

间隔层调控 $\text{SrVO}_3/\text{SrTiO}_3$ 超晶格铁磁半金属-铁磁绝缘体转变*

房晓南¹⁾ 危芹²⁾ 隋娜娜²⁾ 孔志勇²⁾ 刘静²⁾ 杜颜伶^{2)†}

1) (山东管理学院信息工程学院, 济南 250357)

2) (山东中医药大学智能与信息工程学院, 济南 250355)

(2022 年 9 月 9 日收到; 2022 年 10 月 8 日收到修改稿)

本文利用基于密度泛函理论 (DFT) 的第一性原理计算研究了 $\text{SrVO}_3/\text{SrTiO}_3(111)$ 超晶格的电子结构、电学和磁学性质. 研究表明, $\text{SrVO}_3/\text{SrTiO}_3(111)$ 超晶格可通过调节间隔层 SrTiO_3 的厚度实现铁磁半金属-铁磁绝缘体的转变. SrVO_3 亚层之间可以通过厚度为 2 个原子层的 SrTiO_3 间隔层发生层间耦合, 超晶格呈现铁磁半金属态; 当间隔层 SrTiO_3 的厚度等于 3 个原子层时, 超晶格出现小的带隙 (约 0.28 eV); 当间隔层 SrTiO_3 的厚度大于 3 个原子层时, 超晶格出现较大带隙, 呈现铁磁绝缘态. 进一步对 $\text{SrVO}_3/\text{SrTiO}_3$ 界面附近由于 Ti-V 混合导致的缺陷界面进行研究发现, 界面附近的 Ti-V 混合对金属-绝缘体转变具有重要的影响: 与理想界面相比, Ti-V 混合的缺陷界面更能抑制层间耦合, 诱导超晶格实现铁磁半金属-铁磁绝缘体的转变. 本研究结果为 $\text{SrVO}_3/\text{SrTiO}_3(111)$ 超晶格通过调控间隔层 SrTiO_3 层数实现铁磁半金属-铁磁绝缘体的转变提供了理论依据.

关键词: 超晶格, 金属-绝缘体转变, 铁磁半金属, 铁磁绝缘体

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

DOI: 10.7498/aps.71.20221765

1 引言

钙钛矿氧化物是一类有趣而重要的功能材料, 其新奇且具有应用价值的磁电特性一直是现代电子信息功能材料领域研究的热点. 在钙钛矿氧化物家族中, $\text{SrVO}_3(\text{SVO})$ 是一种很有前途的材料, 不但可以作为导电电极^[1]和透明导体^[2], 其物理性质还可以通过引入界面、掺杂、应变和降维等来调控, 引起了研究者的广泛关注. Kim 等^[3]曾在 $\text{SrTiO}_3(\text{STO})$ 衬底上生长了 SVO/STO 超晶格结构, 发现虽然 SVO 薄膜的死层约为 10 个原子层, 但较薄的 SVO 亚层在 SVO/STO 超晶格里变成金属, 且

随着 SVO 层数的减少, SVO/STO 超晶格呈现出金属-绝缘行为的转变. Wang 等^[4]通过实验研究发现: 与 SVO/STO 异质结相比, 超晶格中 SVO 亚层之间的层间耦合可以导致 SVO/STO 超晶格电导率增强, 并认为随着 SVO 薄膜厚度的降低, 电子-电子相关性开始成为主要的相互作用. 另有研究^[5]认为在 SVO/STO 界面附近存在氧空位, 输运测量进一步揭示了无序, 而不是电子相关性, 这是 SVO/STO 超晶格中金属-绝缘行为转变的主要原因. 目前, SVO 薄膜中金属-绝缘体转变的原因仍需继续研究, 维度效应和界面无序的作用也仍存在激烈的争论^[3-6].

Pardo 和 Pickett^[6]曾对 $\text{STO}/\text{SVO}(001)$ 超晶

* 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

格进行模拟计算,发现当 STO 亚层为 4 个原子层, SVO 亚层在 4 和 5 个原子层之间时,体系出现绝缘体-金属的跃迁,且发现 SVO 亚层为 4 个原子层时,体系的绝缘行为是由铁磁 Mott 绝缘态引起. 铁磁性绝缘体为许多新的磁性器件所需,如无耗散的量子自旋电子器件、磁性隧穿结等. 但因为材料中的绝缘状态通常与反铁磁 (AFM) 超交换相互作用耦合,所以铁磁绝缘体比较罕见^[7,8]. 另外, (111) 取向的钙钛矿超晶格具有独特的六角蜂窝状结构, Okamoto 等^[9]曾研究预言在 (111) 取向的钙钛矿超晶格中可能存在多种量子态,包括非磁性金属态、铁磁态、半金属、反铁磁态、莫特绝缘体等. Beltrán 和 Muñoz^[10]证明了在 $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ (111) 超晶格中存在铁磁半金属态. 铁磁半金属 (ferromagnetic half-metal) 材料也是近年来日益受到关注的一种新材料,在其能带结构中,两个自旋子能带分别具有不同的导电特性,从而产生完全自旋极化的传导电子. 近年来,陆续发现具有铁磁半金属特性的 $\text{SrTiO}_3/\text{SrRuO}_3$ ^[11], $\text{LaMnO}_3/\text{SrTiO}_3$ ^[12], $\text{SrCoO}_3/\text{SrTiO}_3$ ^[13], $\text{LaMnO}_3/\text{SrMnO}_3$ ^[14] 等钙钛矿异质结. 目前,不论是铁磁半金属还是铁磁绝缘体,都被视为构建自旋电子器件的理想材料. 若能在 SVO/STO 超晶格中实现铁磁半金属-铁磁绝缘体转变的有效调控,将使该材料有可能在新一代自旋电子设备中发挥重要作用.

