

# $(\text{SrVO}_3)_5/(\text{SrTiO}_3)_1(111)$ 异质结金属-绝缘体转变和磁性调控的第一性原理研究\*

房晓南<sup>1)</sup> 杜颜伶<sup>2)†</sup> 吴晨雨<sup>3)</sup> 刘静<sup>2)</sup>

1) (山东管理学院信息工程学院, 济南 250355)

2) (山东中医药大学智能与信息工程学院, 济南 250355)

3) (山东大学物理学院, 济南 250100)

(2022 年 4 月 6 日收到; 2022 年 5 月 10 日收到修改稿)

(111) 取向的钙钛矿异质结具有独特的六角蜂窝状双层结构, 展现出丰富独特的物理现象, 因而近年来得到越来越多的关注. 本文利用第一性原理计算研究了 (111) 取向的  $(\text{SrVO}_3)_5/(\text{SrTiO}_3)_1$  异质结, 计算结果表明该体系为半金属铁磁体. 进一步的研究表明该体系的电、磁性质可以通过施加面内应变和界面元素掺杂进行调控: 在 4% 的面内压缩应变到 2% 的面内拉伸应变范围内, 该体系保持铁磁半金属性质, V 3d 电子是体系半金属性的主要来源; 当面内压缩应变增加到 8% 或面内拉伸应变增加到 4% 时, 该体系的基态变为反铁磁绝缘体; 通过异质结界面处 Ti-V 阳离子的混合掺杂, 该体系可以实现从铁磁半金属向铁磁绝缘体的转变. 本文的研究结果表明, 该体系在自旋电子学领域具有很高的应用潜力, 本文研究为利用  $(\text{SrVO}_3)_5/(\text{SrTiO}_3)_1(111)$  异质结探索量子相变提供了理论参考.

**关键词:** 异质结, 面内应变, 金属-绝缘体转变, 半金属铁磁体**PACS:** 73.21.Cd, 71.30.+h, 75.70.Cn**DOI:** 10.7498/aps.71.20220627

## 1 引言

自从 Ohtomo 与 Hwang<sup>[1]</sup> 在  $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$  (LAO/STO) 异质结的界面观察到具有高迁移率的二维电子气以来, 在钙钛矿异质结界面观察到越来越多的新奇物理现象<sup>[2,3]</sup>, 包括超导、金属-绝缘体的转变、磁与超导共存、反常霍尔效应、各向异性超导和各向异性磁电阻等. 这些特性使钙钛矿异质结得到越来越多的关注. 具有钒 3d<sup>1</sup> 电子结构的  $\text{SrVO}_3$ (SVO) 与  $\text{SrTiO}_3$ (STO) 有相同的立方钙钛矿结构 ( $\text{ABO}_3$ ), 且晶格常数相近. 实验上已制备出高质量的 SVO/STO 异质结<sup>[4]</sup>, 该异质结表现

出有趣的特性: 随着 SVO 层数的减少, 异质结会出现金属-绝缘体的转变<sup>[5-7]</sup>. 这一特性使 SVO/STO 异质结有可能被用于电子器件, 如莫特场效应晶体管和传感器<sup>[8]</sup>, 因而受到了较多的关注. 在以往的研究工作中, 主要是关注 SVO/STO 异质结金属-绝缘体的转变及电输运特性, 磁性相关研究不多, 且主要研究 (001) 的堆叠取向, 只有少数研究报道了 (110) 和 (111) 堆叠取向的 SVO 相关异质结. 实验方面, Xu 等<sup>[9]</sup> 采用脉冲激光沉积方法在 (111) 取向的 STO 基底上制备了 (111) 取向的 SVO 薄膜, 该薄膜在室温下表现出良好的金属性能; 后来, Roth 等<sup>[10]</sup> 应用混合分子束外延技术在 (111) 取向的  $(\text{La}_{0.3}\text{Sr}_{0.7})(\text{Al}_{0.65}\text{Ta}_{0.35})\text{O}_3$  衬底上

\* 国家自然科学基金 (批准号: 82174528)、山东管理学院博士科研启动基金 (批准号: SDMUD201901) 和山东管理学院科研启航计划 (批准号: QH2020Z05) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: [duyanling@sducm.edu.cn](mailto:duyanling@sducm.edu.cn)

也成功制备了高质量的 SVO(111) 薄膜; Mitsuhashi 等<sup>[11]</sup>通过对 SVO(001) 和 (110) 薄膜的研究, 证明了结构取向对 SVO 薄膜中 V 3d 的  $t_{2g}$  轨道劈裂有着不同的影响. 理论方面, Jacobs 等<sup>[12]</sup>计算并对比了不同取向的 SVO 的表面能, 发现 (001) 表面具有较低的表面能, 比 (110) 和 (111) 表面更稳定; 袁焱等<sup>[13]</sup>通过计算  $\text{SrVO}_3/\text{PbTiO}_3$ (001) 和 (110) 的界面能, 预测  $\text{SrVO}_3/\text{PbTiO}_3$ (110) 界面具有更好的稳定性; Shen 等<sup>[14]</sup>利用密度泛函理论对比研究了不同结构取向的  $(\text{SrVO}_3)_1/(\text{PbTiO}_3)_5$  超晶格的电子结构, 发现不同结构取向的  $(\text{SrVO}_3)_1/(\text{PbTiO}_3)_5$  超晶格显示出不同的轨道劈裂和占据情况. 可见结构取向的改变也是调控轨道劈裂和占据情况进而调控材料导电性和磁基态等物理性质的有效途径<sup>[15]</sup>. (111) 取向的钙钛矿异质结具有独特的六角蜂窝状双层结构, 这赋予了钙钛矿异质结特殊的电子结构<sup>[16]</sup>. 研究显示在 (111) 取向的 n 型 LAO/STO 异质结中存在拓扑相和多种量子态<sup>[17]</sup>, 包括非磁性金属态、铁磁态、半金属、反铁磁态、莫特绝缘体等. 在类似强相关氧化物<sup>[18,19]</sup>的 (111) 异质结中, 也预测了 Mott 绝缘体和反铁磁基态. 实验上已成功制备了高质量的 SVO/STO (111) 异质结<sup>[9]</sup>, 但截至目前还没有关于 SVO/STO (111) 异质结电磁性质的计算研究. 因此研究 (111) 取向的 SVO/STO 异质结不但能补充对不同取向的 SVO/STO 异质结研究的缺乏, 也为调控 SVO/STO 异质结的电、磁属性提供了更多可能性.

另一方面, 钙钛矿异质结中电荷、自旋、轨道、晶格等自由度之间存在相互耦合和竞争, 表现出强烈的结构、电性和磁性的关联, 这使得钙钛矿异质结的电学、磁学性质对异质结的结构变化相当敏感. 因此, 金属-绝缘体的转变除了通过层数来调控外, 利用应变驱动钙钛矿异质结的结构发生变化, 也可以作为调控的有力手段<sup>[20–22]</sup>. 同时, 应变在该类异质结材料的制备过程中无法避免, 且直接关系到器件的可靠性和稳定性. 因此, 研究应变效应对 SVO/STO (111) 异质结磁、电性能的影响也是研究材料性质可靠性和稳定性的需求.

因此, 本文利用第一性原理研究了  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1$ (111) 异质结的晶体结构和电子结构: 在  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1$ (111) 异质结中发现了铁磁半金属基态; 系统研究了面内应变对  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1$ (111) 异质结电、磁性能的影响, 发现面内应变可以有效

地调控  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1$ (111) 异质结实现铁磁半金属-反铁磁绝缘体的转变. 另外, 考虑到异质结在制备过程中经常在界面发生阳离子扩散的现象<sup>[23,24]</sup>, 实验也发现在高温生长的过程中 Ti 会在 SVO/STO 界面上发生扩散<sup>[25]</sup>, 因此, 本文还研究了  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1$ (111) 界面处 Ti-V 混合掺杂对系统的电子结构和磁性的影响. 本文的工作补充了对不同取向的 SVO/STO 异质结研究的缺乏, 也证明  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1$ (111) 异质结在自旋电子学领域具有很高的应用潜力, 并为利用  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1$ (111) 异质结探索量子相变提供理论参考.

