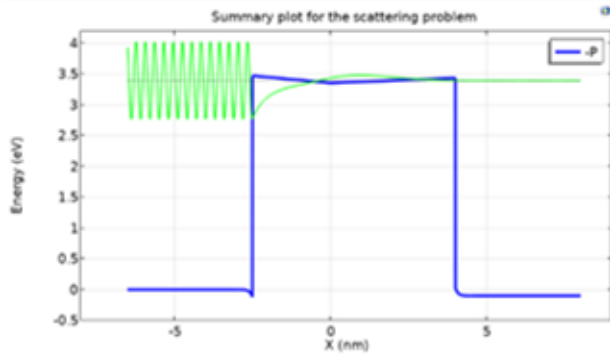


## Rezultate Etapa 1 (2021) - selectie

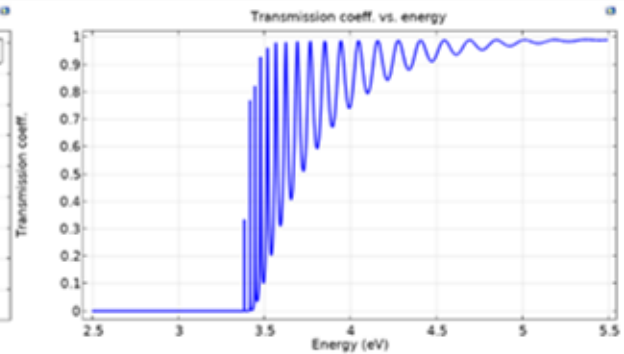
### 1. Simulări prin metoda elementului finit ale transportului electronic

Simulările bazate pe FEM (Finite Element Method) ale efectului de electrorezistență tunel (TER) în joncțiuni feroelectrice ideale (FTJ) cu bariere simple precum și compozite, au fost efectuate utilizând software-ul COMSOL Multiphysics. Aceste simulări utilizează modelul Thomas-Fermi și transportul de electroni prin barieră prin tunelare dependentă de tensiune. Coeficientul de transmisie prin barieră, în funcție de energia electronilor, este calculat pentru ambele direcții ale polarizării feroelectrice (P- și P+).

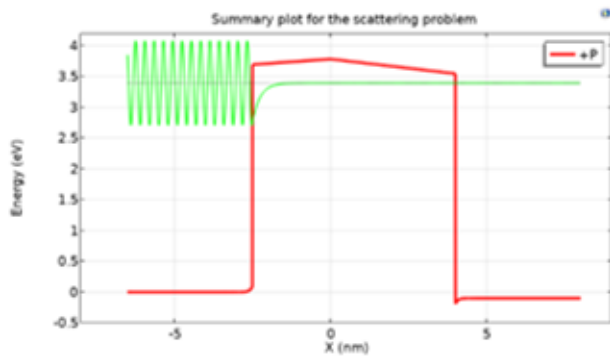
#### Exemplu de FTJ cu trei interfețe, cu barieră compozită (feroelectric și un dielectric nepolar)



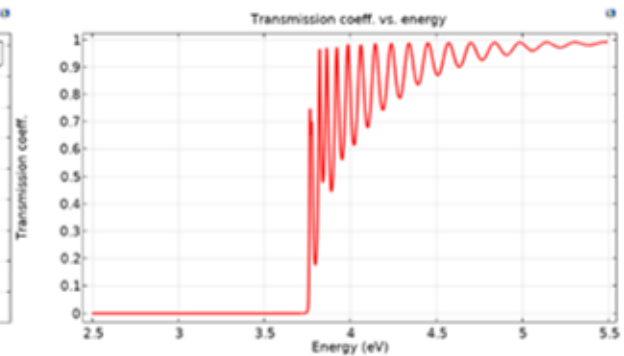
*Energy band diagram for -P polarization*



