

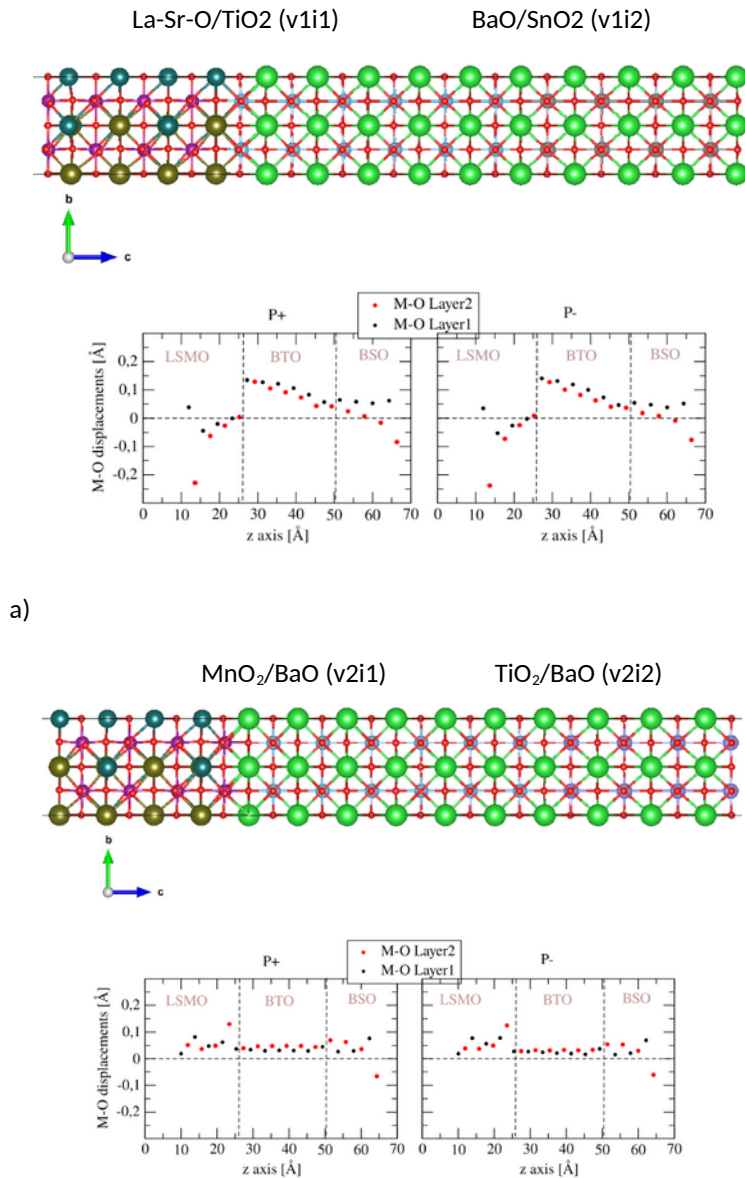
Rezultatele obtinute in Etapa 3 a Proiectului

1. Studii DFT

1.1 Efectul vacantelor de oxigen (VO) asupra conductiei prin tunelare cuantica in interfete La_{0.7}Sr_{0.3}MnO₃/BaTiO₃/BaSnO₃ (001).

Sistemele studiate prezinta interfetele:

- varianta v1, La-Sr-O / TiO₂ (v1i1), si BaO / SnO₂ (v1i2);
- varianta v2, MnO₂ / BaO (v2i1), si TiO₂ / BaO (v2i2).



a)

b)

Figura 1. Heterostructurile LSMO/BTO/BSO cu interfetele: La-Sr-O/TiO₂ (v1i1) si BaO/SnO₂ (v1i2), panelul de sus in (a), si deplasari atomice relative M-O, panelul de jos in (a); Interfetele MnO₂/BaO (v2i1) si TiO₂/BaO (v2i2), panelul de sus in (b) si deplasari atomice relative M-O, panelul jos in (b).

Codul culorilor: **La** albastru inchis, **Sr** auriu, **Ba** verde, **Mn** violet, **Ti** albastru deschis, **Sn** gri inchis si **O** rosu. Codul este unic pentru toate structurile din sectiunea DFT.

Au fost considerate doua concentratii ale VO si cinci scenarii de localizare a lor in plane x-y paralele la interfete, notate prin -I2, -I1, I1 si I2, simetrice fata de interfata geometrica. A fost calculata energia de formare a defectelor pentru cele doua orientari ale polarizarii, **P**, dupa axa z, pentru a stabili care sunt scenariile cele mai probabile. De asemenea, au fost calculate distributiile de sarcina si potential electrostatic pentru interfetele cu si fara defecte pentru a determina extensia regiunii spatiale afectate. In continuare, prezentam unele rezultatele pentru efectele VO asupra densitatii de sarcina la interfete in cazul scenariului s1 si P+.

In figurile 2(a)-5(a) sunt redade modelele atomistice ale interfetelor, densitatea de sarcina 2D in planele li este prezentata in figurile 2(b)-5(b), iar diferenta $\Delta\rho = \rho(0) - \rho(d)$ in figurile 2(c)-5(c). La interfata v1i1, figura 2(a), se observa ca prin relaxare structurala modelul de inclinare al octaedrelor MnO6 din LSMO se continua cu inclinarea octaedrelor TiO6 din BTO, dar se diminueaza pe distanta a 3 celule unitate BTO. Aceasta devine evident la interfata v1i2, figura 3(a), unde se observa octaedre liniare in BTO si BSO. Ca urmare ne asteptam la energii de formare diferite ale VO la interfete in feroelectric. Pozitia VO este revelata in ambele seturi de ploturi 2D din figurile 2(b)-5(b) si 2(c)-5(c), in timp ce $\Delta\rho$ arata si faptul ca prezenta acestora afecteaza sensibil numai prima celula unitate de o parte si cealalta a interfetelor.

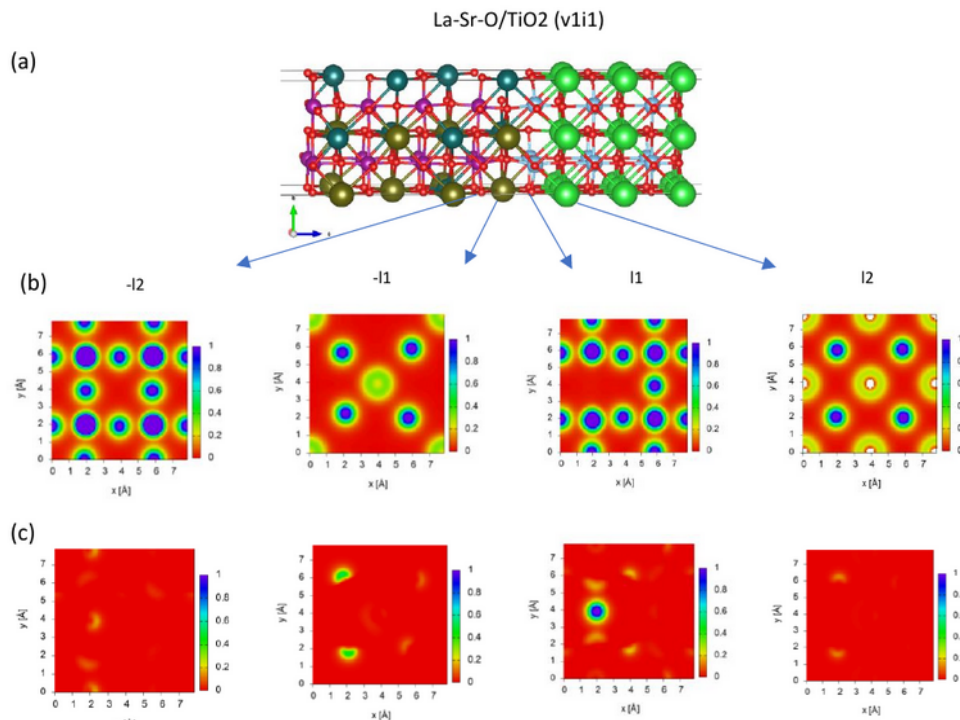


Figura 2. Interfata La-Sr-O/TiO2 (i1) panelul de sus; ρ 2D in planele (x,y): -I2, -I1, I1, I2 perpendiculare pe axa z, la interfata defectata in scenariul S1, panelul din mijloc; $\Delta\rho = \rho(0) - \rho(d)$ 2D, panelul de jos.