## 2 计算方法

本文主要采用基于密度泛函理论的第一性原理计算方法, 应用软件 VASP (Vienna *ab-initio* simulation package)<sup>[26]</sup>进行计算, 其中用到 Perdew-Burke-Ernzerhof 型广义梯度近似泛函 (PBE-GGA)<sup>[27]</sup>和投影缀加平面波 (projector augmented wave, PAW) 方法<sup>[28]</sup>. 对 Ti 和 V 的 d 电子考虑了位库仑排斥作用, 电子之间的交换关联势采用 GGA +  $U$  处理<sup>[29]</sup>. 其中, 对 Ti 的 d 电子取  $U = 5.00$  eV,  $J = 0.64$  eV<sup>[30]</sup>, 对 V 的 d 电子取  $U = 4.00$  eV,  $J = 0.60$  eV<sup>[31]</sup>. 平面波截断能设为 500 eV, 系统总能量收敛精度取为  $10^{-5}$  eV, 每个原子上的作用力收敛精度取为 0.01 eV/Å. 采用中心的 Monkhorst-Pack 方法<sup>[32]</sup>进行第一布里渊区采样. 块体 SVO 和 STO 是立方结构, 对他们的结构进行优化时,  $k$  点网格的选取为  $8 \times 8 \times 8$ , 得出的晶格常数分别为 3.869 和 3.944 Å, 与文献报道的 3.866<sup>[33]</sup>和 3.94 Å<sup>[34]</sup>的计算结果一致. 图 1(a) 和图 1(b) 为本文中使用的  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1$ (111) 模型, 是包含 5 个 SVO 晶胞和 1 个 STO 晶胞的周期结构. 其中, SVO 和 STO 都是  $\text{ABO}_3$  型钙钛矿氧化物, 晶格结构为 V(或 Ti) 离子位于立方晶胞的中心, 被 6 个 O 离子包围成一个八面体, Sr 离子则位于立方晶胞的顶点. SVO 沿 [111] 方向是由  $\text{SrO}_3$  和 V 交替叠加构成, 而 STO 是由  $\text{SrO}_3$  和 Ti 交替叠加构成, 因此, 本文沿 [111] 方向的计算模型是  $\cdots\text{SrO}_3\text{-V-SrO}_3\text{-Ti-SrO}_3\text{-V-SrO}_3\cdots$  的结构. 对  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1$ (111) 模型结构优化时采用  $5 \times 5 \times 1$  的  $k$  点网格在布里渊区中取样, 得到  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1$ (111) 的面内晶格常数为 5.48 Å(垂直于 [111] 方向), 对应于 3.875 Å 的立方晶格常数. 因此, 未施加应变的

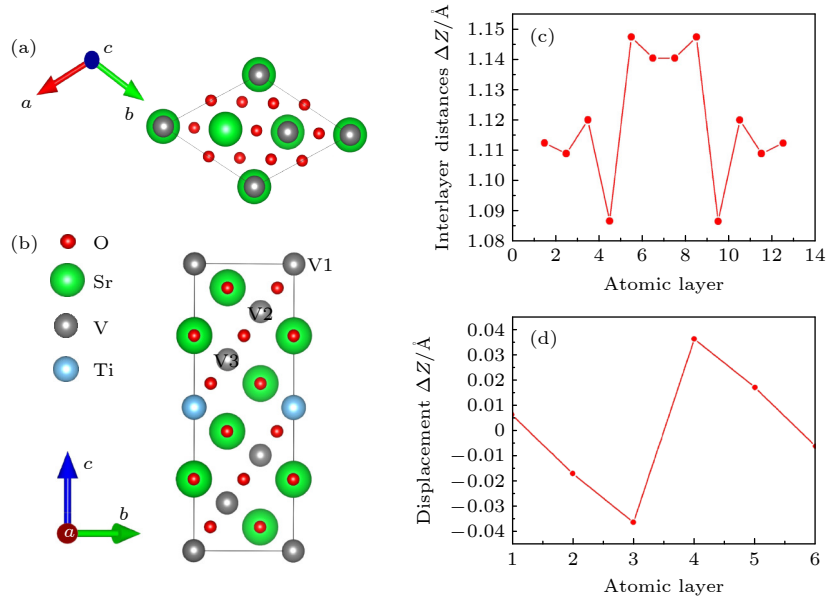


图 1 (a), (b)  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1(111)$  异质结的 (a) 俯视图和 (b) 侧视图; (c) 沿  $c$  轴方向, 相邻原子层之间的距离; (d)  $\text{SrO}_3$  原子层中锶离子相对于氧离子在  $c$  轴方向的位移,  $\Delta Z = Z(\text{Sr}_i) - Z(\text{O}_i)$ , 其中  $Z(\text{Sr}_i)$  是第  $i$  层  $\text{SrO}_3$  中锶离子的纵坐标值,  $Z(\text{O}_i)$  是第  $i$  层  $\text{SrO}_3$  中氧离子的纵坐标平均值

Fig. 1. (a) Top view of the  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1(111)$  heterostructure with in-plane  $1 \times 1$  unit cells; (b) side view of  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1(111)$  heterostructure; (c) the interplanar distance between consecutive planes; (d) the displacement of Sr cation relative to O ions in each  $\text{SrO}_3$  layers,  $\Delta Z = Z(\text{Sr}_i) - Z(\text{O}_i)$ , where  $Z(\text{Sr}_i)$  is the value of the Sr cation and  $Z(\text{O}_i)$  is the average value of the O atoms in a given  $\text{SrO}_3$  layer  $i$  along the  $c$  axis.

$(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1(111)$  异质结的面内晶格常数固定为  $a_0 = 3.875 \text{ \AA}$ . 为模拟不同面内应力, 本文建构了不同面内晶格常数的  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1(111)$  模型, 晶格参数设置为不同的值, 代表不同的面内应变. 面内双轴应变定义为  $\eta = \frac{(a - a_0)}{a_0} \times 100\%$ . 当施加面内应变或者界面处发生 Ti-V 混合掺杂时, 系统的磁基态可能会发生变化. 为此我们构建了  $2 \times 2$  的超晶胞结构,  $k$  点网格的选取为  $3 \times 3 \times 1$ , 通过对铁磁态 (FM) 和反铁磁态 (AFM) 的总能量进行计算和对比来确定系统的基态. 在计算电子结构时, 对基态为铁磁态的模型 ( $\eta = -4\% - 2\%$ ) 采用  $1 \times 1$  的超晶胞结构,  $k$  点网格的选取为  $5 \times 5 \times 1$ ; 对金属-绝缘体的过渡态 ( $\eta = -7\%$ ) 采用  $2 \times 1$  的超晶胞结构,  $k$  点网格的选取为  $3 \times 6 \times 1$ ; 对基态为反铁磁态的模型 ( $\eta = -8\%$  和  $4\%$ ) 和界面处 Ti-V 混合掺杂模型采用  $2 \times 2$  的超晶胞结构,  $k$  点网格的选取为  $3 \times 3 \times 1$ .

### 3 结果与讨论

#### 3.1 $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1(111)$ 异质结

首先研究  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1(111)$  异质结的基态.

考虑了 FM 和 AFM 结构 (包括 A 型、C 型和 G 型 AFM 结构). 计算结果表明 C 型 AFM 结构是三种 AFM 结构中最稳定的一种. 然而, FM 态的能量比 C 型 AFM 态低  $279 \text{ meV}$ . 这意味着  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1(111)$  异质结的基态是 FM 态, Li 等<sup>[25]</sup> 计算的 SVO/STO(001) 异质结也曾得到这样的结论.

$(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1(111)$  的俯视图和侧视图如图 1(a) 和图 1(b) 所示. 结构优化后该异质结的面内晶格常数为  $5.48 \text{ \AA}$  (对应于  $3.875 \text{ \AA}$  的立方晶格常数). 图 1(c) 给出了沿  $c$  轴方向相邻原子层之间的距离, 可以看出, 层间距以 STO 界面层为中心, 具有明显的对称性. 异质结中间的 STO 层间距离较大, 约为  $1.14 \text{ \AA}$ . 这是因为 STO 的晶格常数大于 SVO 的晶格常数, 因此, STO 层由于面内压缩应力作用而向外移动, 导致 STO 原子层间距离增加. 从图 1(c) 还可以看到: 最大的层间距出现在离 STO 层最近的 V-SrO<sub>3</sub> 之间, 为  $1.147 \text{ \AA}$ ; 次近的 V-SrO<sub>3</sub> 之间的层间距最小, 为  $1.087 \text{ \AA}$ , 可见异质结中 STO 中间层的存在打破了 SVO 晶格结构的平移对称性, 使 SVO 晶格产生了畸变. 对于同一 SrO<sub>3</sub> 层中的 O 离子和 Sr 离子, 在结构优化后沿  $c$  轴的位移也不相等. 从图 1(d) 可以看出各层 Sr



离子和 O 离子的相对位移也具有明显的对称性: Ti 原子层两侧的  $\text{SrO}_3$  层中 Sr 离子与 O 离子的相对位移最大, 为 0.036 Å. SVO 层中 Sr 离子和 O 离子的相对位移也体现了 SVO 的晶格畸变, 将导致 V 3d 轨道的劈裂和体系电子结构的改变.