鉴于众多研究表明间隔层控制可以作为调控材料磁性和导电性的有力手段^[15–17]. 本文将系统研究间隔层 STO 的厚度对 SVO/STO(111) 超晶格电、磁特性的影响,探索通过间隔层 STO 的厚度来调控 SVO/STO(111) 超晶格的量子态. 通过研究发现,在 SVO/STO(111) 超晶格中存在铁磁半金属和铁磁绝缘态,并且通过改变间隔层 STO 的厚度可以有效调控 SVO/STO(111) 超晶格铁磁半金属-铁磁绝缘体的转变. 另外,有实验研究发现,在 SVO/STO 界面附近,容易形成 Ti-V 的混合缺陷导致的界面粗糙与无序^[18,19]. 在二维系统中,粗糙与无序的存在将驱动系统走向绝缘行为^[3,20],因此,本文将进一步对 SVO/STO 界面附近 Ti-V 混合缺陷导致的界面粗糙与缺陷进行研究. 研究发现界面附近的 Ti-V 混合缺陷确实在超晶格的金属-绝缘体转变中发挥了重要的作用:与理想界面相比, Ti-V 混合的缺陷界面更能抑制层间耦合,也

更有利于超晶格呈现稳定的铁磁绝缘态. 本工作证明 SVO/STO(111) 超晶格在自旋电子学领域具有很高的应用潜力.

2 计算方法

本文主要应用 VASP (Vienna *ab-initio* simulation package)^[21] 程序包,利用基于密度泛函理论框架下的投影缀加平面波 (projector-augmented wave, PAW) 方法^[22],并采用广义梯度近似下的 PBE^[23] (Perdew-Burke-Ernzerhof) 泛函来描述交换关联效应. 考虑了 Ti 和 V 的 d 电子在位库仑排斥作用,采用 GGA + U 处理电子间的交换关联势^[24]. 对 Ti 的 d 电子取 $U = 5.00$ eV, $J = 0.64$ eV^[25],对 V 的 d 电子取 $U = 4.00$ eV, $J = 0.60$ eV^[26]. 在晶格弛豫计算过程中,平面波截断能设为 500 eV,每个原子上的作用力收敛精度取为 0.01 eV/Å,连续两个电子步之间的能量差小于 1×10^{-5} eV 时停止弛豫.

块体 STO 和 SVO 都是立方结构,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. 对它们的结构进行优化时,采用中心的 Monkhorst-Pack 方法^[27]进行第一布里渊区采样, k 点网格选取 $8 \times 8 \times 8$. 本文建构 $(\text{SVO})_m/(\text{STO})_n$ (111) 模型,参数 m 和 n 设置为不同的值,代表不同的 SVO 和 STO 亚层原子层数目. 为研究 STO 间隔层的厚度对 SVO/STO(111) 超晶格磁、电性质的影响,采用固定变量的方法:固定 SVO 层厚度,对比不同 STO 层的厚度对体系磁、电性能的影响. 为避免以点概面,本文设计了 3 组超晶格的对比模型,分别是超晶格 $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1$ (111) 和 $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_4$ (111),超晶格 $(\text{SVO})_4/(\text{STO})_2$ 和 $(\text{SVO})_4/(\text{STO})_5$, $(\text{SVO})_6/(\text{STO})_3$ 和 $(\text{SVO})_6/(\text{STO})_6$. 考虑到沿 [111] 方向 $(\text{SVO})_m/(\text{STO})_n$ (111) 超晶格的对称性和周期性^[10],构建 $m+n = 3N$ (N 为整数) 的超晶格模型. 图 1(a) 和图 1(b) 给出了本研究使用的 $(\text{SVO})_m/(\text{STO})_n$ (111) 模型中的一个: $(\text{SVO})_4/(\text{STO})_5$ (111) 超晶格的顶视图和侧视图. 该模型包含 4 个 SVO 晶胞和 5 个 STO 晶胞的超晶格结构,图 1(b) 标出了 V-O 八面体结构. 其中, STO 沿 [111] 方向是由 Ti 和 SrO_3 交替叠加