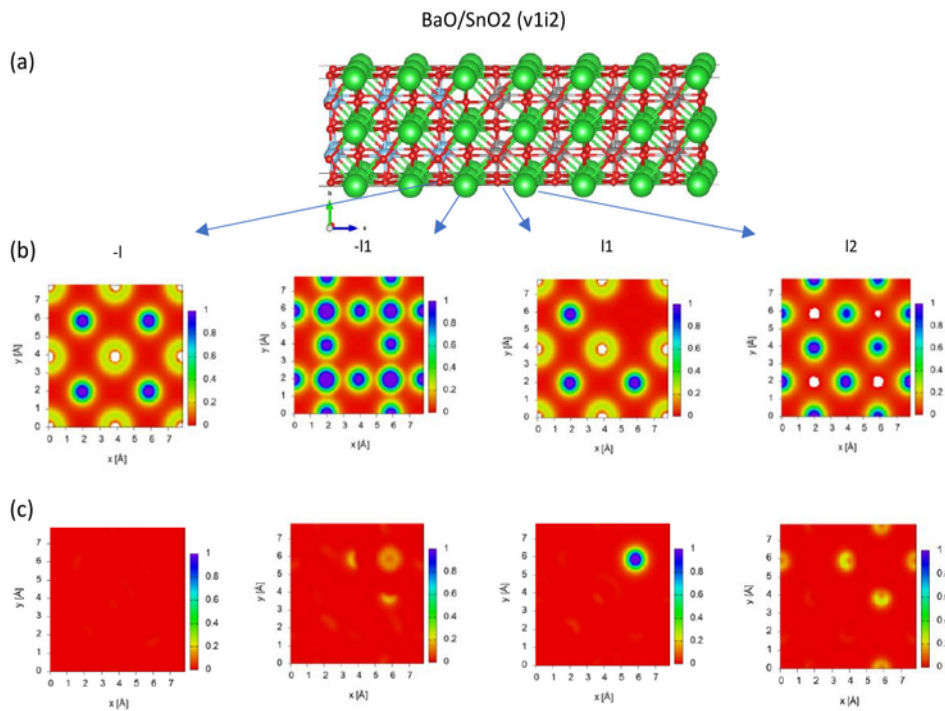


Figura 3. Interfata BaO/SnO₂ (v1i2) panelul de sus; ρ 2D in planele (x,y): -12,-11, l1, l2 perpendiculare pe axa z, la interfata defectata in scenariul S1, panelul din mijloc; $\Delta\rho = \rho(0) - \rho(d)$ 2D, panelul de jos.

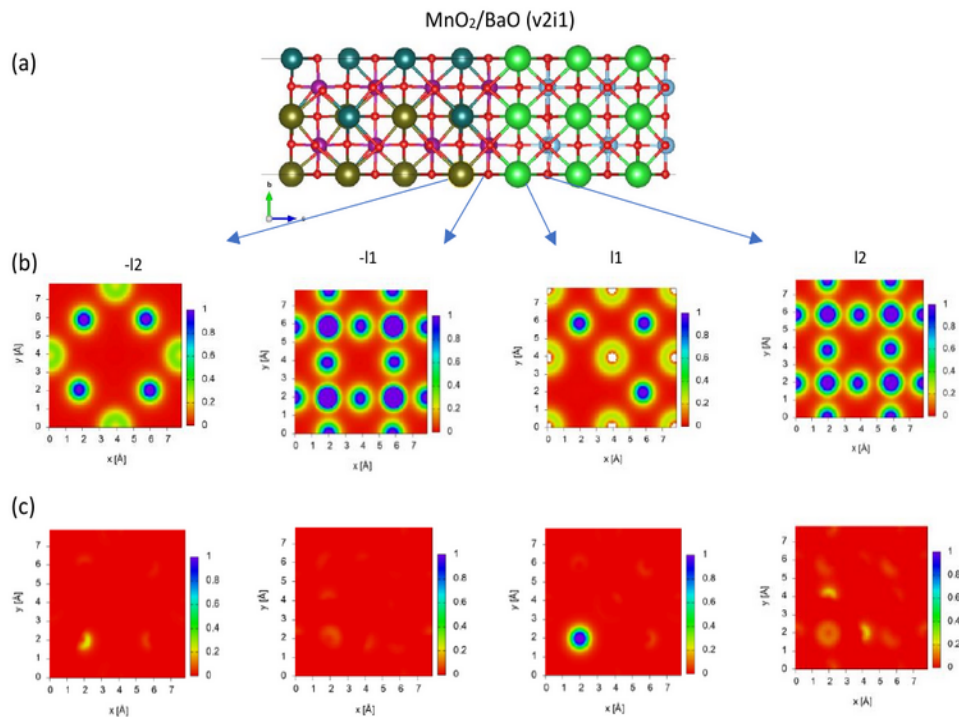


Figura 4. Interfata MnO₂/BaO (v2i1) panelul de sus; ρ 2D in planele (x,y): -12,-11, l1, l2 perpendiculare pe axa z, la interfata defectata in scenariul S1, panelul din mijloc; $\Delta\rho = \rho(0) - \rho(d)$ 2D, panelul de jos.

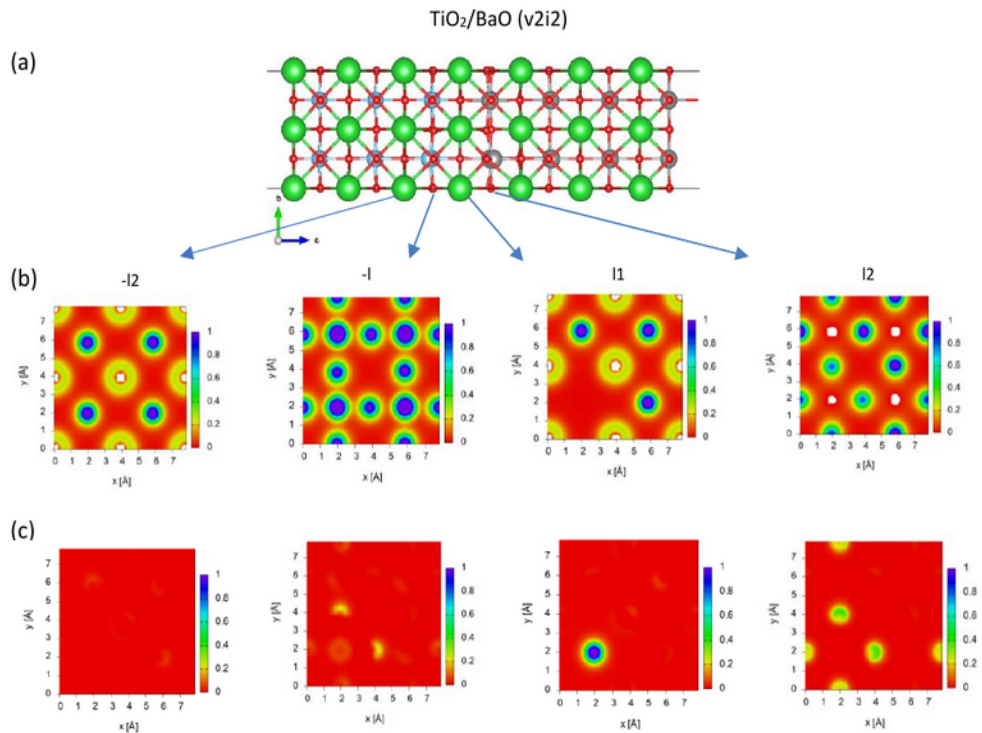


Figura 5. Interfata TiO_2/BaO ($v2i2$) panelul de sus; p 2D in planele (x,y) : $-l2, -l1, l1, l2$ perpendiculare pe axa z , la interfata defectata in scenariul $S1$, panelul din mijloc; $\Delta\rho = \rho(0) - \rho(d)$ 2D, panelul de jos.