*Transmission coefficient through -P barrier*

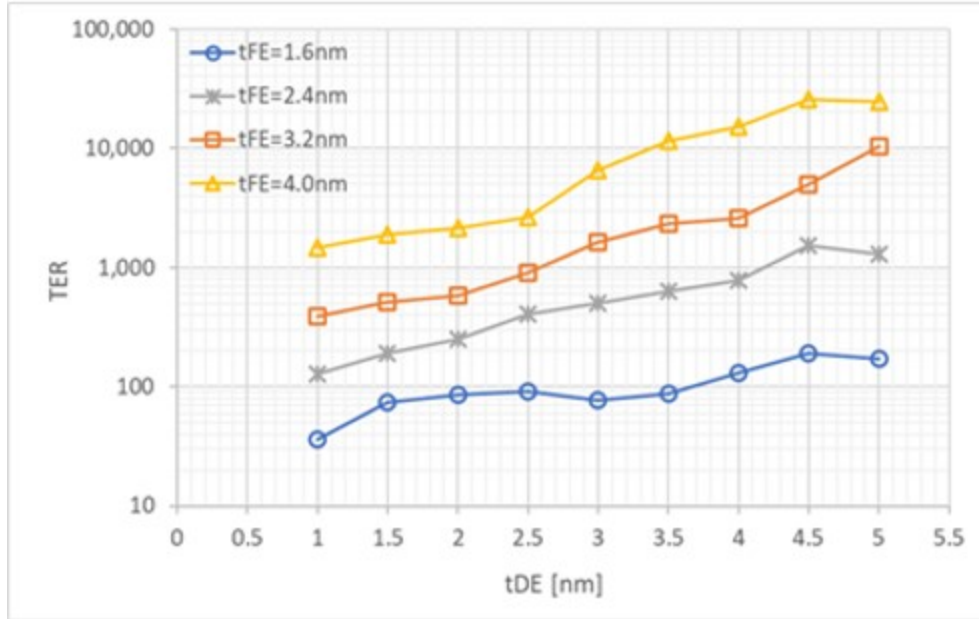


*Energy band diagram for +P polarization*



*Transmission coefficient through +P barrier*

#### Exemplu de simulare parametrizată pe sistemul SRO/STO/BTO/SRO



Coeficientul TER simulat în funcție de grosimile feroelectric-dielectric nepolar.

## 2 . Calcule DFT pe joncțiuni tunel multiferoice (MFTJs)

În prima etapă a proiectului, am urmarit predicția proprietăților de transport ale MFTJ în dependența lor de natura chimică a electrozilor, magnetism, structura și grosimea barierei de potențial, precum și de proprietățile regiunilor de interfață. In modelele/scenariile studiate nu au fost introduse defecte/dopanți și nici deformari induse extern ale stratului feroelectric.

În cele ce urmează prezentăm unele rezultate obținute prin calcule *first principles* pe joncțiuni SRO/BTO/SRO, cu electrozi magnetici (parte a studiului privind sistemul SRO/BTO/STO/SRO).

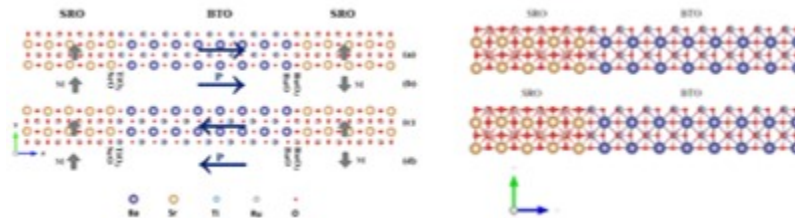


Figura 1. Modelul unei joncțiuni SRO/BTO/SRO care arată cele patru stări rezultate prin cuplajul dintre polarizarea feroelectrică,  $P$ , și momentele magnetice,  $M$ , ale electrozilor, (panoul din stânga); Modele de joncțiune cu barieră compozită, (panoul din dreapta).

