

УДК 538.971

ОЦЕНКА КОНЦЕНТРАЦИИ НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА НА ПРОВОДЯЩЕМ КОНТАКТНОМ СЛОЕ МЕЖДУ ДИЭЛЕКТРИКАМИ LaAlO_3 И SrTiO_3

А.В. ЕГАНЫАН

Институт физических исследований НАН Армении, Аштарак
e-mail: aveganyan@gmail.com

(Поступила в редакцию 28 сентября 2012 г.)

С использованием конденсаторной модели Гётцбергера оценена концентрация носителей заряда, возникающих на контактном слое между алюминатом лантана и титанатом стронция (LAO/STO). Показано, что полученные результаты сопоставимы с теми значениями, которые получаются в рамках модели «полярная катастрофа». Рассмотрены также возможные объяснения изменений концентрации носителей заряда в зависимости от толщины нанесенных слоев – как «чистых» (LAO), так и смешанных (LASTO).

1. Введение

Как известно [1], граница раздела двух диэлектриков – алюмината лантана (LAO) и сегнетоэлектрика титаната стронция (STO) с кристаллической структурой перовскита, хорошо согласующихся друг с другом по величине постоянной решетки (равной, соответственно, $3.789 \text{ \AA}$ и $3.905 \text{ \AA}$), становится проводящей. На границе раздела LAO/STO при толщине слоя LAO , превышающей 1.6 нм (4 элементарные ячейки), нанесенного на подложку STO , может образовываться двумерный (2D) электронный газ с высокой подвижностью носителей. В [2] было показано, что при низких температурах контактный слой становится сверхпроводящим.

В настоящее время существуют две теории, объясняющие причины возникновения проводимости на границе LAO/STO . Первая из них опирается на собственные характеристики материалов, структуру которых можно представить в виде чередующихся слоев $(\text{LaO})^+\text{P}(\text{AlO}_2)^-$ и $(\text{SrO})^0\text{P}(\text{TiO})^0$ [1], где отдельные слои алюмината оказываются заряженными, а титаната – нейтральными. При «совмещении» слоев LAO/STO носители заряда (в количестве 0.5 элементарного заряда в пересчете на одну элементарную ячейку) «подтягиваются» к границе раздела, что и делает контакт проводящим (гипотеза «полярная катастрофа») [3]. Во второй модели причиной появления двумерного (2D) электронного газа считается наличие кислородных вакансий в подложке STO [4]. Поскольку экспериментальные результаты зависели от способа подготовки рассматриваемых образцов, то при сравнении полученных данных исследователи в

некоторых случаях отдавали предпочтение первому механизму, в других – второму, а иногда и их комбинации [5].

Для разрешения противоречий, возникающих при использовании отмеченных моделей, в работе [3] был проведен следующий эксперимент. В качестве подложки использовался тот же STO, однако в качестве второго слоя, вместо LAO, использовались смеси LAO и STO в различных пропорциях и разной толщины. Как выяснилось, проводимость на границе таких слоев сохраняется, причем необходимая для этого толщина слоя LAO/STO должна быть обратно пропорциональна содержанию LAO в твердом растворе [3], что полностью соответствует предсказаниям первой модели и служит самым надежным, на сегодняшний день, свидетельством в ее пользу.

В настоящей работе, с использованием конденсаторной модели Гоетцбергера сделана оценка концентрации носителей заряда на границе раздела LAO/STO и проведено сравнение с результатами, полученными на основе отмеченных моделей.