Un prim rezultat deosebit al acestui studiu il reprezinta elaborarea strategiei pentru evaluarea factorilor de performanta TER si TMR ale FTJs cu defecte punctuale la interfete. Aceasta strategie a fost aplicata considerand vacante de oxigen la interfete in sistemul LSMO/BTO/BSO. Metoda propusa este complexa si general aplicabila pentru diverse tipuri de defecte punctuale de interfata in dispozitive FTJ, fie ca sunt vacante cationice sau anionice, interstitiali, defecte anti-site, sau ion-intermixing.

1.2 Rezultate deosebite privind transportul prin tunelare cuantica in jonctiuni SRO/BTO/m-STO/SRO.

- Am aratat ca valori mari, ($>10^4$) ale TER si TMR, pot coexista in aceste heterostructuri cu interfete magnetoelectrice.
- Transmisia se realizeaza in principal cu polarizare de spin negativa, figurile 1.a-c. Semnul polarizarii poate fi controlat, Tabelul 4, prin schimbarea orientarii relative a magnetizarii electrozilor si varierea grosimii dielectricului STO.
- Cuplajul magnetoelectric la interfete nu este suficient de puternic incat efectul TMR sa fie controlat prin comutarea polarizarii, desi feromagnetismul in electrozii SRO este robust. Starea fundamentala este cea cu orientarea relativa antiparalela a magnetizarii in electrozi pentru $m(\text{STO})=0$, si starea cu orientarea relativa paralela a magnetizarii pentru $m(\text{STO})= 2$ si 4.

Table 3. Conductance, G , (in $G_0 = e^2/h$ units), $TER = (G_{high} - G_{low})/G_{low}$, and $TMR = (G_p - G_{ap})/G_{ap}$ values.

BTO	G^+	G^-	TER [%]
NM	7.77E-13	5.84E-13	33
Mp	1.06E-13	5.87E-13	455
Map	3.28E-14	4.10E-16	7907
	G_p	G_{ap}	TMR [%]
P+	1.06E-13	3.28E-14	223
P-	5.87E-13	4.10E-16	1.43E+05
BTO/2STO	G^+	G^-	TER [%]
NM	6.36E-10	9.12E-07	1.43E+05
Mp	2.55E-12	7.53E-15	3.38E+04
Map	2.07E-18	3.68E-18	78
	G_p	G_{ap}	TMR [%]
P+	2.55E-12	2.07E-18	>1.E+06
P-	7.53E-15	3.68E-18	2.05E+05
BTO/4STO	G^+	G^-	TER [%]
NM	2.10E-16	4.42E-13	2.09E+05
Mp	9.98E-19	8.78E-17	8707
Map	6.27E-14	2.71E-19	> 1.E+06
	G_p	G_{ap}	TMR [%]
P+	9.98E-19	6.27E-14	100
P-	8.78E-17	2.71E-19	3.23E+04

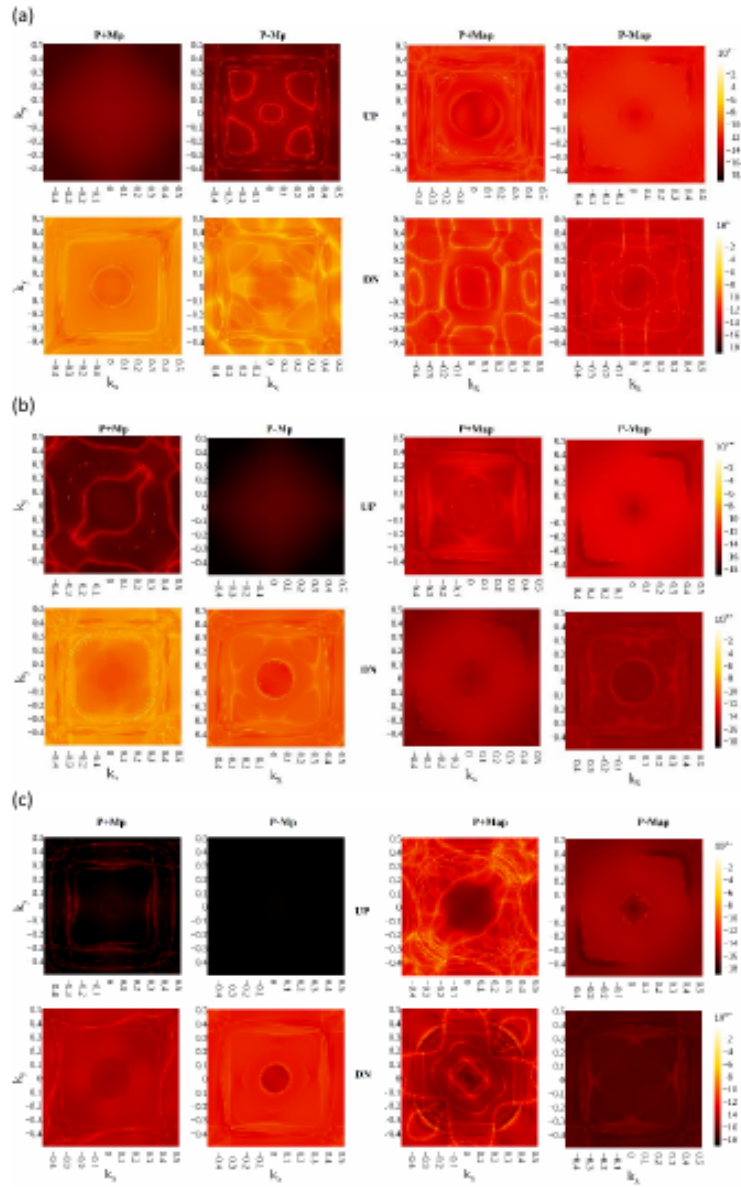


Figure 1. Spin-resolved transmission 2D maps at Fermi energy and k_y for $m=0$ (a), $m=2$ (b) and $m=4$, (c) SRO/BTO/mSTO/SRO heterostructures.

Tabel 4. Valori ale polarizării transmisiei în heterostructuri SRO/BTO/mSTO/SRO.

Polarizare	SRO/BTO/mSTO/SRO		
	m=0	m=2	m=4
P+Mp	-1.00	-0.99	-0.99
P-Mp	-1.00	-1.00	-1.00
P+Map	-0.62	0.84	0.92
P-Map	-0.72	0.96	0.99

2. Rezultate prin simulări de mediu continuu (FEM)

2.1 Efectul deformării mecanice (*strains*) asupra performanțelor heterostructurilor FTJ, într-un model de mediu continuu

În modelul de mediu continuu al unei heterostructuri FTJ, studiul efectelor de deformare mecanică (elastica) a stratului feroelectric asupra TER și a densităților de curent se realizează prin intermediul parametrilor modelului dependenți de *strain*. Modelul și metodologia pentru calculul densităților de curent (J_{ON} și J_{OFF}) și a coeficientului TER în funcție de acești parametri, au fost tratate în etapa 1 a proiectului.