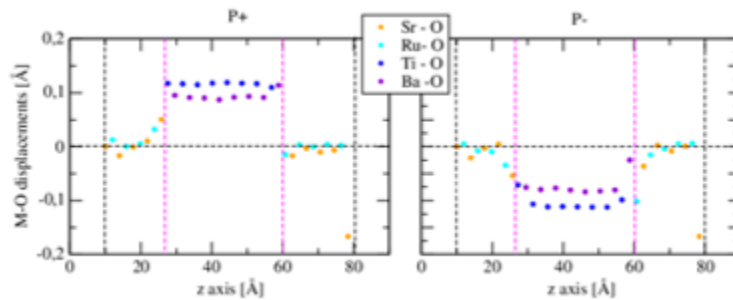


Figura 2. Deplasările anion-cation (MO) strat cu strat, dupa axa z în heterostructurile relaxate SRO/BTO/SRO. P+/- reprezintă polarizarea orientată de-a lungul direcțiilor +/- z, respectiv.

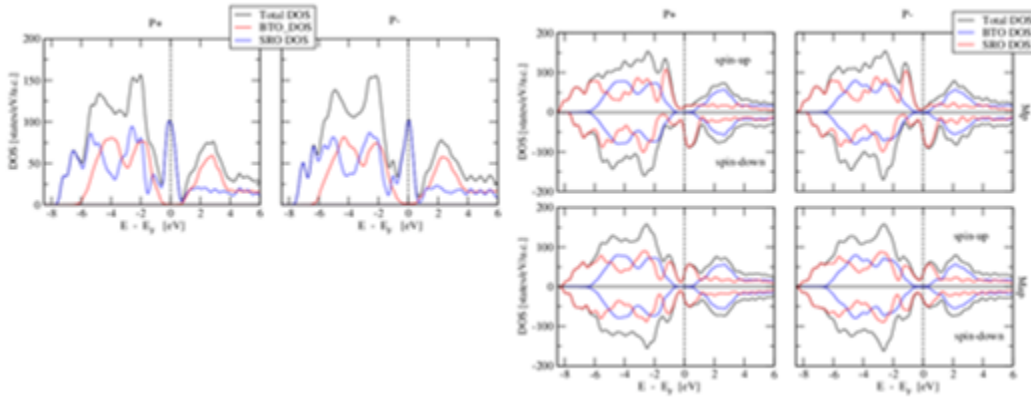


Figura 3. PDOS și DOS total pentru SRO nemagnetic (panoul din stânga) și SRO magnetic (panoul din dreapta).

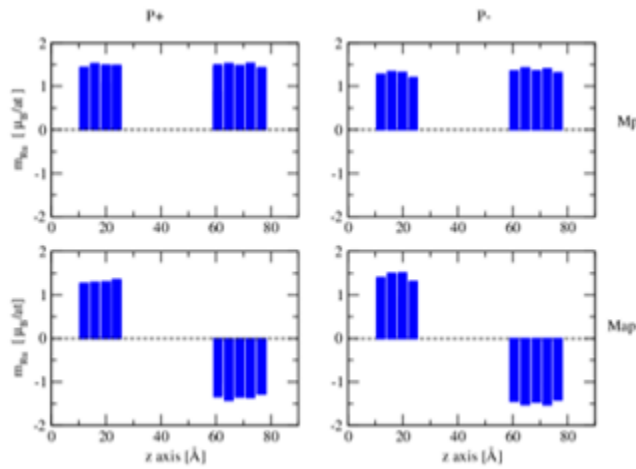


Figura 4. Momentul magnetic Ru(3d) mediu, strat cu strat.