2. Оценка концентрации носителей заряда

Рассмотрим образующийся на границе LAO/STO тонкий слой вместе с атомными плоскостями шириной $\alpha_{\text{LAO}} = 3.789 \text{ \AA}$ (где α_{LAO} – параметр элементарной ячейки LAO) как «обкладку» воображаемого «плоского конденсатора», принимая, что носители заряда равномерно распределены на ее поверхности. В этом случае толщина h такой «обкладки» будет определяться как $h = \alpha_{\text{LAO}} + L$, где L – размер локализации (2D) электронов. Для оценки L допустим, что электроны e^- приводят к поляризации граничного слоя диэлектрика STO и взаимодействуют с этим полем так, как взаимодействовали бы с e^+ . Предположим, что ось z перпендикулярна плоскости контакта. В таком случае неопределенность импульса электрона определяется как $P_z \sim \hbar/L$, где $\hbar$ – постоянная Планка. В этом случае энергию электрона можно записать в виде $\hbar^2/2mL^2 \sim |V_L| \sim e^2(\epsilon_{\text{LAO}} - 1)/(\epsilon_{\text{STO}} + 1)L$, где V_L – потенциальная энергия взаимодействия e^- и e^+ (электростатическое приближение), ϵ_{LAO} – диэлектрическая проницаемость LAO, а ϵ_{STO} – диэлектрическая проницаемость STO ($\epsilon_{\text{LAO}} = 24$; $\epsilon_{\text{STO}} = 300$ [5]). Поскольку $L \approx a_B(\epsilon_{\text{STO}} + 1)/2(\epsilon_{\text{LAO}} - 1) \approx 3.47 \text{ \AA}$, где $a_B = \hbar^2/me^2 \approx 0.53 \text{ \AA}$ – боровский радиус электрона, то толщина такой «обкладки» $h \approx 7.26 \text{ \AA}$.

Допустим, что структуру контактного слоя LAO/STO можно разбить на малые, параллельно соединенные конденсаторы, внутри которых значения потенциала постоянны (конденсаторная модель Гоетцбергера) [6]. Число таких конденсаторов (n_0) на длине 1 см будет соответствовать количеству элементарных ячеек LAO с периодом решетки $\alpha_{\text{LAO}} = 3.789 \text{ \AA}$. Таким образом, $n_0 \approx 1/3.789 \times 10^{-8} \approx 0.26 \times 10^6$.

Поверхностная плотность зарядов δ на обкладках одного из n_0 таких плоских заряженных конденсаторов определяется в виде

$$\delta = \epsilon_0 \epsilon_{\text{STO}} U / d, \quad (1)$$

где U – напряжение на обкладках, ε_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума, ε_{STO} – диэлектрическая проницаемость STO диэлектрика, d – толщина диэлектрика.

В работе [7] показано, что на обкладке заряженного конденсатора, состоящего из 1–2 атомных слоев, можно создать избыточную концентрацию (n_s) электронов, которая существенно выше равновесной не только у диэлектриков и полупроводников, но даже у металлов (на 3 порядка). Из уравнения (1) следует, что избыточная концентрация электронов на обкладке толщиной h определяется как

$$n_s = \delta/h = \varepsilon_0 \varepsilon_{\text{STO}} U / dh. \quad (2)$$

Так как

$$U = E_{\text{LAO}} d, \quad (3)$$

где E_{LAO} – напряжение поля, то из (2) и (3) следует, что

$$n_s = \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_{\text{STO}} E_{\text{LAO}}}{h}. \quad (4)$$

Для n_0 параллельно соединенных конденсаторов имеем

$$n_s = \frac{n_0 \varepsilon_0 \varepsilon_{\text{STO}} E_{\text{LAO}}}{h}. \quad (5)$$

При использовании в качестве второго слоя смеси LAO и STO концентрация электронов равна

$$n_s = \frac{n_0 \varepsilon_0 \varepsilon_{\text{LASTO}} E_{\text{LASTO}}}{h}, \quad (6)$$

где $\varepsilon_{\text{LASTO}}$ – относительная диэлектрическая проницаемость смешанного слоя, которая представляет собой тензор $\varepsilon_{xx} = 27$; $\varepsilon_{yy} = 37$, а $E_{\text{LASTO}} = xE_{\text{LAO}} + (1-x)E_{\text{STO}} = xE_{\text{LAO}}$, так как для STO $E_{\text{STO}} = 0$ (здесь x ($0 \leq x \leq 1$) – доля LAO в LASTO [3]).

3. Результаты и обсуждение

Для определения количества носителей заряда n_s на граничном слое LAO/STO подставим в уравнение (5) полученные выше значения величин $n_0 \approx 0.26 \times 10^6$ и $h \approx 7.26 \times 10^{-8}$ см, а также $\varepsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12}$; $E_{\text{LAO}} = 0.24 \text{ В}/\text{\AA} = 24 \times 10^6$ В/см [5]. Полученная величина $n_s \approx 2.3 \times 10^{13} \text{ см}^{-2}$ хорошо согласуется с данными, полученными с использованием модели «полярная катастрофа» ($n_s \approx 1 - 2 \times 10^{13} \text{ см}^{-2}$ [3]).