Pentru acest studiu am considerat o heterostructură FTJ cu 2 interfețe și cu electrozi diferiți, de tip *conductor_1 / feroelectric / conductor_2*. În acest caz, asimetria heterostructurii sau conductanța electrică diferită la schimbarea sensului polarizării feroelectricului este asigurată de valorile diferite ale lungimii Thomas-Fermi în cei doi conductori. Calculul densităților de curent și ale coeficientului TER presupune cunoașterea valorilor celor 13 parametri. Totuși sensibilitatea funcției $TER = F(P_r, \lambda_{TF}, \epsilon_r^{EL}, \epsilon_r^{FE}, m_{EL}^*, m_{FE}^*, E_F, U_{FE})$ este diferită la variația fiecăruia dintre parametri, cei mai importanți fiind, din acest punct de vedere, polarizarea feroelectricului, P , și permitivitatea acestuia, ϵ_r^{FE} , [1].

Deoarece $PbTiO_3$ este unul dintre cele mai studiate materiale feroelectrice, atât din punct de vedere teoretic cât și experimental, avem la dispoziție datele necesare pentru calculul dependenței de *strain* a polarizării și de asemenea, pentru calculul *strain*-ului suportat de $PbTiO_3$ în funcție de câteva substraturi pe care este depus, determinând orientativ domeniul de variație al acestuia.

$PbTiO_3$ pe substrat $SrTiO_3$, suportă un *strain* compresiv de 1.5 % ($\epsilon = -0.015$).

$PbTiO_3$ pe substrat $Rh(100)$, rezultă un *strain* compresiv de 1.9 % ($\epsilon = -0.019$).

2.2 Simularea unor heterostructuri FTJ cu două interfețe sub acțiunea *strain*-ului

Pentru acest studiu am considerat o heterostructură cu dimensiunile straturilor (grosimi) și proprietățile electrozilor fixe, dar cu 3 feroelectrice diferiți ($PbTiO_3$, HfO_2 , $BaTiO_3$), a căror polarizare P în funcție de *strain* este cunoscută.

Parametrii constanți au următoarele valori: grosimea electrozilor, $t_{EL1} = t_{EL2} = 5 \text{ nm}$, grosimea stratului feroelectric, $t_{FE} = 4 \text{ nm}$, lungimile Thomas-Fermi în electrozi, $\lambda_{TF1} = 1 \text{ nm}$, $\lambda_{TF2} = 0.5 \text{ nm}$, permitivitatea electrică a electrozilor, $\epsilon_r^{EL1} = \epsilon_r^{EL2} = 8.45$, energia Fermi, $E_F = 3 \text{ eV}$. În ceea ce privește permitivitatea feroelectricului, ϵ_r^{FE} , am considerat valorile specifice fiecăruia din literatură, $\epsilon_r^{PbTiO_3} = 120$ [10], $\epsilon_r^{HfO_2} = 30$ [11], $\epsilon_r^{BaTiO_3} = 125$ [12].

Studiul dependenței densităților de curent și a coeficientului TER pentru fiecare dintre heterostructurile FTJ astfel construite au fost simulate începând cu construirea barierei de potențial energetic (Figura 4), simularea tunelării directe a barierei de către electroni și calculul coeficientului de transmisie al barierei $D(E)$, cu ajutorul căruia se calculează densitatea de curent, conform relației:

$$j = \frac{4\pi q m^i k_B T}{h^3} \int D(E) \ln \left\{ \frac{1 + \exp[(E_F - E)/k_B T]}{1 + \exp[(E_F - E - eV_a)/k_B T]} \right\} dE \quad (3)$$

Pentru fiecare caz analizat au fost simulate densitățile de curent corespunzătoare celor două sensuri ale polarizării stratului de feroelectric și s-a calculat coeficientul TER :

$$TER = (J_{max} - J_{min}) / J_{min} \quad (4)$$

unde J_{max} corespunde sensului P^- al polarizării, iar J_{min} corespunde sensului P^+ . Rezultatele simulărilor sunt reprezentate grafic în Figurile 5-8.

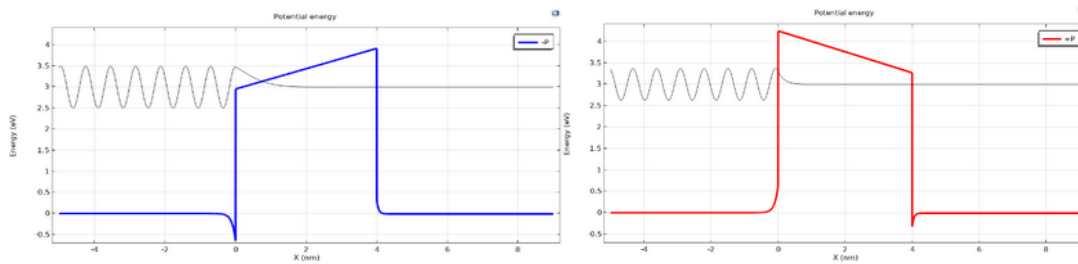


Figura 4. Barierele de potențial pentru cele două senzori ale polarizării feroelectricului într-o heterostructură FTJ asimetrică cu două interfețe. Polarizare $-P$ (stânga), polarizare $+P$ (dreapta). Funcția de undă reprezentată corespunde unui electron cu energia Fermi care tunelează bariera.

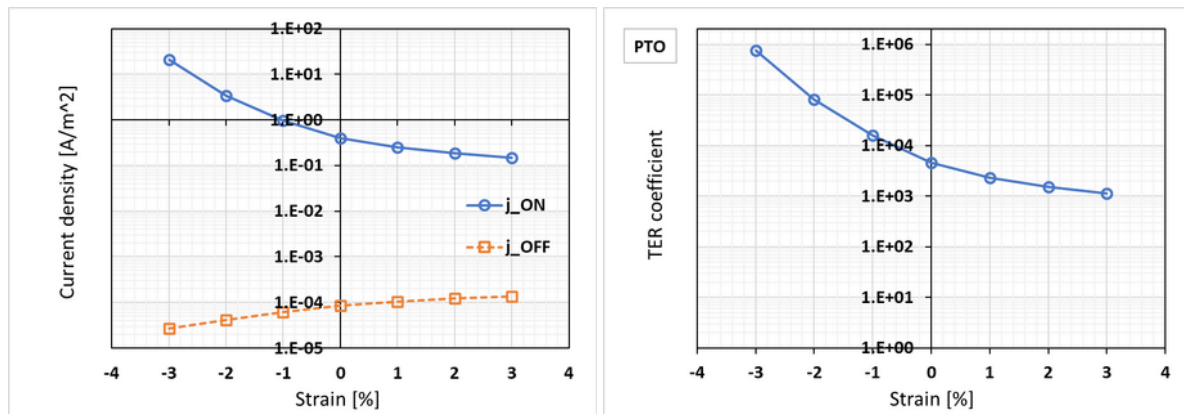


Figura 5. Heterostructură FTJ cu $PbTiO_3$ ca feroelectric. Densitățile de curent pentru cele două senzori ale polarizării (stânga), respectiv coeficientul TER (dreapta) în funcție de strain.