块体 STO 是非磁绝缘体, 其能带的价带顶部由 O 2p 轨道组成, 导带的底部主要由 Ti 的  $t_{2g}$  轨道组成, 由 GGA 方法计算得到的间接间隙为 1.81 eV, 直接间隙为 2.16 eV<sup>[35]</sup>. GGA 方法计算 SVO 块体材料的基态为非磁金属, V 的  $t_{2g}$  轨道跨越费米能级; GGA +  $U$  计算的结果是铁磁金属, 磁矩为  $0.883 \mu_B$ <sup>[36]</sup>. 为讨论 SVO 与 STO 沿 [111] 方向堆叠形成的  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1(111)$  异质结的电子结构, 计算了该体系的能带结构和态密度. 从图 2(a) 的能带图可以看出, 费米能级穿过自旋向上的能带 (黑色实线), 而自旋向下的能带 (红色实线) 存在约 1.80 eV 的带隙, 费米能级落在带隙中, 表明

该体系具有铁磁半金属性质. 这与构成该异质结的 STO 和 SVO 块体材料的能带结构和性质有所不同. 另外, 从图 2(a) 还能看出载流子表现出很强的各向异性特征: 沿  $G-K$  方向导带底的曲率小于沿  $G-M$  方向的曲率, 说明载流子沿  $G-K$  方向的有效质量大于沿  $G-M$  方向的有效质量. 这与 LAO/STO(111) 异质结的研究结果很相似<sup>[37,38]</sup>.  $G-Z$  方向的能带有约 0.25 eV 的带宽, 这意味着载流子穿越绝缘层 STO, 存在一个跨平面间的传输, 这从各原子层在费米面附近的态密度图也可得到验证: STO 层的费米面穿过导带底, 表明 STO 已非绝缘层, 存在导电电子. 图 2(b) 在费米能级附近的总态密度 (TDOS) 也证实了体系的半金属性质, 该体系的半金属能隙  $E_{\text{HM}}$  约为 0.426 eV, 大于在 LAO/STO(111) 界面的半金属能隙 (0.20 eV)<sup>[38]</sup>. 为进一步探讨该体系半金属性的起源, 图 2(c) 给出了  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1(111)$  各原子层在费米面附近的态

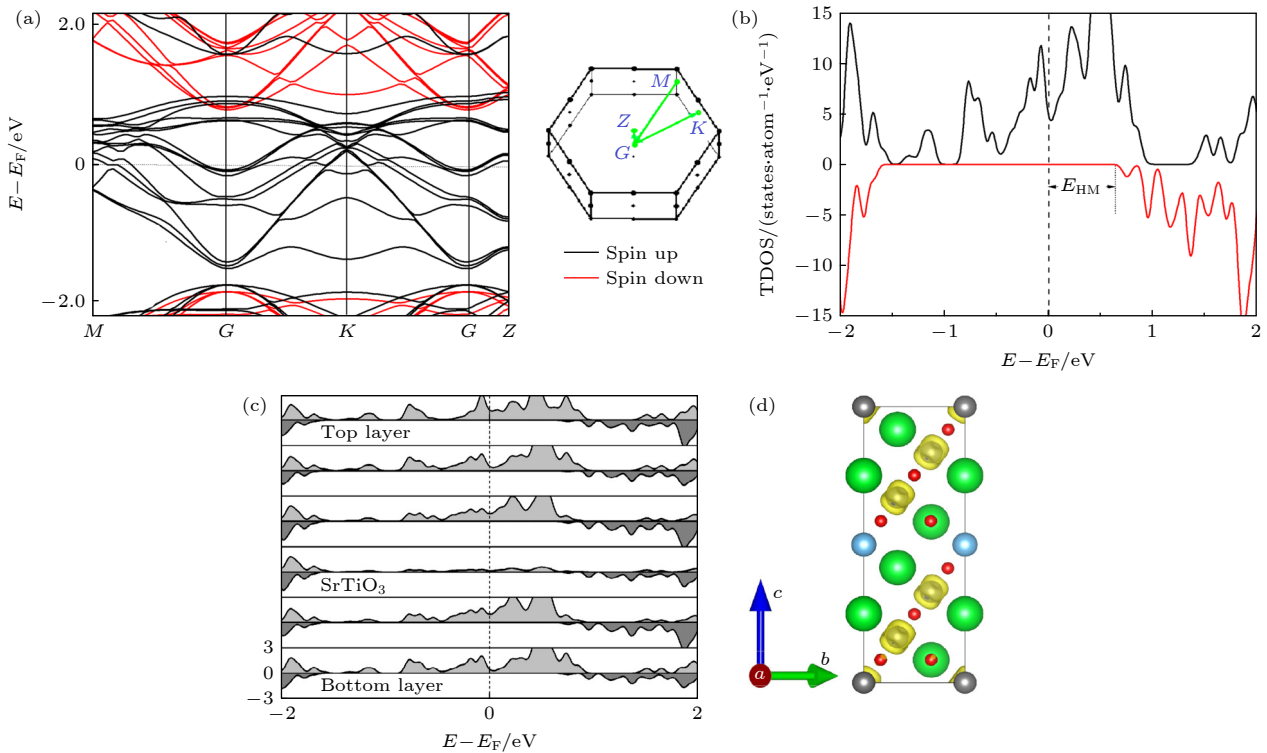


图 2 (a)  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1(111)$  异质结费米面附近的能带结构, 高对称点如图中第一布里渊区所示; (b) 费米面附近的总态密度图, 费米能位于 0 eV 处 (用黑色虚线表示); (c)  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1(111)$  各原子层在费米面附近的态密度图, 图中自旋向上的电子态密度由浅灰色区域表示, 自旋向下的电子态密度由深灰色区域表示, 黑色虚线表示费米能级; (d) 费米面附近 ( $[E_F - 1.5 \text{ eV}, E_F]$ ) 的电荷密度图, 图中三维电荷密度的 isosurface 值取  $0.015 \text{ e}/\text{bohr}^3$

Fig. 2. (a) Band structures of  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1(111)$  along with the special points in the Brillouin zone. The inset shows the Brillouin zone and the special points. (b) Total density of states (TDOS) near the Fermi level. The Fermi level is located at 0 eV (dotted black line). (c) Layer-resolved partial density of states (PDOS) of  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1(111)$ . (d) Projections of the carrier density (yellow contour) of  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1(111)$  heterostructure. The isosurface values are chosen as  $0.015 \text{ e}/\text{bohr}^3$ . The carrier densities are calculated from contributions within an energy window of  $[E_F - 1.5 \text{ eV}, E_F]$ .

密度图. 可以看出, 体系半金属性主要来自 SVO 层, STO 层也有少量的贡献. 为了直观地得到载流子的空间分布, 绘制了费米面附近电子态密度的三维等值面图, 如图 2(d) 所示, 可以看到载流子主要分布在 V 离子附近的区域.

为研究自旋极化载流子的构成, 图 3(a) 给出了各原子的态密度. 可以看出费米能级处的态密度主要是由 V 和 O 原子贡献的. 由于本模型以 STO 界面层为中心显示出一定的对称性, 所以图 3(b) 中只显示了 V1, V2 和 V3 原子 3d 轨道的分波态密度图. 由于 (111) 钙钛矿异质结的三角对称取代了块体钙钛矿材料的四方对称<sup>[39]</sup>, 三角晶体场中的 V 3d 轨道劈裂为  $a_{1g}$ ,  $e'_g$  和  $e_g$  三组<sup>[40]</sup>, 因此本模型 V 3d 轨道的劈裂与 SVO 块体材料<sup>[41]</sup> 和 (001), (110) 钙钛矿异质结<sup>[20,42]</sup> 中 d 轨道的劈裂表现出明显不同. 从图 3(b) 可以看出, V 3d 轨道都越过费米能级, 是体系中自旋极化载流子的主要来源, 但各层 V 的 3d 轨道占据率略有不同. 结合异质结中不同的层间距 (图 1(c)), 可以看出沿 [111] 方向, 各层的 V—O 键因为界面 STO 层的加入产生了不同的畸变, 导致各层 V 3d 轨道劈裂及其占据率不

同. 而且, 态密度图中电子自旋向上与自旋向下并不对称, 这种不对称导致了体系的磁性. 各层 V 3d 轨道劈裂占据率的不同, 也导致各层 V 的磁矩略有差异, 自上而下分别为  $1.125 \mu_B$ ,  $1.176 \mu_B$ ,  $1.043 \mu_B$ ,  $1.043 \mu_B$ ,  $1.178 \mu_B$ , 与 Musa Saad<sup>[36]</sup> 的计算结果 ( $1.180 \mu_B$ ) 相似. 体系总磁矩为  $5.0 \mu_B$ , 而整数磁矩是半金属材料一个重要标志. 结合图 3(b)—图 3(d) 的 V 3d, O 2p, Ti 3d 轨道的分波态密度图, 可以看出 V 3d 与 O 2p 轨道、Ti 3d 与 O 2p 轨道都有杂化, 但 V 3d 与 O 2p 轨道的杂化要比 Ti 3d 与 O 2p 轨道杂化更强烈.

