

专题代号：M

(110)SrTiO<sub>3</sub>/LaAlO<sub>3</sub> 异质结界面二维电子气的第一性原理研究  
Two-dimensional Electron Gas at (110) LaAlO<sub>3</sub>/SrTiO<sub>3</sub> Interface:  
A first principles study

方跃文<sup>1</sup>, 段纯刚<sup>1,2,\*</sup>

<sup>1</sup> 华东师范大学极化材料与器件教育部重点实验室,上海,200241

<sup>2</sup> 中国科学院红外物理国家重点实验室,上海,200083

\*E-mail: wxbdcg@gmail.com or cgduan@clpm.ecnu.edu.cn

摘要: 自 2004 年以来,束缚在氧化物绝缘体界面上的二维电子气 (2DEG) 尤其是 SrTiO<sub>3</sub>/LaAlO<sub>3</sub> 界面金属态<sup>[1]</sup>引起了广泛的讨论,然而这种界面金属态的确切物理起源一直存在争议,因此对界面二维电子气纳米电子器件的实现与应用尤其是对界面二维电子气的载流子密度和迁移率调制等带来了物理上的困难. 目前认为可能造成 SrTiO<sub>3</sub>/LaAlO<sub>3</sub> 界面二维电子气的机制有氧缺陷<sup>[2]</sup>,离子扩散<sup>[3]</sup>,晶格畸变<sup>[4]</sup>和基于电荷转移机制的界面极化不连续<sup>[5]</sup>. 由于此前的报道主要集中在(001) SrTiO<sub>3</sub>/LaAlO<sub>3</sub>,极化不连续机制描述的物理图像能较好解释这种结构体系中界面二维电子气的一些典型特征,尤其是对界面二维电子气存在临界厚度的解释<sup>[5]</sup>使其成为最广为人接受的机制. 然而,基于电荷转移的极化不连续机制依赖于异质结界面的朝向,对于(110)朝向,SrTiO<sub>3</sub>/LaAlO<sub>3</sub> 异质结构堆叠方式为(ABO)<sup>4+</sup>/(O<sub>2</sub>)<sup>4-</sup>,这种异质结不存在极化不连续现象,因此此前一直被认为不存在任何电荷迁移,因而也没有界面金属态. 在本文中,我们利用第一性原理计算研究了(110) SrTiO<sub>3</sub>/LaAlO<sub>3</sub> 异质结的界面二维电子气. 首先,我们研究了完整的无缺陷 (或掺杂) (110)SrTiO<sub>3</sub>/LaAlO<sub>3</sub> 异质结,结果发现 LaAlO<sub>3</sub> 即使达到 6 层也不存在界面二维电子气;进一步的研究表明,当我们将界面上的镧离子扩散引入到 SrTiO<sub>3</sub>,或者将界面上的钛离子扩散引入到 LaAlO<sub>3</sub> 中,都能引起界面上能带排列的弯曲从而诱导界面金属性. 我们由此认为阳离子扩散是造成(110) SrTiO<sub>3</sub>/LaAlO<sub>3</sub> 异质结界面二维电子气的重要原因之一.

关键词: 界面二维电子气, 异质结

## 参考文献

- 【1】 Ohtomo A, Hwang HY. A high-mobility electron gas at the  $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$  heterointerface. *Nature*, 2004, 427(6973): 423-6.
- 【2】 Herranz G, Basletić M, Bibes M, et al. High Mobility in  $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$  Heterostructures: Origin, Dimensionality, and Perspectives. *Physical Review Letters*, 2007, 98(21): 216803.
- 【3】 Chambers SA, Engelhard MH, Shutthanandan V, et al. Instability, intermixing and electronic structure at the epitaxial heterojunction. *Surface Science Reports*, 2010, 65(10–12): 317-52.
- 【4】 Pentcheva R, Pickett WE. Avoiding the Polarization Catastrophe in  $\text{LaAlO}_3$  Overlayers on  $\text{SrTiO}_3(001)$  through Polar Distortion. *Physical Review Letters*, 2009, 102(10): 107602.
- 【5】 Thiel S, Hammerl G, Schmehl A, et al. Tunable Quasi-Two-Dimensional Electron Gases in Oxide Heterostructures. *Science*, 2006, 313(5795): 1942-5.