В случае использования смешанного слоя LAO/STO, при различных соотношениях x n_s может изменяться. Например, при $x = 0.5$ $n_s = 1.15 \times 10^{13} \text{ см}^{-2}$, при $x = 0.75$ $n_s = 1.4 \times 10^{13} \text{ см}^{-2}$. Такое поведение n_s в зависимости от толщины нанесенного слоя LAO и LASTO можно объяснить технологическими причинами, которые могут привести к изменениям того или иного параметра.

Таким образом, можно заключить, что использование конденсаторной модели Гоеццбергера существенно упрощает расчеты по определению концентрации носителей заряда на контактном слое LAO/STO и LASTO/STO и позволяет оценить значения n_s , которые сопоставимы с результатами, полученными в рамках модели «полярная катастрофа».

Причину трудностей, связанных с объяснением изменения концентрации носителей заряда как при разных толщинах LAO, так и в случае смеси LASTO, можно объяснить следующим образом. При получении того или иного образца нанесенные слои случайным образом могут иметь различные ориентационные направления, что является трудно контролируемым процессом. В этом случае диэлектрическая проницаемость, которая является тензором, в зависимости от этих направлений может изменяться, что и приведет к различным значениям n_s .

Автор выражает благодарность за содействие и полезные обсуждения В.Е. Мкртчяну, Т.И. Бутаевой и А.М. Кечиянцу.

ЛИТЕРАТУРА

1. **A.Ohtomo, H.Y.Hwang.** Nature, **455**, 423 (2004).
2. **J.A.Bert et al.** Nat. Phys., **7**, 767 (2011).
3. **M.L.Reinle-Schmitt.** Nat. Commun, **3:392**, 1 (2012).
4. **A.Kalabukhov et al.** Phys. Rev. B, **75**, 121404(R) (2007).
5. **M.Stengel, D.Vanderbilt.** Phys. Rev. B, **80**, 241103(R) (2007).
6. **В.А.Гуртов.** Твердотельная электроника. М., Техносфера, 2005.
7. **В.Леонов.** J. Siberian Federal University. Mathematics & Physics, **2**, 206 (2009).

LaAlO₃ եւ SrTiO₃ դիէլեկտրիկներէ միջեւ ՀԱՂՈՐԴԶ ՇԵՐՏՈՒՄ
ԼԻՅՔՍԿԻՐՆԵՐԻ ԿՈՆՑԵՆՏՐԱՑԻԱՅԻ ԳՆԱՀԱՏՈՒՄԸ

Ա.Վ. ԵԳԱՆՅԱՆ

Գոյեւթերգերի կոնդենստորային մոդելի կիրառմամբ գնահատված է LAO/STO կոն-տակտային շերտում առաջացած լիցքակիրների կոնցենտրացիան: Ցույց է տրված, որ ստաց-ված արդյունքները համադրելի են այն արժեքների հետ, որոնք ստացվում են «բևեռային աղետ» մոդելի շրջանակներում: Դիտարկված են նաև նստեցվող շերտերի հաստությունից կախված լիցքակիրների կոնցենտրացիայի փոփոխության հնարավոր բացատրությունները, ինչպես «մաքուր» (LAO), այնպես էլ խառնուրդային (LASTO) դեպքերում:

ESTIMATION OF THE CONCENTRATION OF CHARGE CARRIERS IN A CONDUCTIVE LAYER BETWEEN LaAlO₃ AND SrTiO₃ DIELECTRICS

A.V. EGANYAN

Using the capacitor model by Goetzberger, the concentration of charge carriers on the contact layer LAO/STO is evaluated. The obtained results are shown to be comparable with those obtained within the framework of “polar catastrophe” model. Some possible interpretations of charge carriers’ concentration variations, depending on the thickness of deposited layers, are presented as well, both for the “pure” (LAO) and composite (LASTO) ones.