### 3.2 面内应变对电子结构的影响

当向异质结施加面内应变时, 系统的基态可能会发生变化, 为此我们构建了  $2 \times 2$  的超胞结构, 计算并对比了施加 8% 的面内压缩应变到 4% 的面内拉伸应变范围内, 体系对应的 FM 态和 AFM 态的总能量. 计算结果表明: 在 4% 的面内拉伸应变和 8% 的面内压缩应变下, 反铁磁态能量最低, 磁序如图 4(a) 所示; 在 2%, 4%, 7% 的面内压缩应变和 2% 的面内拉伸应变下, 铁磁态的能量比最稳定

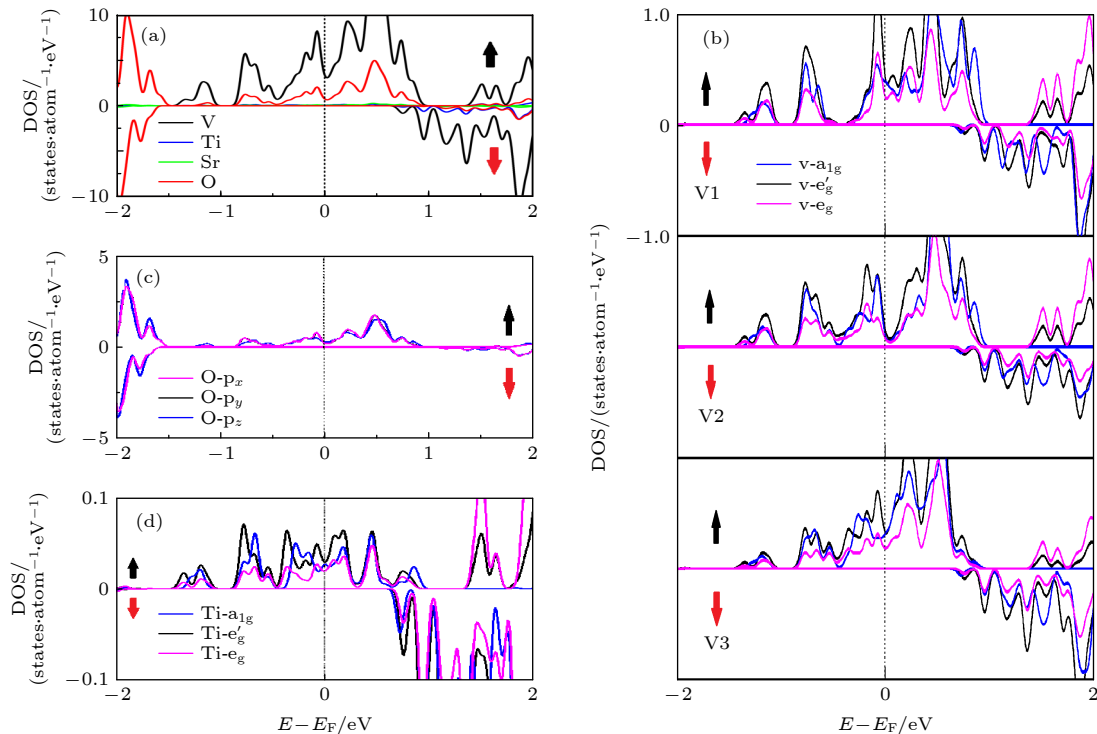


图 3 (a) V, Ti, Sr, O 原子的态密度图; (b) V 原子 3d 轨道的分波态密度图, 其中, V1, V2, V3 与图 1(b) 中标注一致; (c) O 原子 2p 轨道的分波态密度图; (d) Ti 原子 3d 轨道的分波态密度图

Fig. 3. (a) Densities of states near the Fermi level of V, Ti, Sr and O. (b) Partial densities of states (PDOS) of V 3d orbitals. V1, V2, V3 are the same as those in Fig. 1(b). (c) PDOS of the O 2p orbitals. (d) PDOS of the Ti 3d orbitals.

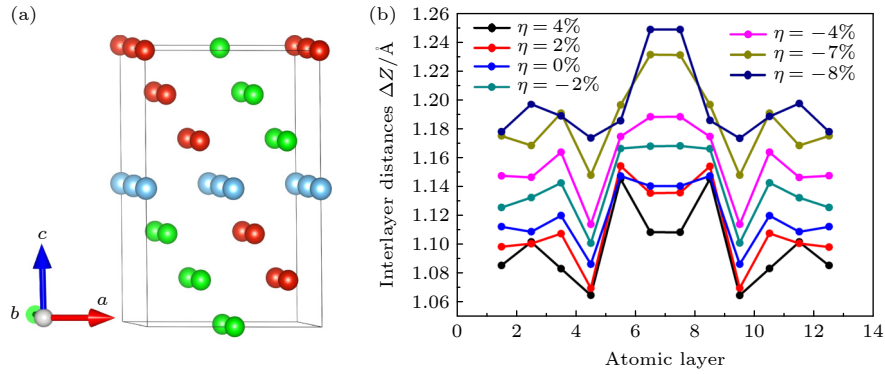


图 4 (a) 面内压缩应变为 8% 和面内拉伸应变为 4% 时能量最低的反铁磁序. 红色小球代表自旋向上的 V 原子, 绿色小球代表自旋向下的 V 原子, 蓝色小球代表 Ti 原子. (b) 在不同的面内应变条件下, 沿  $c$  轴方向各原子层之间的距离

Fig. 4. (a) The most stable AFM structure of  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1(111)$  under the in-plane compressive (tensile) strain of 8% (4%). The red and green balls represent the spin-up and spin-down V atoms, respectively. Blue balls represent Ti atoms. (b) The interplanar distance along the  $c$  axis between consecutive planes under different in-plane strains.

的反铁磁态分别低约 1.25, 1.39, 1.05 和 0.90 eV, 体系磁基态为铁磁态. 图 4(b) 为不同面内应变作用下沿  $c$  轴方向各原子层之间的距离. 可以看出, 不同面内应变下原子层间距离的变化趋势与未施加面内应变相似, 层间距以 STO 界面层为中心, 具有明显的对称性. 体系各原子层间距随着面内压应变的增加而增大, 随着面内张应变的增加而减小. 在 2% 的面内压缩应变作用下, STO 的原子层间距与其最近原子层 V-SrO<sub>3</sub> 层间距相似; 随着面内压缩应变的增加, 最大层间距不再出现在离 STO 层最近的 V-SrO<sub>3</sub> 之间, 而是出现在 STO 层; 而且, 随着面内缩压应变的增加, 相较 SVO 的层间距, STO 层间距增加的更为明显.

通过图 5(SVO)<sub>5</sub>/(STO)<sub>1</sub>(111) 异质结在不同面内应变下费米面附近的能带结构可以看出, 面内应变对材料的基态和电子结构有显著的影响. 当施加的面内压缩应变增加到 8% (即图 5(a)  $\eta = -8\%$ ) 时, 自旋向上和自旋向下的能带相互重叠, 体系总磁矩为 0  $\mu_B$ , 材料基态为反铁磁态, 磁序如图 5(a) 所示; 费米能级位于带隙内, 且在费米能级附近的带宽非常窄, 说明电子的有效质量非常大, 电子局域化明显, 体系是一种反铁磁绝缘材料. 随着面内压缩应变减小到 7% (即图 5(b)  $\eta = -7\%$ ) 时, 自旋向上和自旋向下的能带不再相互重叠, 体系呈现铁磁基态, 且在费米能级附近的带宽较  $\eta = -8\%$  时有所增大, 说明电子的有效质量比  $\eta = -8\%$  时有所减小, 但在费米面附近仍有一个较窄的带隙. 当在 -4%—2% 的范围内施加面内应变 (即  $\eta = -4\%$ —2%) 时, 从能带图上看费米能级穿过自旋向上

的能带 (黑色实线), 而自旋向下的能带 (红色实线) 存在带隙, 费米能级落在该带隙中. 在  $\eta = -4\%$ —2% 范围内, 体系总磁矩都为 5.0  $\mu_B$ , 表明该体系是铁磁半金属, 且可以在相当大的面内应变范围内保持其半金属性, 具有一定的稳定性. 导带底主要由 V 3d 电子构成, 对比图 5(c) 和图 5(d), 随着面内压应变的减小, 导带底出现不同程度的上移, 相应的半金属的能隙略有增加, 分别为 0.2456 eV ( $\eta = -4\%$ ) 和 0.3137 eV ( $\eta = -2\%$ ); 图 5(e) 显示当面内应变改为 2% 的拉伸应变 ( $\eta = 2\%$ ) 时, 自旋向下的导带底上移, 半金属的能隙增加为 0.4847 eV. 这意味着适当的面内拉伸应变有助于增加该材料半金属特征的稳定性. 当面内拉伸应变为 4% (即图 5(f)  $\eta = 4\%$ ) 时, 自旋向上和自旋向下的能带相互重叠, 体系总磁矩为 0  $\mu_B$ , 材料基态为反铁磁态. 费米能级位于带隙内, 说明体系是反铁磁绝缘材料.