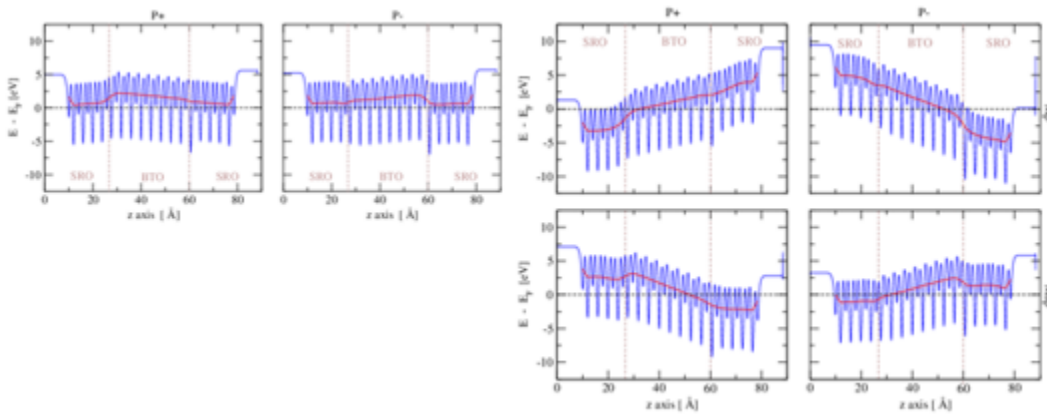
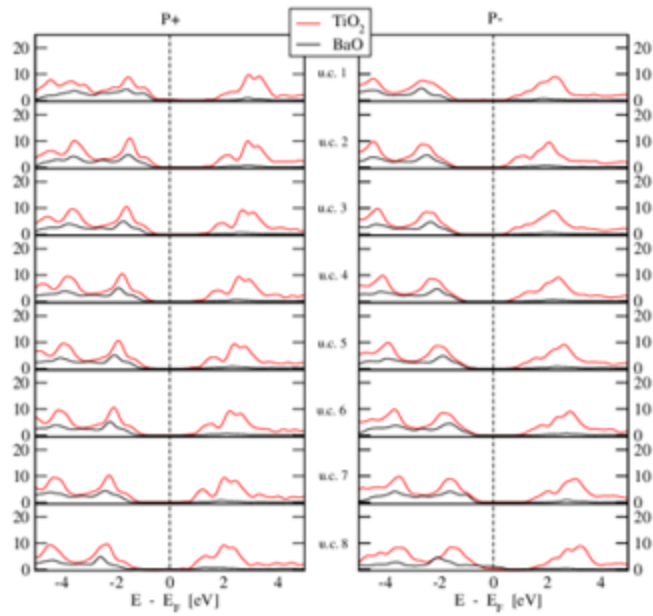
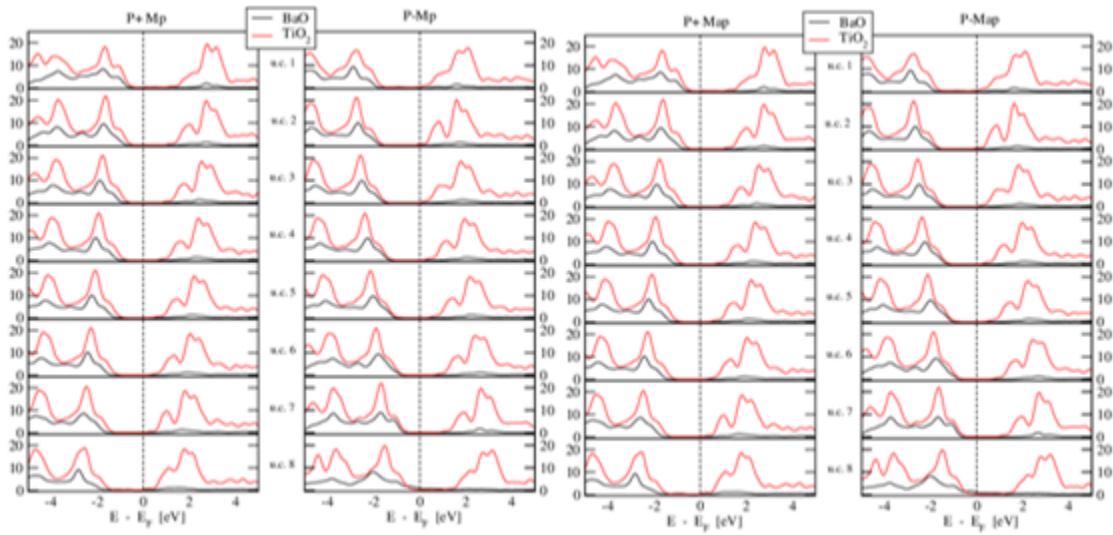


Figura 5. Profilul potențialului electrostatic,  $V(z)$ , pentru cazul nemagnetic (panoul din stânga) și cazul magnetic, (panoul din dreapta). Media plană este în albastru, iar media macroscopică (nanomoothed) în roșu. Se poate observa forma barierei de potențial, trapezoidală în cazul cu Ru nemagnetic, și triunghiulară

pentru Ru magnetic.



