C. Introduction to solid state physics. 8th ed. John Wiley & Sons, Inc; 2005. 700 p.

---

### Информация об авторах / Information about the Authors

**Родионова Анастасия Алексеевна**, аспирант кафедры физики, радиотехники и электроники, Елецкий государственный университет имени И. А. Бунина, г. Елец, Российская Федерация, e-mail: [nastya97zhidkova@yandex.ru](mailto:nastya97zhidkova@yandex.ru), ORCID: 0009-0000-4051-811X

**Anastasiia A. Rodionova**, Post-Graduate Student of the Department of Physics, Radio Engineering and Electronics, Yelets State University named after I. A. Bunin, Yelets, Russian Federation, e-mail: [nastya97zhidkova@yandex.ru](mailto:nastya97zhidkova@yandex.ru), ORCID: 0009-0000-4051-811X

**Филиппов Владимир Владимирович**, доктор физико-математических наук, профессор кафедры математики и физики, Липецкий государственный педагогический университет имени П. П. Семенова-Тян-Шанского; профессор кафедры естественных и технических наук, Московский государственный университет технологий и управления имени К. Г. Разумовского (Первый казачий университет), Липецкий казачий институт технологий и управления (филиал), г. Липецк, Российская Федерация, e-mail: [wwfilippow@mail.ru](mailto:wwfilippow@mail.ru), ORCID: 0000-0003-4323-351X

**Vladimir V. Filippov**, Doctor of Science (Physics and Mathematics), Professor of the Department Mathematics and Physics, Lipetsk State Pedagogical University named after P.P. Semenov-Tyan-Shansky; Professor of the Department of Natural and Technical Sciences, Moscow State University of Technologies and Management named after K.G. Razumovsky (First Cossack University), Lipetsk Branch, Lipetsk, Russian Federation, e-mail: [wwfilippow@mail.ru](mailto:wwfilippow@mail.ru), ORCID: 0000-0003-4323-351X