为进一步分析面内应变对自旋极化载流子的影响, 计算了不同面内应变下 (SVO)<sub>5</sub>/(STO)<sub>1</sub>(111) 异质结中各原子的态密度, 如图 6 所示. 从图 6(a) 可以看出, 费米面落在带隙中间, 且电子局域化明显, 电子的有效质量非常大, 体系呈反铁磁绝缘体. 图 6(b) 较图 6(a) 中电子的局域程度虽有所降低, 但在费米面附近仍存在较小带隙, 且自旋极化载流子浓度较小. 因此, 在该应变情况下材料的导电性能较差, 是面内应变调控 (SVO)<sub>5</sub>/(STO)<sub>1</sub>(111) 超晶格从反铁磁绝缘体-铁磁半金属的过渡状态. 从图 6(c)—图 6(e) 可看出, 在  $\eta = -4\%$ —2% 应变下材料呈铁磁半金属态, 自旋极化载流子主要都是



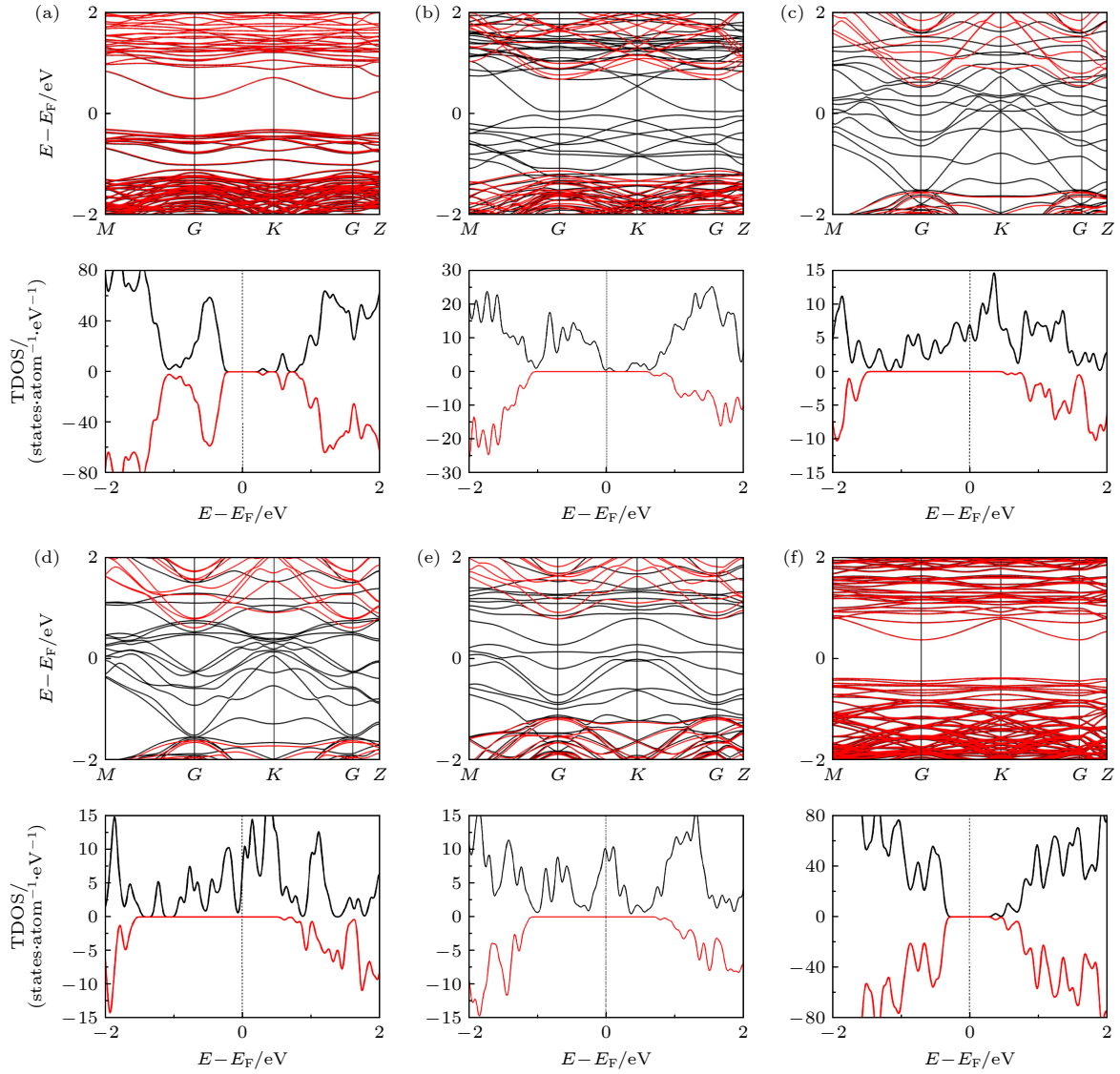


图5 (SVO)<sub>5</sub>/(STO)<sub>1</sub>(111) 异质结在不同面内应变下费米面附近的能带结构和总态密度图 (a)  $\eta = -8\%$ ; (b)  $\eta = -7\%$ ; (c)  $\eta = -4\%$ ; (d)  $\eta = -2\%$ ; (e)  $\eta = 2\%$ ; (f)  $\eta = 4\%$ . 高对称点如图2(a)中第一布里渊区所示, 对应面内应变下的总态密度图显示在能带图的下面. 黑色实线和红色实线分别代表自旋向上和自旋向下, 费米能级用虚线表示

Fig. 5. Band structures and total density of states near the Fermi level of (SVO)<sub>5</sub>/(STO)<sub>1</sub>(111) under different in-plane strains: (a)  $\eta = -8\%$ ; (b)  $\eta = -7\%$ ; (c)  $\eta = -4\%$ ; (d)  $\eta = -2\%$ ; (e)  $\eta = 2\%$ ; (f)  $\eta = 4\%$ . The Brillouin zone is the same as that in Fig. 2(a). Black and red lines are spin-up and spin-down states, respectively. The Fermi level is located at 0 eV (dotted black line).

由 V 和 O 原子贡献的, 且在面内应变情况下 V 和 O 原子都有很强轨道杂化. 图 6(f) 显示, 在  $\eta = 4\%$  时, 费米面落在带隙中间, 体系呈反铁磁绝缘体. 图 7 给出了  $\eta = -4\% \sim -2\%$  的面内应变范围内费米面附近电子态密度的三维等值面对比图. 可以看出: 有面内应变和无应变情况下, 费米面附近的载流子都主要来自 V 原子; 但在面内拉伸应变情况下, 在费米面附近 O 原子提供的载流子明显增多. 另外从图 7 还可以看出, 载流子的分布和磁矩的大小以 STO 层为中心呈对称分布, 这源于异质结中离子位移的对称性. 不同的面内应变使得氧八

面体产生不同畸变, 进而影响 V 3d 轨道的劈裂及轨道序. 图 8 给出了各面内应变情况下 (SVO)<sub>5</sub>/(STO)<sub>1</sub>(111) 异质结中 V 3d 轨道的态密度图, 可以看出 V 3d 轨道的劈裂和占据率都受面内应变的影响. 随着面内压缩应变的减小、面内拉伸应变的增加, 轨道  $a_{1g}$  逐渐向低能区移动, 轨道  $e_g$  逐渐向高能区移动. 图 8(a) 表明,  $\eta = -8\%$  时, 费米面附近的 V 3d 电子局域化明显, 对应体系呈绝缘体特征. 图 8(b) 表明,  $\eta = -7\%$  时, V 的  $e_g$  轨道跨过费米面, 但自旋极化的载流子浓度较小. 从图 8(c) — 图 8(e) 可看出, 自旋向上的 V 3d 轨道都跨过费米

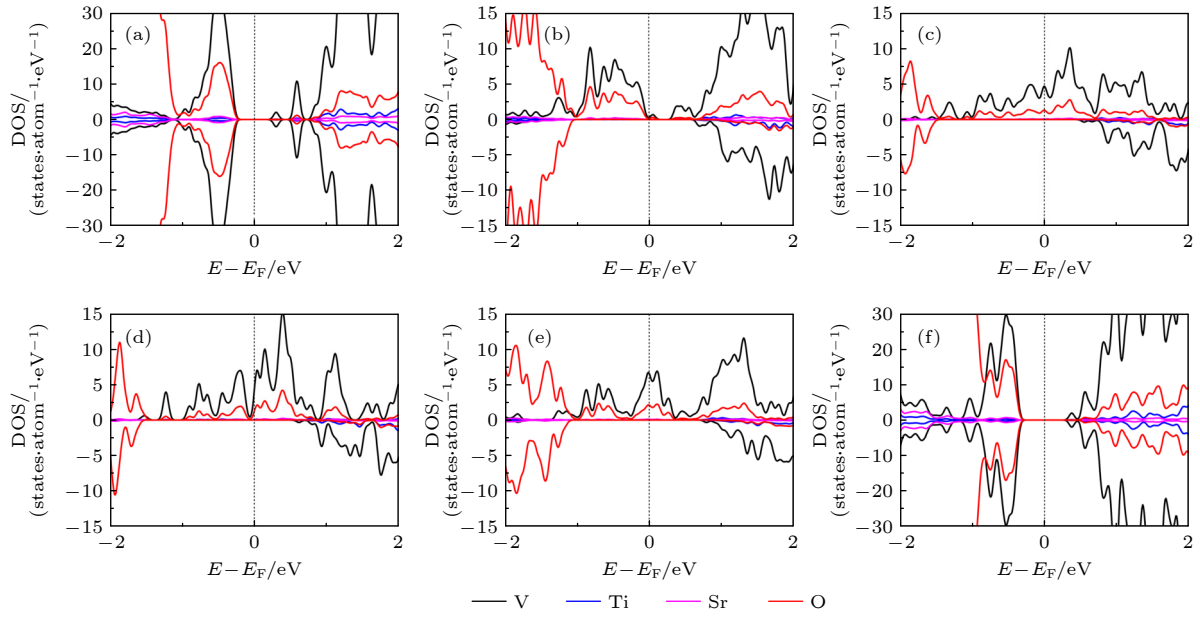


图 6 不同面内应变下 (SVO)<sub>5</sub>/(STO)<sub>1</sub>(111) 异质结中各原子的态密度图 (a)  $\eta = -8\%$ ; (b)  $\eta = -7\%$ ; (c)  $\eta = -4\%$ ; (d)  $\eta = -2\%$ ; (e)  $\eta = 2\%$ ; (f)  $\eta = 4\%$ . 不同颜色的实线代表不同原子的态密度图. 态密度图中上部为上自旋态密度, 下部为下自旋态密度, 费米能级用黑色虚线表示

Fig. 6. DOS near the Fermi level of the atoms in (SVO)<sub>5</sub>/(STO)<sub>1</sub>(111) under different in-plane strains: (a)  $\eta = -8\%$ ; (b)  $\eta = -7\%$ ; (c)  $\eta = -4\%$ ; (d)  $\eta = -2\%$ ; (e)  $\eta = 2\%$ ; (f)  $\eta = 4\%$ . Different orbitals are marked by different colored lines. The Fermi level is indicated by the dashed line.