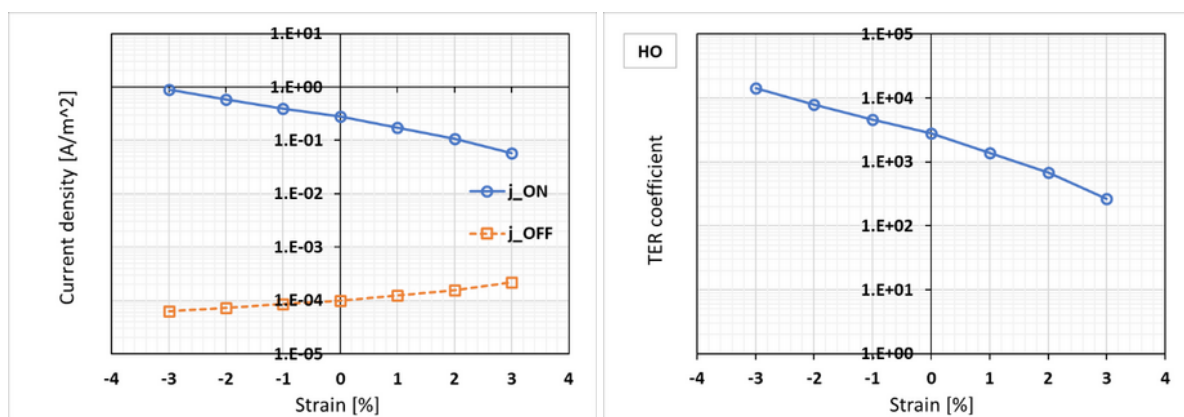


Figura 6. Heterostructură FTJ cu HfO_2 ca feroelectric. Densitățile de curent pentru cele două senzori ale polarizării (stânga), respectiv coeficientul TER (dreapta) în funcție de strain.

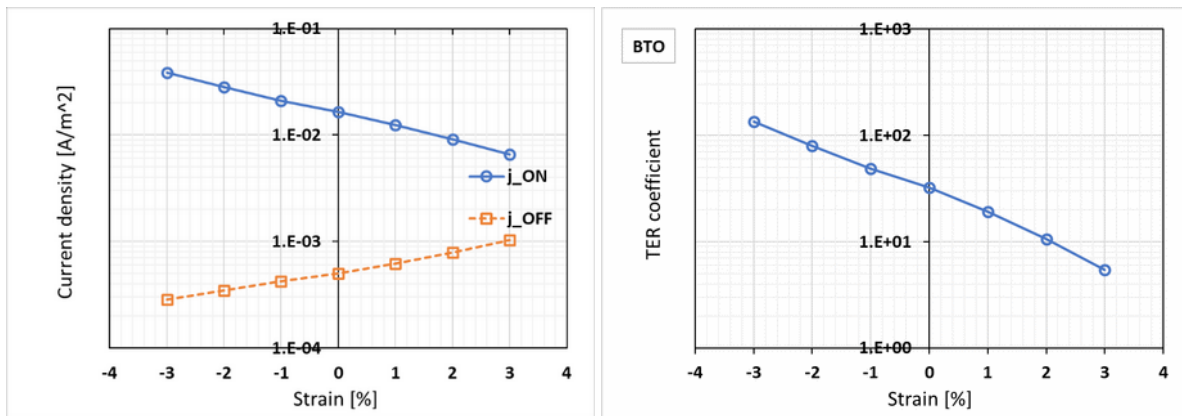


Figura 7. Heterostrucură FTJ cu $BaTiO_3$ ca feroelectric. Densitățile de curent pentru cele două sensuri ale polarizării (stânga), respectiv coeficientul TER (dreapta) în funcție de strain.

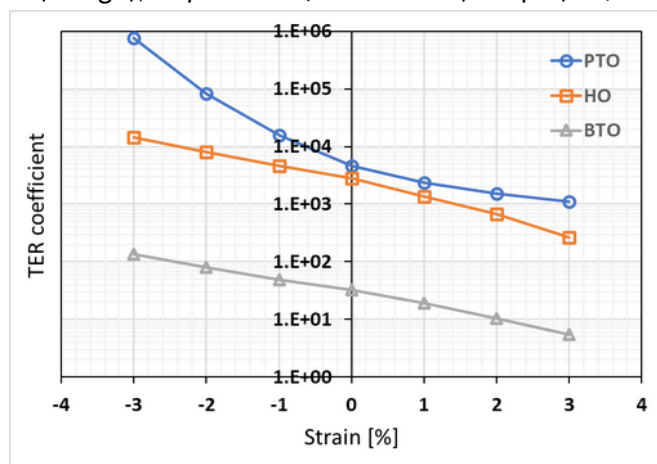


Figura 8. Efectul strain-ului asupra coeficientului TER al unei heterostrucuri cu două interfețe, considerând 3 feroelectrici diferiți ($PbTiO_3$, HfO_2 , $BaTiO_3$).

Referinte

[1] C. Tibeica, et al., Parametric simulations of composite barrier FTJs under external bias at room temperature, Results in Physics 47, 106350 (2023).

2.3 Studiu FEM pentru predicția distribuțiilor de potențial electrostatic, câmp electric și al sarcinilor acumulate la interfețe în FTJs cu bariera $BiFeO_3$

Având în vedere atât numărul mare de posibilități de a combina materialele pentru bariera de potențial și pentru electrozi într-o heterostrucură FTJ, cât și efectul grosimilor lor, ne-am propus să realizăm un studiu asupra variațiilor $V(z)$, $E(z)$ și $\rho(z)$ ca indicatori în pre-evaluarea performanțelor FTJs. Deoarece într-un studiu anterior, Tibeica et al., [1], am arătat că polarizarea și funcția dielectrică a feroelectricului au un rol major asupra efectului electrorezistiv prin tunelare, în acest studiu am ales $BiFeO_3$ (BFO), un multiferic, ca bariera feroelectrică. Acest material este de interes deosebit pentru utilizarea sa în structurile FTJ datorită valorilor mari ale polarizării în strat subțire, $P = 1.0 - 1.5$ C/m², comparativ cu feroelectricii tradiționali ($PbTiO_3$, $BaTiO_3$, PZT, $KNbO_3$). De asemenea, sunt raportate doar un număr mic de rezultate în cadrul DFT pentru FTJs cu BFO ca bariera, iar aceste studii au luat în considerare numai faze tetragonale derivate din faza romboedrică de echilibru.

Schema de principiu a joncțiunilor considerate este ilustrată în Figura 1.

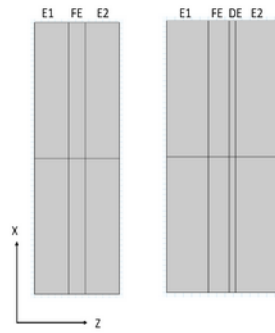


Figura 1 Schema de principiu a FTJs considerate in simulari.

Simulare electrostatica

Potentialul electrostatic a fost calculat in modelul Thomas-Fermi pentru urmatoarele sisteme in care bariera feroelectrică este BiFeO₃: a) Sisteme cu doua interfete: a1) SRO/BFO/SRO; a2) SRO/BFO/Co, si a3) SRO/BFO/Ni; b) Sisteme cu trei interfete, bariere de potential compozite, cu dielectrici diferiti: b1) SRO/BFO/TiO₂/SRO; b2) SRO/BFO/STO/SRO; b3) SRO/BFO/CoO/Co; b4) SRO/BFO/NiO/Ni. Proprietatile geometrice si de material sunt specificate in Tabelul 1 .

Ecuatiile de calcul sunt:

$$\vec{E} = -\nabla \dot{U} \quad (1)$$

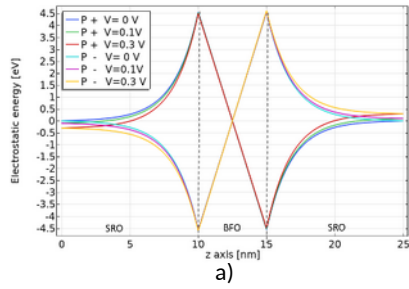
$$\nabla \cdot (\epsilon_0 \epsilon_r \vec{E} + \dot{D}_r) = \rho_V \quad (2)$$

unde E este campul electric, U este potentialul, \dot{D}_r este vectorul deplasare electrica remanenta egala cu zero in conductori si in dielectric, respectiv egala cu valoarea polarizarii in directia z pentru feroelectric iar ρ_V este densitatea de sarcina spatiala data de :

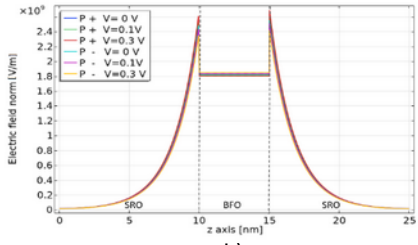
$$\rho_V = \epsilon_0 (U - V) / \rho_V (1.5 \cdot l_{TF}^2) \quad (3)$$

unde l_{TF} este lungimea Thomas-Fermi. In aceasta abordare, densitatea de sarcina libera va fi nenula numai in conductori.