(a)



(b)

(c)

Figura 6. DOS strat cu strat pentru SRO nemagnetic (a) și SRO magnetic cu orientările relative  $M(\text{Ru})$  paralela (b) și antiparalela (c). Energia Fermi este fixata la zero.

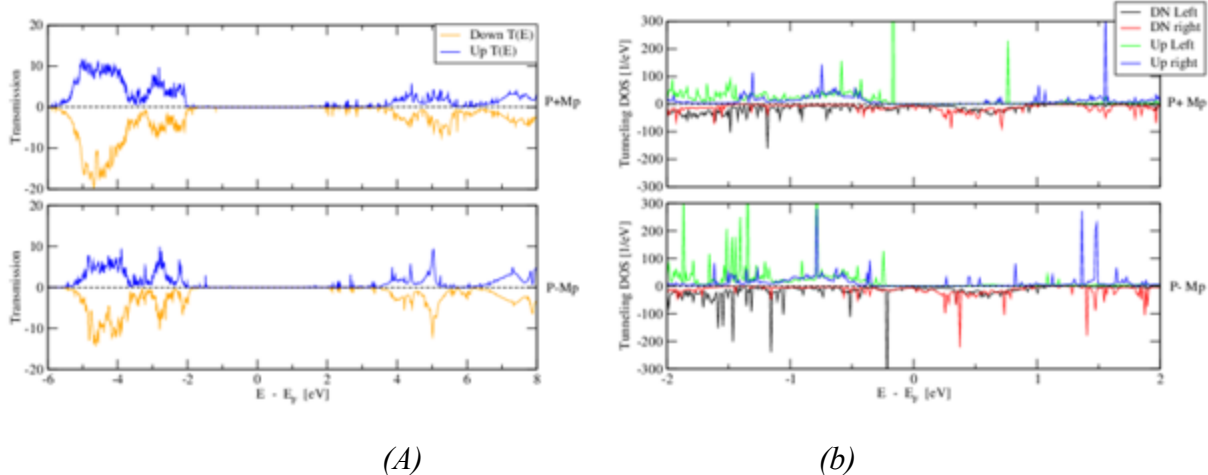


Figura 7. Transmisia prin tunelare (a), și DOS prin tunelare (b), pentru o joncțiune test SRO/BTO/SRO.

### 3. Modelare prin metode semi-empirice utilizand formalismul functiilor Green de neechilibru (NEGF).

O joncțiune tunel feroelectrică (FTJ) poate fi schematizata ca un strat feroelectric (FE) ultrasubțire aflat între doi electrozii metalici, așa cum este prezentat în Fig. 1.

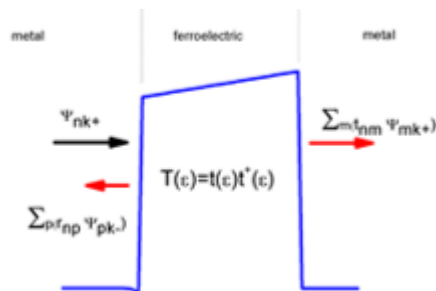


Fig. 1. Un profil generic al barierei într-o joncțiune tunel feroelectrică. Un electron cu funcția de undă  $\Psi_{nk+}$  în banda  $n$  și având vectorul de undă  $k$ , este împrăștiat de barieră într-o undă reflectată și o undă transmisă. Problema este tratată în formalismul funcțiilor Green de neechilibru.

Modelarea se realizează în două etape:

1. Calcule electrostatice ale potențialului de barieră luând în considerare: polarizarea electrică a stratului feroelectric, ecranarea finită a electrozilor metalici în aproximația Thomas-Fermi, și discontinuitățile de benzi între straturile adiacente.

2. Calcule de transport cuantic utilizand formalismul funcțiilor Green de neechilibru.

Am implementat o procedura numerică care ne permite să realizăm procesul de modelare în cele două etape menționate mai sus [1].