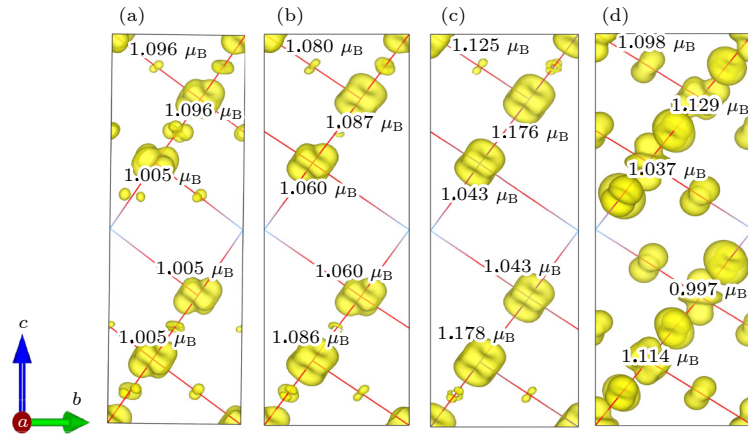


图 7 不同面内应变下铁磁半金属 (SVO)<sub>5</sub>/(STO)<sub>1</sub>(111) 异质结中费米面附近 ( $[E_F - 1.5 \text{ eV}, E_F]$ ) 的电荷密度图和各 V 原子的磁矩 (a)  $\eta = -4\%$ ; (b)  $\eta = -2\%$ ; (c)  $\eta = 0\%$ ; (d)  $\eta = 2\%$ . 图中三维电荷密度的 isosurface 值取  $0.015 \text{ e}/\text{bohr}^3$

Fig. 7. Projections of the carrier density (yellow contour) and magnetic moments of V atoms of (SVO)<sub>5</sub>/(STO)<sub>1</sub>(111) heterostructure under different in-plane strains: (a)  $\eta = -4\%$ ; (b)  $\eta = -2\%$ ; (c)  $\eta = 0\%$ ; (d)  $\eta = 2\%$ . The atoms are not shown. The isosurface values are chosen as  $0.015 \text{ e}/\text{bohr}^3$ . The carrier densities are calculated from contributions within an energy window of  $[E_F - 1.5 \text{ eV}, E_F]$ .

能级, 且部分填充, 为体系提供了 100% 自旋极化的载流子. 在  $\eta = -4\% \sim -2\%$  的面内应变范围内, 随着面内晶格常数的增加,  $a_{1g}$  电子逐渐取代  $e_g$  电子成为体系载流子的主要来源. 轨道劈裂及占据的改变源于施加面内应变导致的超晶格结构的变化: 面内晶格常数增加, 虽然层间距略有减小, 但 Ti—O 和 V—O 键长随面内拉伸应变的增加而变长, 这导致了  $a_{1g}$  能级的降低.  $a_{1g}$  轨道随面内拉伸应变

的增加被优先占据, 也表明该体系的电子态具有不同轨道占据率的强烈竞争. 图 8(f) ( $\eta = 4\%$ ) 中的 V 3d 轨道之间出现了带隙, 费米能级处于带隙中, 体系又呈现出绝缘体特征.

### 3.3 界面处 Ti-V 的扩散掺杂对电子结构的影响

即使是在晶格匹配良好的钙钛矿异质结中,



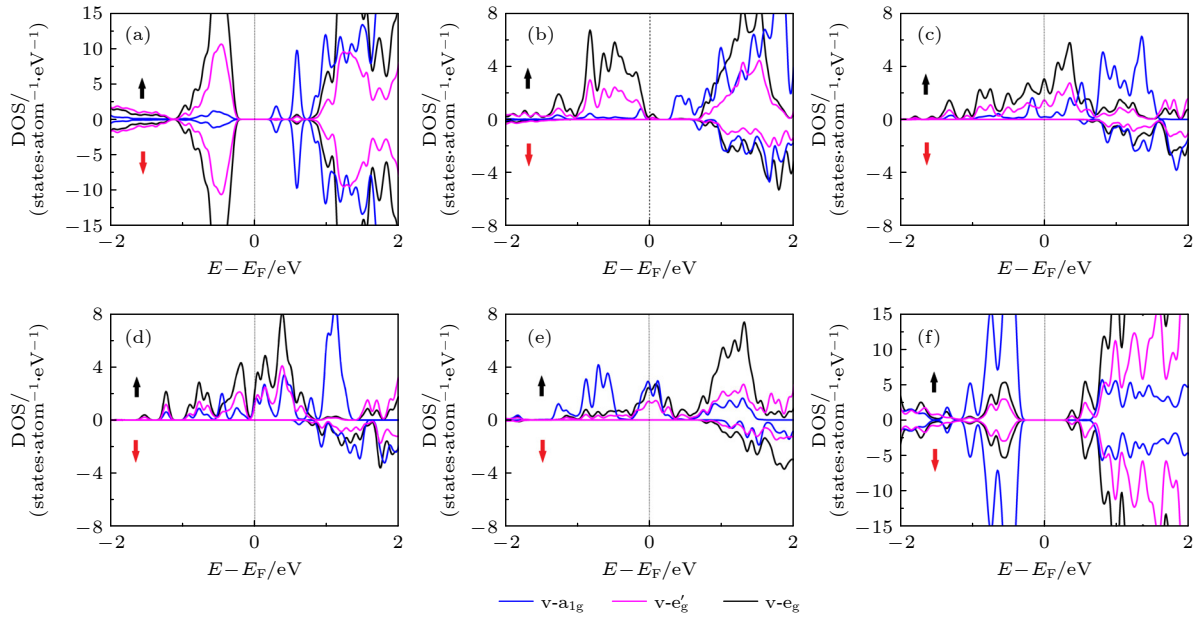


图 8 不同面内应变下  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1(111)$  异质结中 V 3d 轨道的态密度图 (a)  $\eta = -8\%$ ; (b)  $\eta = -7\%$ ; (c)  $\eta = -4\%$ ; (d)  $\eta = -2\%$ ; (e)  $\eta = 2\%$ ; (f)  $\eta = 4\%$ . 不同颜色的实线代表不同轨道; 态密度图中上部为上自旋态密度, 下部为下自旋态密度, 费米能级用虚线表示

Fig. 8. Projected density of states of V 3d near the Fermi level of  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1(111)$  under different in-plane strains: (a)  $\eta = -8\%$ ; (b)  $\eta = -7\%$ ; (c)  $\eta = -4\%$ ; (d)  $\eta = -2\%$ ; (e)  $\eta = 2\%$ ; (f)  $\eta = 4\%$ . Different orbitals are marked by different colored lines. The Fermi level is indicated by the dashed line.

也会在异质界面上发生由于阳离子扩散产生的缺陷, 这些缺陷会对异质结电子结构产生显著影响. 实验<sup>[25]</sup>证明 Ti 在 SVO/STO 界面确实存在扩散现象. 本文设计了两种界面处 Ti-V 扩散掺杂的模型, 如图 9(a)和图 9(d)所示. 计算结果表明: 界面处 Ti-V 扩散掺杂异质结的能量较理想异质结的能量分别低 4.91 和 4.92 eV. 因此界面处 Ti-V 的扩散是一个降低能量的过程, 因而界面处 Ti-V 扩散掺杂的异质结更稳定. 这种界面缺陷对异质结材料的电、磁性质必定会产生影响.

图 9(a) 是 Ti-V 扩散掺杂的异质结模型 I. 首先研究该模型的基态, 计算并对比了该模型 FM 和 AFM 结构的能量, 计算结果表明 FM 态的能量比能量最低的 AFM 态还低 4.19 eV, 这意味着 FM 态是该模型的基态. 从图 9(b) 总态密度图可看出, 该体系的费米能级落在带隙中, 且态密度图中电子自旋向上与自旋向下的不对称导致了体系的磁性, 体系总磁矩为  $20.0 \mu_B$ , 表明该体系具有铁磁绝缘体的基态. 这与理想界面  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1(111)$  异质结的铁磁半金属基态有明显的不同. Pardo 和 Pickett<sup>[6]</sup> 曾经研究过  $(\text{STO})_3/(\text{SVO})_n(001)$  异质结 ( $1 \leq n \leq 5$ ), 研究结果表明在  $n \leq 4$  时体系是铁磁绝缘体, 本文与他们的研究结果具有一致性.