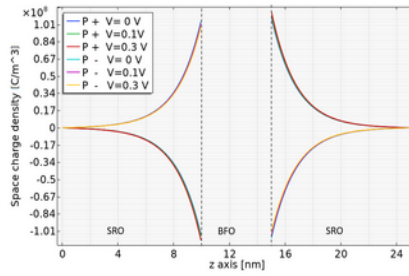
In continuare este prezentata o selectie a rezultatelor pentru sistemele analizate.



a)

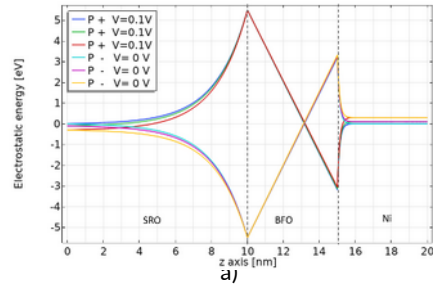


b)

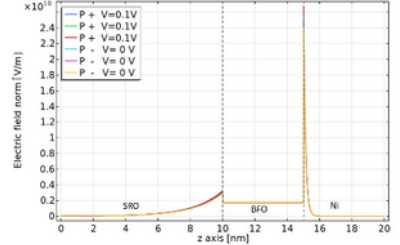


c)

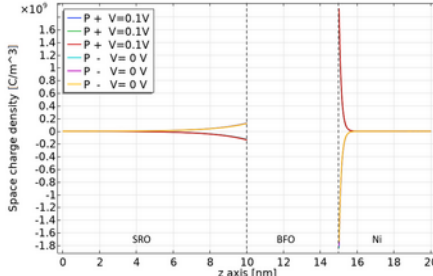
Figura 1. Variatia pe z a potentialului (a), a campului electric (b) si a densitatii de sarcina (c) pentru sistemul SRO/BFO/SRO cu $P(\text{BFO})= 1 \text{ C/m}^2$.



a)



b)



c)

Figura 2. Variatia pe z a potentialului (a), a campului electric (b) si a densitatii de sarcina (c) pentru sistemul SRO/BFO/Ni cu $P(\text{BFO})= 1 \text{ C/m}^2$.

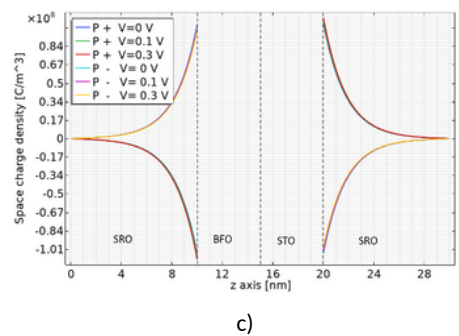
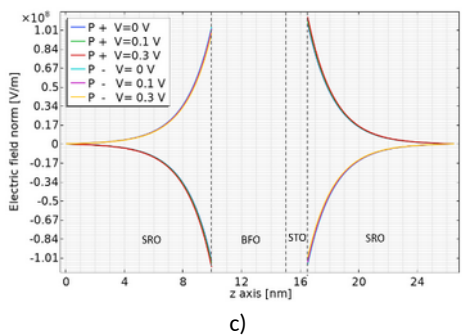
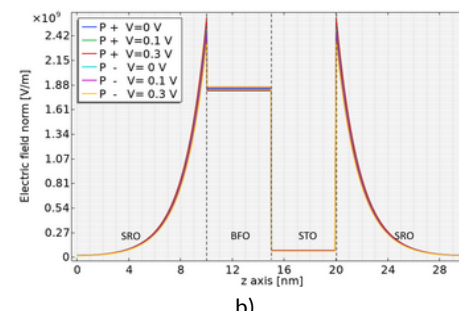
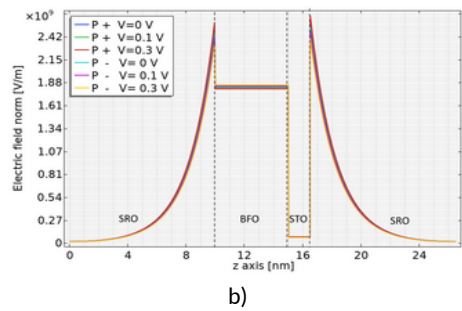
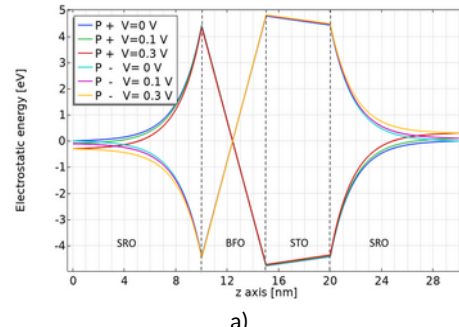
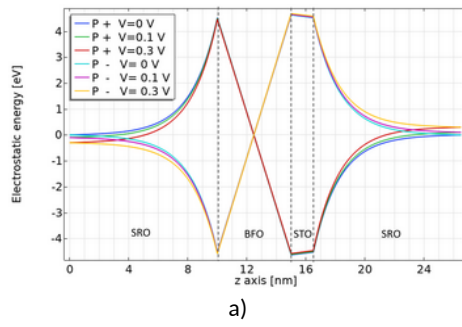
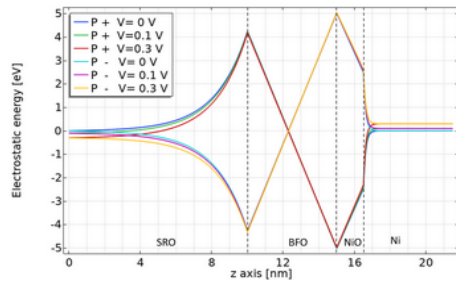
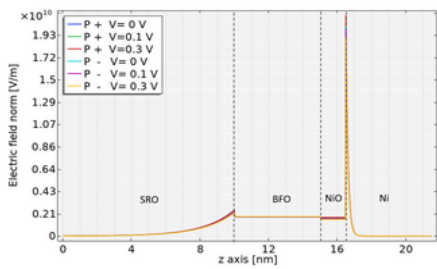


Figura 3. Variatia pe z a potentialului (a), a campului electric (b) si a densitatii de sarcina (c) pentru sistemul SRO/BFO/STO/SRO cu $P(\text{BFO}) = 1 \text{ C/m}^2$ si grosime STO de 1.5 nm.

