研究揭示衬底台阶截止层对薄膜物性的影响

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：https://www.iikx.com/news/progress/26796.html

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

复杂氧化物异质结构因丰富的物理现象而受到关注。然而，在氧化物异质结的设计中存在一个局限：当厚度减小到一定程度时，薄膜会表现出与其对应块体性质截然不同的“死层”现象。作为典型的例子，4d过渡金属氧化物$SrRuO_3$
（SRO）的块体具备铁磁
金属基态，居里转变温度约160K。但在$SrTiO_3$
（STO）等基底上生长的超薄SRO薄膜则展现出金属-绝缘体转变（MIT）和非铁磁态，与块体性质不同。过去十多年中，临界厚度被报道从4-5个原胞到2个原胞之间，近年来其磁性“死层”降低至近乎单个原胞层。这种厚度依赖的MIT转变归因于多种因素，如电子关联增强、结构转变、动态自旋关联以及表面无序和化学成份变化。实验中，单原胞层SRO超晶格的基态存在非铁磁绝缘体、铁磁绝缘体、准铁磁金属态等多种状态，但与理论上提出的半金属铁磁态相悖。排除外在因素将助于解决实验与理论结果间的不一致，揭示单层SRO的内禀属性。

中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家研究中心研究员张坚地和郭建东，联合中国科学技术大学教授陶靖和
特任研究员王臻等，通过研究倾斜STO
（001）衬底上STO^5-SRO^2-STO^5-SRO^1
异质结的原子结构，发现台阶边缘的混合截止面会破坏超薄SRO层的横向均匀性和完整性，为理解单层SRO的“死层”效
应提供了新视角。一般情况下，在期待以TiO_2
-截止的STO衬底表面台阶边缘因受处理条件的影响会出现半层台阶（SrO截止区）从而形成混合截止面。原子分辨的扫描透射电镜观测结构表明，薄膜中存在两类具有代表性的台阶生长模式。第一类台阶边缘为单一截止面，薄膜是沿[011]方向生长，使平台间的SRO增加一个原胞。第二类台阶边缘为混合截止面，即存在单胞尺度的SrO截止区，薄膜是沿[1-10]方向生长，致使平台间的SRO减少一个原胞。当SRO减小至单原胞层时，第二类台阶会导致SRO层中断，由此诱导了SRO的横向不连续性并且应该与单层SRO的独特输运和磁性相关。台阶边缘较宽的SrO截止区可在低分辨表面探测手段中辨别出来，但单胞尺度的SrO截止区则不容易明确区分。宽度为1个单胞SrO截止区可导致单层SRO中断，更宽的SrO截止区会破坏较厚SRO薄膜的连续性。原子级别的不连
续性
会使电输
运路径中断，导致
超薄SRO薄膜及超晶格中非金属“死
层”现象。因此，TiO_2截止面STO衬底上单一TiO_2
截止面、单原胞高度台阶结构是生长高质量外延氧化物异质结构的重要条件。

此外，该团队结合实验和理论计算，对STO^{5}-SRO^{n}-STO^{5}（n = 1, 2）异质结构进行了系统研究，发现由Ti-Ru混合引起的严重化学成份变化是单层（n=1）SRO金属性和铁磁性消失（“死层”效应）的原因。研究表明，当n=2时，异质结表现出金属和铁磁行为，2个单胞的SRO八面体倾转消失
，几
乎保持化
学成份比。密度泛
函理论计算发现，没有八面体倾转，
保持化学成份比的STO^{5}-SRO-STO^{5}（n=1）仍然表现出铁磁金属性。由Ti-Ru混合引起的Ru缺失导致了反铁磁性排序和单层SRO中绝缘行为的稳定化，从而使铁磁金属性丧失。STO衬底上伴随台阶结构出现
的非单一截止面，是导
致Ti-
Ru混合的重要因素。在原子级别上，单一TiO_2
表面的STO衬底是生长高质量单层SRO薄膜的前提，也是研究单层SRO基态的必要条件。

上述研究拓宽了对SRO“死层”现象根源的理解，在原子尺度上精确描述横向非均匀性有助于理解超薄膜与超晶格的内禀物理性质。当SRO薄膜被用作各种电子和自旋电子学器件材料时，了解其在原子级别的结构变化对于优化器件的性能至关重要。

近日，相关成果发表在*Physical Review Materials*和*Physical Review B*上。研究工作得到科学技术部、国家自然科学基金委员会、中国科学院等的支持。

论文链接：1、2

研究团队单位：物理研究所

更多 科学进展 请访问 https://www.iikx.com/news/progress/

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，爱科学iikx.com转发