图 9(c) 给出了各原子的态密度. 可以看出 V 与 O 原子依然有强烈的轨道杂化, 体系铁磁性主要来自 V 原子, 每个 V 原子贡献了约  $1.0 \mu_B$  的磁矩; O 原子也有少量的贡献. 可以看出, 界面处 Ti-V 扩散掺杂异质结的总磁矩与理想异质结的总磁矩相似, 但导电性却有明显差别. 图 9(d)—图 9(f) 是 Ti-V 扩散掺杂的异质结模型 II 的结构、总态密度图和各原子的态密度图, 可以看到与 Ti-V 扩散掺杂的异质结模型 I 相似的态密度图和相同的铁磁绝缘基态. 有研究表明, 用 Ti 取代 V 会降低 SVO 的电导率, 发生金属-绝缘体转变<sup>[43]</sup>. 在界面 Ti-V 扩散掺杂的模型 I 中, 界面附近 Ti-V 的掺杂导致体系的绝缘层由原来理想界面的一个原子层 (STO) 扩大到两个原子层 ( $\text{SV}_x\text{Ti}_{1-x}\text{O}$ ), 同时 SVO 层由原来理想界面的五个原子层缩小到四个原子层; 在界面 Ti-V 扩散掺杂的模型 II 中, 界面附近 Ti-V 的掺杂导致体系的绝缘层由原来理想界面的一个原子层 (STO) 扩大到三个原子层 ( $\text{SV}_x\text{Ti}_{1-x}\text{O}$ ), 同时 SVO 层由原来理想界面的五个原子层缩小到三个原子层. 三层或四层的 SVO 亚层低于金属-绝缘体转变的临界厚度<sup>[44]</sup>, 电子间的强关联效应开始成为主要的相互作用, 是界面 Ti-V 扩散掺杂的模型呈现绝缘体特征的主要原因<sup>[9,45]</sup>.

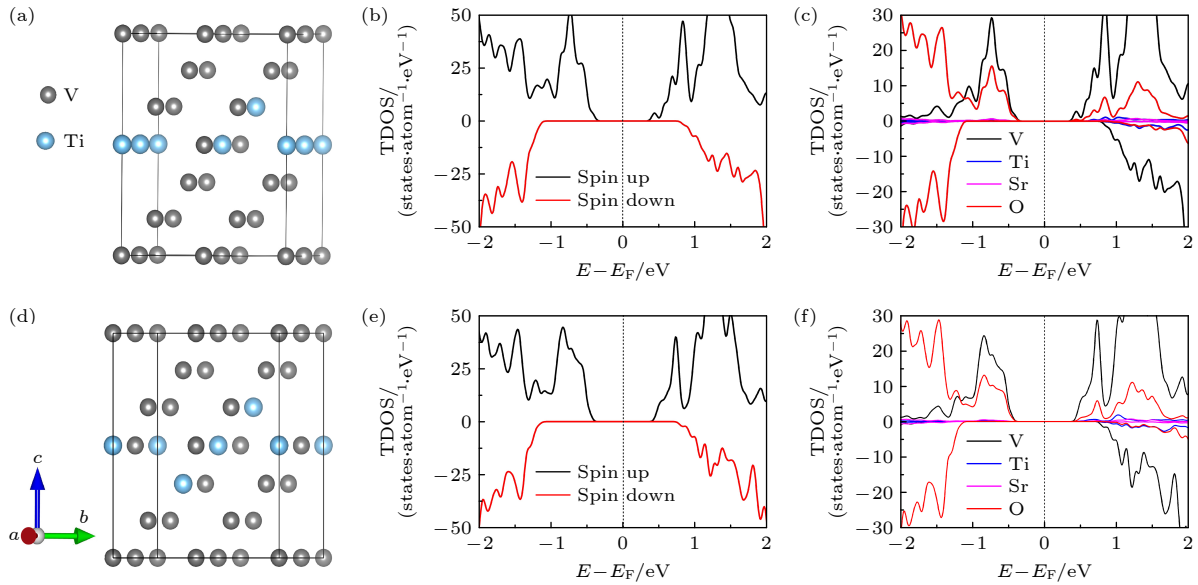


图9 (a) 界面 Ti-V 扩散掺杂模型 I 的  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1(111)$  侧视图 (图中只显示 Ti 和 V 原子); (b) 模型 I 费米面附近的总态密度, 费米能位于 0 eV 处 (用黑色虚线表示); (c) 模型 I 各原子的态密度图; (d) 界面 Ti-V 扩散掺杂模型 II 的  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1(111)$  侧视图 (图中只显示 Ti 和 V 原子); (e) 模型 II 费米面附近的总态密度, 费米能位于 0 eV 处 (用黑色虚线表示); (f) 模型 II 各原子的态密度图, 不同颜色的实线代表不同原子的态密度图. 态密度图中上部为上自旋态密度, 下部为下自旋态密度, 费米能级用虚线表示

Fig. 9. (a) Side view of  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1(111)$  heterostructure I with interfacial Ti-V intermixing; (b) total density of states of heterostructure I near the Fermi level; (c) DOS of atoms in heterostructure I near the Fermi level; (d) side view of  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1(111)$  heterostructure II with interfacial Ti-V intermixing; (e) total density of states of heterostructure II near the Fermi level; (f) DOS of atoms in heterostructure II near the Fermi level. Different orbitals are marked by different colored lines. The Fermi level is indicated by the dashed line.

## 4 结 论

本文研究了  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1(111)$  异质结的晶体结构和电子结构, 系统研究了面内应变和界面处 Ti-V 混合掺杂对  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1(111)$  异质结电、磁性能的影响. 通过对电子结构的计算分析, 发现  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1(111)$  异质结是铁磁半金属材料, 其磁性和载流子主要来自 V 3d 电子, 并在导电方面表现出较强的各向异性. 通过对不同面内应变下电子结构的计算分析, 证明了  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1(111)$  异质结的电子结构具有显著的灵活性, 也证明了面内应变可以有效地调控  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1(111)$  异质结的电、磁特性:  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1(111)$  异质结在 -4%—2% 的面内应变下保持其铁磁半金属性能, 具有相对的稳定性. 当面内拉伸应变高于 4% 或面内压缩应变高于 8% 时, 可以诱导材料从铁磁半金属-反铁磁绝缘体的转变. 通过比较界面处 Ti-V 混合掺杂前后的电子结构, 发现界面处 Ti-V 混合掺杂能破坏理想  $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1(111)$  异质结的铁磁半金属性质, 诱导材料从铁磁半金属-铁磁绝缘体

的转变. 铁磁绝缘体主要存在于一些亚铁磁性的铁氧体材料中, 在钙钛矿异质结中并不常见, 因此本研究不但为  $\text{SVO}/\text{STO}(111)$  异质结的金属-绝缘体转变、磁性能调控提供了理论参考, 也将进一步拓展钙钛矿异质结在自旋电子学领域的应用.

## 参考文献

- [1] Ohtomo A, Hwang H Y 2004 *Nature* **427** 423
- [2] Zhang X J, Chen P, Liu B G 2017 *J. Mater. Chem. C* **5** 9898
- [3] Davis S, Huang Z, Han K, Ariando, Venkatesan T, Chandrasekhar V 2018 *Phys. Rev. B* **98** 024504
- [4] Kim D H, Kim D W, Kang B S, Noh T W, Lee D R, Lee K B, Lee S J 2000 *Solid State Commun.* **114** 473
- [5] Dai Q, Lüders U, Frésard R, Eckern U, Schwingenschlögl U 2018 *Adv. Mater. Interfaces* **5** 1701169
- [6] Pardo V, Pickett W E 2010 *Phys. Rev. B* **81** 245117
- [7] James A D N, Aichhorn M, Laverock J 2021 *Phys. Rev. Res.* **3** 023149
- [8] Yang Z, Ko C, Ramanathan S 2011 *Annu. Rev. Mater. Res.* **41** 337
- [9] Xu R, Ji Y, Bouchilaoui R, Qian F, Li M, Zhang X, Tang R, Zhao R, Misra S, Wang H, Li W, Kan C, Shi D, Fan J, Yang H 2019 *Ceram. Int.* **45** 11304
- [10] Roth J, Kuznetsova T, Miao L X, Pogrebnikov A, Alemi N, Engel-Herbert R 2021 *APL Mater.* **9** 021114
- [11] Mitsuhashi T, Minohara M, Yukawa R, Kitamura M, Horiba