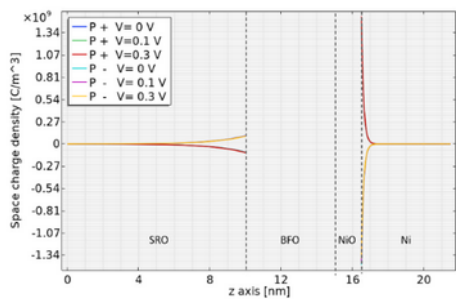
Figura 4. Variatia pe z a potentialului (a), a campului electric (b) si a densitatii de sarcina (c) pentru sistemul SRO/BFO/STO/SRO cu $P(\text{BFO}) = 1 \text{ C/m}^2$ si grosime STO de 5 nm.



a)

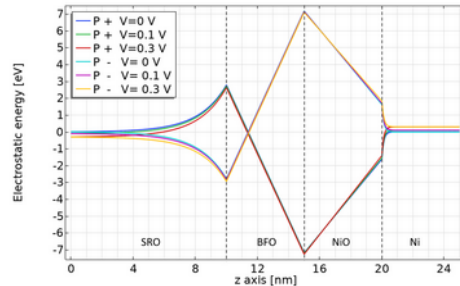


b)

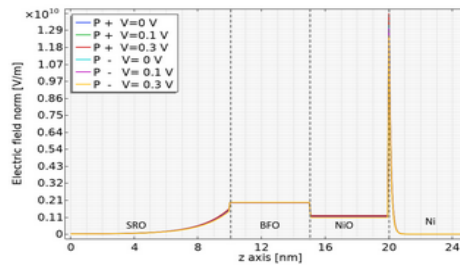


c)

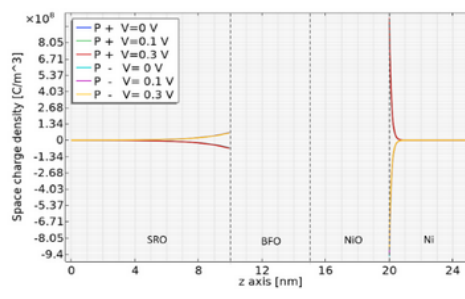
Figura 5. Variatia pe z a potentialului (a), a campului electric (b) si a densitatii de sarcina (c) pentru sistemul SRO/BFO/NiO/Ni cu $P(\text{BFO}) = 1 \text{ C/m}^2$ si grosime NiO de 1.5 nm.



a)



b)



c)

Figura 6. Variatia pe z a potentialului (a), a campului electric (b) si a densitatii de sarcina (c) pentru sistemul SRO/BFO/NiO/Ni cu $P(\text{BFO}) = 1 \text{ C/m}^2$ si grosime NiO de 5 nm.

3. Structura curentului electric pentru o jonctiune feroelectrică de tunelare la temperature camerei

In cazul unui dispozitiv FTJ se pot considera trei mecanisme principale de conductie pentru transportul electric (ET): tunelare directa (DT) [3], tunelare Fowler-Nordheim (FNT) [4], si emisia termionica (TE) [5,6], prezentate schematic in Figura 1. O analiza cantitativa directa a ET in FTJ nu este posibila, inasa. Ca urmare, ne-am propus sa analizam unele criterii cantitative simple dupa care se poate caracteriza tipul de ET intr-o FTJ la temperature camerei (RT).

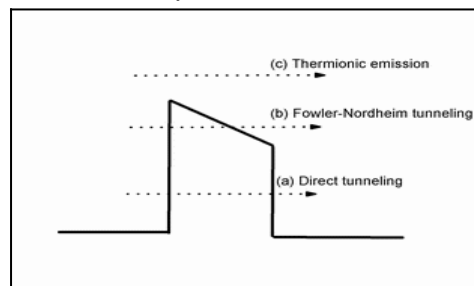


Figura 1. Sunt prezentate schematic cele trei mecanisme pentru transportul electric in dispozitiv FTJ

Metoda

Mecanismele de conductie pot fi tratate simultan prin metoda functiilor Green de neechilibru [7]. In regimul ballistic curentul electric este dat de formula lui Landauer-Büttiker:

$$J = \frac{e}{2\pi^2 h} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} d^2 k \int_0^{\infty} t(k, E) (f_L(E) - f_R(E)) dE. \quad (1)$$

unde J este densitatea de current, t este transmisia si $f_{L,R}$ sunt functiile de distributie Fermi-Dirac in electrodul din stanga (L) si respectiv dreapta (R).

Resultate

In Figura 2 prezentam dependenta de energie a densitatii de current. Pentru analiza am considerat trei bariere dreptunghiulare cu grosimi relevante tehnologic (2, 3 si 4 nm) si o inaltime de 2 eV la diferite energii Fermi (FEs). Parametrii de tunelare sunt cei ai BaTiO₃. Motivul principal pentru alegerea barierei dreptunghiulare este cel ca, pentru multe cazuri, importanta este doar inaltimea medie a barierei si nu profilul ei superior, [8].

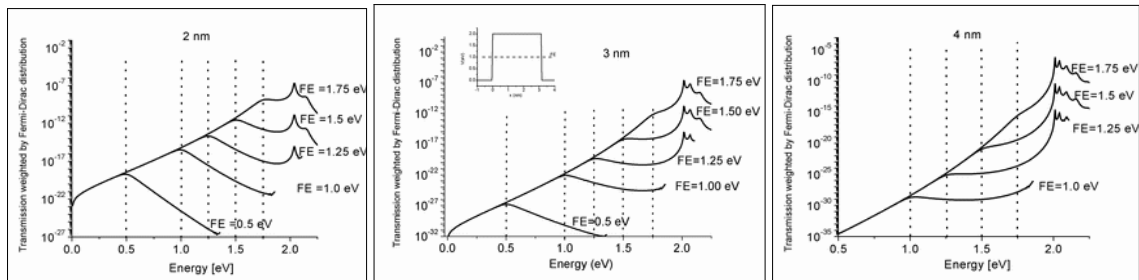


Figura 2. Transmisia ponderata de distributia Fermi-Dirac pentru grosimi diferite, prin bariera feroelectrică (2 nm stanga, 3 nm mijloc, 4 nm dreapta) si valori ale energiei Fermi (FE): 0.5, 1.0, 1.25, 1.5 si 1.75 eV.

Analiza pentru bariere de 2 nm este urmatoarea: pentru $FE < 1.25$ eV, majoritara este DT; la o energie $FE = 1.5$ eV transportul electric este impartit egal intre DT si TE; pentru $FE > 1.75$ eV TE este dominant. Pentru bariere de 3 nm: la energii $FE < 1.0$ eV DT este dominant; de asemenea exista o fereastră energetica mica unde ET este impartit egal intre DT si TE; iar pentru o energie $FE > 1$ eV ET este efectuat prin mecanismul TE datorita starilor rezonante de deasupra barierei. In final pentru bariere de 4 nm TE este dominant pentru toate energiile $FE > 1$ eV.

Analiza unui caz real (FNT + DT)

Considerand o bariera de BaTiO₃ cu grosimea de 3 nm, intre electrozi de Pt si SrRuO₃ rezultatele confirma concluziile de mai sus. De notat ca FNT si DT sunt tratate cu aceeasi precizie si nu se face o distinctie intre ele. Rezultatele sunt prezentate in Figura 3, stanga P+ (de la Pt la SrRuO₃), iar dreapta polarizarea P- (de la SrRuO₃ la Pt) [7].

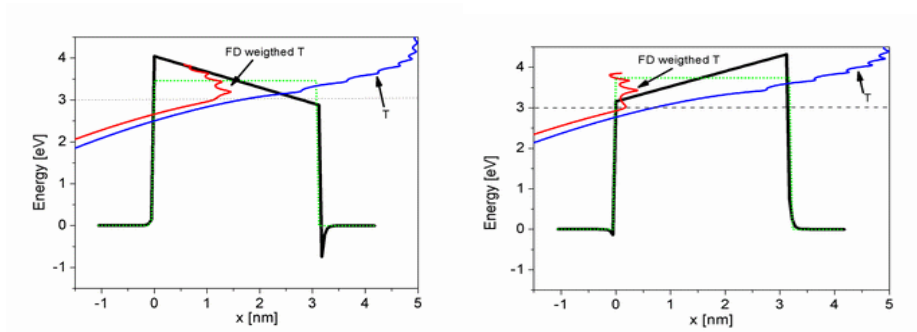


Figura 3. Transmisia si transmisia ponderata de distributia Fermi-Dirac pentru FTJ: Pt/BaTiO₃/SrRuO₃ pentru polarizarea P+ stanga si P- dreapta.