În această abordare densitatea de curent este calculată cu o formulă de tip Landauer-Büttiker [2]

$$J = \frac{-e}{2\pi^2\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d^2k_{\parallel} \int_0^{\infty} T(\vec{k}_{\parallel}, E) (f_1(E) - f_2(E)) dE$$

unde  $h$  este constanta Planck,  $T$  este coeficientul de transmisie, iar  $f_{1,2}$  sunt distribuțiile Fermi-Dirac ale electrozilor. Coeficientul de transmisie  $T$  este calculat prin metoda NRGF [1, 2]. Formula de mai sus este capabilă să prezică comportamentul neliniar al caracteristicilor curent-tensiune (I-V). Mai mult, pentru tensiuni de polarizare mici și la 0 K, devine formula Landauer pentru conductanță [2]

$$G = \frac{2e^2}{h} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^2 k_T}{(2\pi)^2} t(k_T, E_F)$$

unde  $G$  este conductanța pe unitate de suprafață. În continuare, prezentăm rezultatele obținute pe sistemul Co/BaTiO3/La0.67Sr0.33MnO3, pentru care există date raportate din experiment, astfel fiind folosit ca referință test pentru procedura noastră numerică [1,3]. Modelul de FTJ constă dintr-o barieră feroelectrică BaTiO3 de 2nm latime, intercalată între Co și La0.67Sr0.33MnO3. Ceilalți parametri sunt indicați în inserția din Fig. 2.a. Pentru a calcula curentul, curba I-V, a fost considerată o jonctiune cu diametrul  $D=700$  nm.

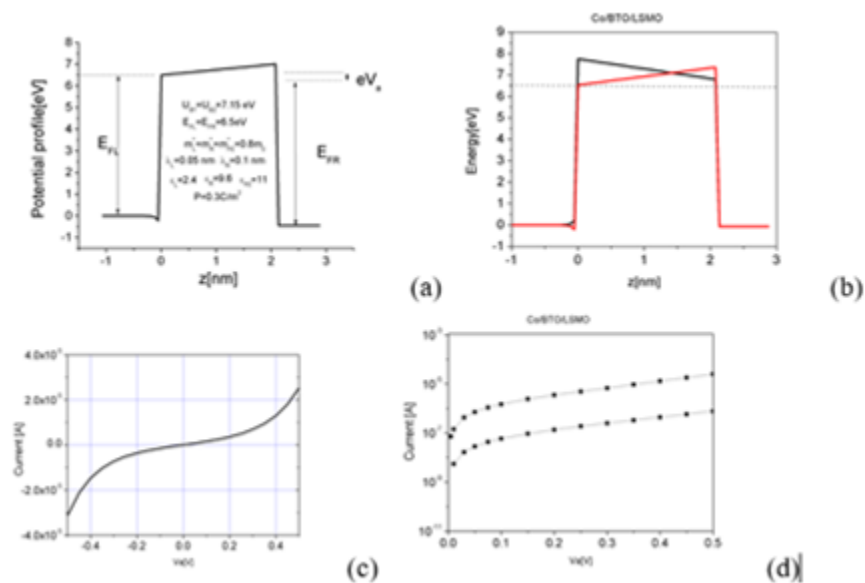


Fig. 2. Rezultate numerice pentru un dispozitiv Co/BTO/LSMO: (a) Profilul barierei cu parametrii fizici care descriu întreaga jonctiune; (b) Profilul barierei la  $V_a=0$  V pentru ambele direcții de polarizare  $P$  a feroelectricului. Linia punctată indică nivelul Fermi; (c) curba IV pentru polarizare cu tensiune pozitivă și negativă  $V_a=\pm 0.5$  V, în cazul  $+P$ ; (d) Curba IV în scară semilogaritmică atât pentru  $+P$  (curba superioară) cât și pentru  $-P$  (curba inferioară).

[1] S.C. Chang et al., Phys. Rev. Appl., **7**, 024005-12 (2017).

[2] S. Datta, *Quantum Transport: Atom to Transistor*, Cambridge University Press.

[3] A. Chanthbouala et al., Nat. Nanotechnology **7**, 101 (2012).