- K, Kobayashi M, Kumigashira H 2016 *Phys. Rev. B* **94** 125148
- [12] Jacobs R, Booske J, Morgan D 2016 *Adv. Funct. Mater.* **26** 5471
- [13] Yuan L, Xiao J H, Xie Y 2017 *Chin. Sci. Paper* **12** 2826 (in Chinese) [袁焱, 肖嘉慧, 谢颖 2017 中国科技论文 **12** 2826]
- [14] Shen M L, Weng Y K, Yi Y W, Geng Q F, Yan W, Wang H Y, Yang J P, Li X 2019 *J. Appl. Phys.* **126** 085307
- [15] Weng Y K, Zhang J J, Gao B, Dong S 2017 *Phys. Rev. B* **95** 155117
- [16] Okamoto S, Zhu W, Ran Y, Nagaosa N, Okamoto S 2011 *Nat. Commun.* **2** 1
- [17] Okamoto S, Zhu W, Nomura Y, Arita R, Xiao D, Nagaosa N 2014 *Phys. Rev. B* **89** 195121
- [18] Chen R, Lee S B, Balents L 2013 *Phys. Rev. B* **87** 161119
- [19] Doennig D, Pickett W E, Pentcheva R 2014 *Phys. Rev. B* **89** 121110
- [20] Du Y L, Wang C L, Li J C, Zhang X Z, Wang F N, Zhu Y H, Yin N, Mei L M 2015 *Comput. Mater. Sci.* **99** 57
- [21] Li Y N, Xie Y Q, Wang Y 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 227701 (in Chinese) [李永宁, 谢逸群, 王音 2021 物理学报 **70** 227701]
- [22] Hu H Y, Chen J K, Shao F, Wu Y, Meng K K, Li Z P, Miao J, Xu X G, Wang J O, Jiang Y 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 026701 (in Chinese) [胡海洋, 陈吉埜, 邵飞, 吴勇, 孟康康, 李志鹏, 苗君, 徐晓光, 王嘉鸥, 姜勇 2019 物理学报 **68** 026701]
- [23] Kalabukhov A S, Boikov Y A, Serenkov I T, Sakharov V I, Popok V N, Gunnarsson R, Borjesson J, Ljustina N, Olsson E, Winkler D, Claeson T 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 146101
- [24] Qiao L, LDroubay T C, Shutthanandan V, Zhu Z, Sushko P V, Chambers S A 2010 *J. Phys. Condens. Matter* **22** 312201
- [25] Li J, Yin D, Li Q, Sun R 2017 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19** 6945
- [26] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11169
- [27] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [28] Blöchl P E 1994 *Phys. Rev. B* **50** 17953
- [29] Anisimov V I, Zaanen J, Andersen O K 1991 *Phys. Rev. B* **44** 943
- [30] Du Y L, Wang C L, Li J C, Xu P P, Zhang X H, Liu J, Su W B, Mei L M 2014 *Chin. Phys. B* **23** 087302
- [31] Park S Y, Kumar A, Rabe K M 2017 *Phys. Rev. Lett.* **118** 087602
- [32] Monkhorst H J, Pack J D 1976 *Phys. Rev. B* **13** 5188
- [33] Shein I R, Kozhevnikov V L, Ivanovskii A L 2008 *Solid State Sci.* **10** 217
- [34] Chandra H K, Guo G Y 2017 *Phys. Rev. B* **95** 134448
- [35] Shein I R, Ivanovskii A L 2007 *Phys. Lett. A* **371** 155
- [36] Musa Saad H E M 2021 *Bull. Mater. Sci.* **44** 1
- [37] Beltrán J I, Muñoz M C 2017 *Phys. Rev. B* **95** 245120
- [38] Du Y L, Bu H X, Ji C J, Zhang X M, Li C L, Fang X N 2019 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **21** 18170
- [39] De Luca G M, Di Capua R, Di Gennaro E, Sambri A, Miletto Granozio F, Ghiringhelli G, Betto D, Piamonteze C, Brookes N B, Salluzzo M 2018 *Phys. Rev. B* **98** 115143
- [40] Ye H S, Zhu Y J, Bai D M, Zhang J T, Wu X S, Wang J L 2021 *Phys. Rev. B* **103** 035423
- [41] Yoshida T, Kobayashi M, Yoshimatsu K, Kumigashira H, Fujimori A 2016 *J. Electron. Spectrosc.* **208** 11
- [42] Ma H J H, Zhou J, Yang M, Liu Y, Zeng S W, Zhou W X, Zhang L C, Venkatesan T, Feng Y P, Ariando A 2017 *Phys. Rev. B* **95** 155314
- [43] Liu Z T Y, Podraza N J, Khare S V, Sarin P 2018 *Comput. Mater. Sci.* **144** 139
- [44] Oshima M 2014 *Appl. Sci. Conver. Technol.* **23** 317
- [45] Wang J, Gauquelin N, Huijben M, Verbeeck J, Rijnders G, Koster G 2020 *Appl. Phys. Lett.* **117** 133105



# First principle study of tuning metal-insulator transition and magnetic properties of $(\text{SrVO}_3)_5/(\text{SrTiO}_3)_1$ (111) heterostructures<sup>\*</sup>

Fang Xiao-Nan<sup>1)</sup> Du Yan-Ling<sup>2)†</sup> Wu Chen-Yu<sup>3)</sup> Liu Jing<sup>2)</sup>

1) (*College of Information Engineering, Shandong Management University, Jinan 250355, China*)

2) (*College of Intelligence and Information Engineering, Shandong University of Traditional Chinese Medicine, Jinan 250355, China*)

3) (*School of Physics, Shandong University, Jinan 250100, China*)

( Received 6 April 2022; revised manuscript received 10 May 2022 )

## Abstract

Perovskite heterostructure has a honeycomb lattice when a bilayer along the [111] direction is considered. The material usually presents a wealth of unique properties. Recently, (111)-oriented perovskite heterojunctions have received more and more attention. In this work, the first-principle calculations are employed to investigate the electronic and magnetic properties of  $(\text{SrVO}_3)_5/(\text{SrTiO}_3)_1$  (111) heterostructure. The calculations show that the ground state of  $(\text{SrVO}_3)_5/(\text{SrTiO}_3)_1$  (111) heterostructure is a half-metallic ferromagnet. Further study reveals the existence of different correlated-electron ground states in  $(\text{SrVO}_3)_5/(\text{SrTiO}_3)_1$  (111) heterostructure, and they can be tuned by changing in-plane strain and interfacial cation intermixing. This system can keep half-metallic properties under different in-plane strains from  $-4\%$  to  $2\%$ . The half-metallic properties mainly come from V 3d electrons. The ground state of the system can evolve from a half-metal to a antiferromagnetic insulator if the in-plane compressive (tensile) strain is added up to  $8\%$  ( $4\%$ ). The interfacial Ti-V intermixing can destroy the original half-metallic properties, and the system exhibits a ferromagnetic insulator phase. These results demonstrate that the system has potential applications in the field of spintronics, and provide a theoretical reference for the use of  $(\text{SrVO}_3)_5/(\text{SrTiO}_3)_1$  (111) heterostructures to explore quantum phase transitions.

**Keywords:** heterostructures, in-plane strain, metal-insulator transition, half-metallic ferromagnets

**PACS:** 73.21.Cd, 71.30.+h, 75.70.Cn

**DOI:** 10.7498/aps.71.20220627

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 82174528), the Start-up Fund for Doctoral Research of Shandong Management University, China (Grant No. SDMUD201901), and the Scientific Research Start-up Project of Shandong Management University, China (Grant No. QH2020Z05).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [duyanling@sdutcm.edu.cn](mailto:duyanling@sdutcm.edu.cn)

( $\text{SrVO}_3$ )<sub>5</sub>/( $\text{SrTiO}_3$ )<sub>1</sub> (111) 异质结金属-绝缘体转变和磁性调控的第一性原理研究

房晓南 杜颜伶 吴晨雨 刘静

**First principle study of tuning metal-insulator transition and magnetic properties of ( $\text{SrVO}_3$ )<sub>5</sub>/( $\text{SrTiO}_3$ )<sub>1</sub> (111) heterostructures**

Fang Xiao-Nan Du Yan-Ling Wu Chen-Yu Liu Jing

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 187301 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20220627

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220627>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphys.ac.cn>

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

掺杂维度和浓度调控的  $\delta$  掺杂的  $\text{La:SrTiO}_3$  超晶格结构金属-绝缘体转变

Tuning metal-insulator transition in  $\delta$ -doped  $\text{La:SrTiO}_3$  superlattice by varying doping dimensionality and concentration

物理学报. 2021, 70(22): 227102 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210830>

电触发二氧化钒纳米线发生金属-绝缘体转变的机理

Mechanism of electrically driven metal-insulator phase transition in vanadium dioxide nanowires

物理学报. 2018, 67(17): 177201 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180835>

基于MXene涂层保护 $\text{Cs}_3\text{Sb}$ 异质结光阴极材料的计算筛选

Computational screening of photocathodes based on layered MXene coated  $\text{Cs}_3\text{Sb}$  heterostructures

物理学报. 2021, 70(21): 218504 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210956>

Pb掺杂对 $\text{Cd}_2\text{Ru}_2\text{O}_7$ 反常金属态的调控

Effect of Pb doping on metallic state of cubic pyrochlore  $\text{Cd}_2\text{Ru}_2\text{O}_7$

物理学报. 2018, 67(12): 127402 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180343>

$\text{Pt/BiFeO}_3/\text{Nb:SrTiO}_3$  异质结的光伏效应和光调控整流特性

Photovoltaic effect and photo-assisted diode behavior in  $\text{Pt/BiFeO}_3/\text{Nb-doped SrTiO}_3$  heterojunction

物理学报. 2020, 69(12): 127301 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200280>

过渡金属二硫化物/三卤化铬范德瓦耳斯异质结的反折叠能带

Study of transition metal dichalcogenides/chromium trihalides van der Waals heterostructure by band unfolding method

物理学报. 2022, 71(14): 147101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220326>