Dependenta curentului de numarul de unda k transversal

In Figura 4 prezentam dependenta curentului de unghiul θ , care este unghiul dintre vectorul total k (in 3D) si directia de transport (Ox), perpendiculara pe straturile jonctiunii. Graficul prezinta distributia curentului pentru vectorii de unda perpendiculari pe Ox. Analizand Figura 4 se poate spune ca electronii se deplaseaza preferential pe o directie perpendiculara pe straturi ($\theta=0$), iar aproximatia Tsu-Esaki pentru formula Landauer-Büttiker este in acord cantitativ excelent cu [8].

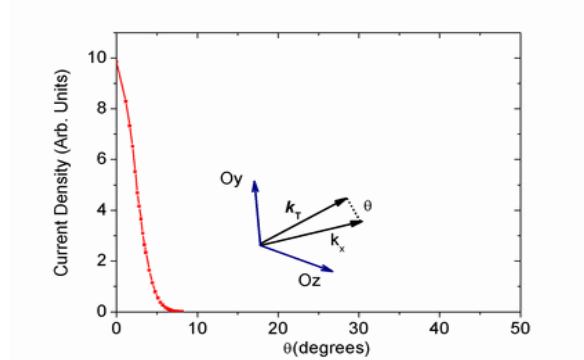


Figura 4. Densitatea de curent ca functie de θ , unghiul dintre vectorul de unda total din electrozi, k , si axa Ox.

Rezumand, in aceasta sectiune am analizat structura densitatii de current ca functie de energia E si vectorul de unda k la temperatura camerei. Curentul circula in marea lui majoritate perpendicular pe straturile jonctiunii. De asemenea curentul este un amestec intre tunelarea direct (DT) sau DT+FNT si TE. Tunelarea depinde de energia Fermi (FE) in raport cu marginea de sus a barierei. Starile rezonante pot influenta transportul electric prin FTJ la temperatura camerei, cand emisia termionica poate devini dominanta, astfel incat tendintele de variatie a TER-ului cu variatia unor parametrii se schimba fata de evaluarile de la $T=0$ K.

4. Proprietati structurale, optice si caracteristici electrice ale straturilor subtiri de oxid de vanadiu sintetizate prin rf sputtering.

Oxizii de vanadiu, binari si ternari, sunt materiale cu o varietate mare de proprietati dielectrice, optice si de transport, care pot fi exploatate ca functionalitati ale FTJs in dispozitive avansate de electronica oxidica [1, 2]. O dificultate in integrarea straturilor subtiri in heterostructuri functionale consta in faptul ca stoichiometria straturilor este puternic dependenta de metoda si de conditiile procesului de sinteza. Cu scopul de a determina compatibilitatea straturilor V_xO_y obtinute in laborator cu modelele de dispozitive FTJs din studiile computationale, au fost sintetizate heterostructuri de tipul $Si/SiO_2/V_xO_y/TiN$ si au fost investigate proprietatile lor structurale, optice si de transport electric. Cele mai importante rezultate sunt urmatoarele: 1) A fost evidentiat efectul concentratiei de oxygen in filmele de V_xO_y depuse prin RF sputtering asupra stoichiometriei si structurii acestor filme. Cresterea continutului de oxygen (raportului O_2/Ar in procesul de depunere) conduce la o tranzitie de la faza VO_2 (V^{4+}) la faza V_2O_5 (V^{5+}), si are efect asupra proprietatilor optice (transmisie, absorbtie) si determina o scadere a benzii interzise optice, $E_{g,optic}$, Figura 1; 2) Proprietatile de transport ale heterostructurilor care contin filme de V_xO_y sunt de asemenea afectate de continutul de oxygen din filme, vezi Figura 2, [4,5].

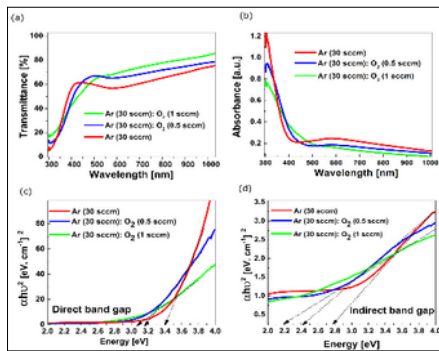


Figura 1. Curbele de transmisie (a) si absorbtie (b) ale straturilor V_xO_y obtinute la diferite valori ale raportului $Ar:O_2$ in plasma din incinta de depunere. Variatia benzii interzise directa (c) si indirecta (d) in functie de raportul $Ar:O_2$ si implicit de concentratia de oxygen in fiecare strat V_xO_y .

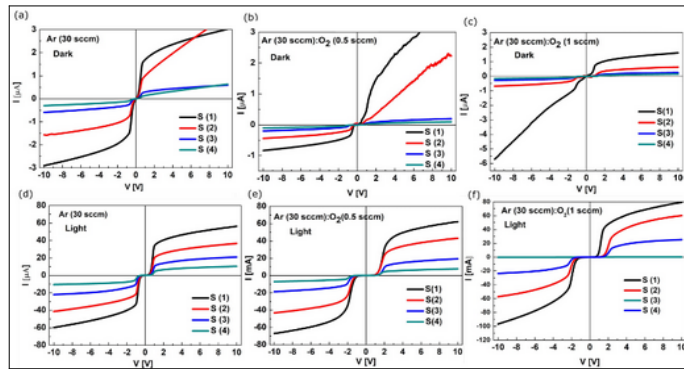


Figura 2. Caracteristicile I-V masurate la intuneric ale heterostructurilor $Si/SiO_2/V_xO_y/TiN$, unde straturile V_xO_y au diferite concentratii de oxygen a), b), c); Caracteristicile I-V masurate sub incidenta luminii albe d), e), f). Se observa variatia intensitatii curentului si a tensiunii de deschidere in functie de continutul de oxygen in fiecare strat V_xO_y .

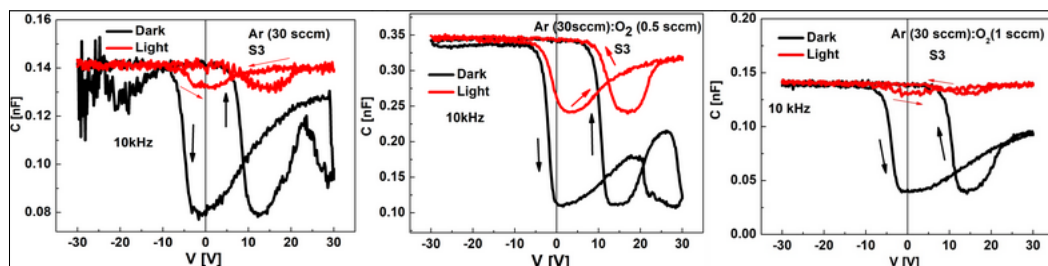


Figura 3. Caracteristicile C-V ale heterostrucutilor $Si/SiO_2/V_xO_y/TiN$, unde straturile V_xO_y au diferite concentratii de oxygen, fiind obtinute la diferite valori ale raportului $Ar:O_2$ in plasma din incinta de depunere. Se observa prezenta histerzisului si variatia tensiunii de flat-band (V_{FB}). <https://doi.org/10.3390/s23041759>

- [4] R. Plugaru et al., Phase-electrical function relationship of vanadium oxide based heterostructures, EMRS Spring Meeting, Strasbourg, France, May 29 – June 2, poster presentation.
- [5] R. Plugaru et al., Light-Sensing Properties of Amorphous Vanadium Oxide Films Prepared by RF Sputtering, *Sensors*, 23, 1759 (2023).