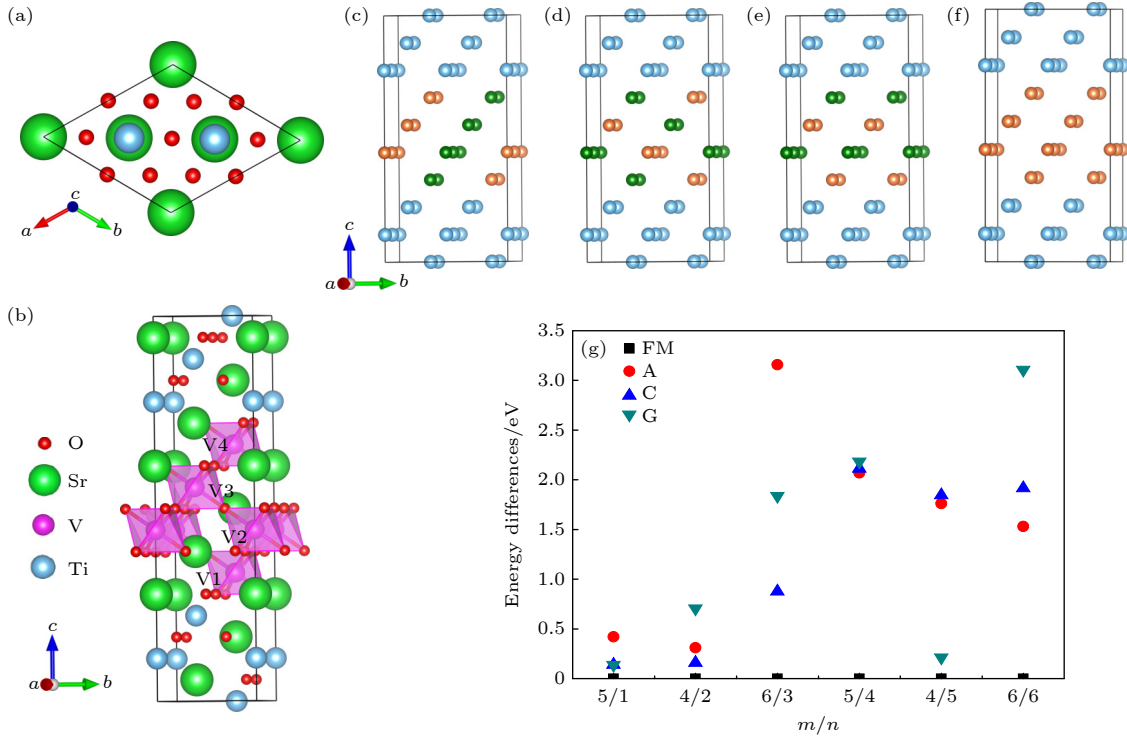


图 1 (a) 超晶格 $(\text{SVO})_m/(\text{STO})_n(111)$ ($4 \leq m \leq 6$; $1 \leq n \leq 6$) 的模型之一 $(\text{SVO})_4/(\text{STO})_5(111)$ 超晶格的顶视图; (b) 超晶格 $(\text{SVO})_4/(\text{STO})_5(111)$ 的侧视图; (c) A-AFM 示意图; (d) C-AFM 示意图; (e) G-AFM 示意图; (f) FM 示意图; (g) 各模型基态能量的对比图, 其中铁磁态能量设为零; 图 (c)—(f) 中, 只显示了 Ti 和 V 原子, 其中蓝色小球代表 Ti 原子, 紫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

Fig. 1. (a) Top view of the $(\text{SVO})_4/(\text{STO})_5(111)$ superlattice, which is one of the $(\text{SVO})_m/(\text{STO})_n(111)$ ($4 \leq m \leq 6$; $1 \leq n \leq 6$) superlattices; (b) side view of $(\text{SVO})_4/(\text{STO})_5(111)$ superlattice; (c) schematic diagram of A-AFM; (d) schematic diagram of C-AFM; (e) schematic diagram of G-AFM; (f) schematic diagram of FM; (g) energy differences between different magnetic orders of different superlattices. In the figure, the energy of FM states are set to zero. In figures (c)–(f), only the Ti and V atoms are shown, the blue balls represent the Ti atoms, the purple balls represent the spin-up V atoms, and the green balls represent the spin-down V atoms.

构成, 而 SVO 是由 V 和 SrO_3 交替叠加构成, 因此沿 $[111]$ 方向的计算模型是 $\cdots\text{SrO}_3\text{-Ti-SrO}_3\text{-V-SrO}_3\cdots\text{V-SrO}_3\text{-Ti-SrO}_3\text{-Ti}\cdots$ 的结构. 计算时选取的 z 轴方向为 $[111]$ 方向. 对 $(\text{SVO})_m/(\text{STO})_n(111)$ 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. 当超晶格的 SVO 或 STO 亚层数目变化时, 系统的磁基态可能会发生变化. 为此构建了 2×2 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. 鉴于本文有 6 个相似结构的计算模型, 这里以 $(\text{SVO})_4/(\text{STO})_5(111)$ 超晶格为例给出 AFM 和 FM 结构的示意图, 如图 1(c)—(f) 所示. 在计算电子结构时, 对基态为铁磁态的理想界面模型采用 1×1 的超晶胞结构, k 点网格的选取为 $5 \times 5 \times 1$; 对界面 Ti-V 混合掺杂模型采用 2×1 的超晶胞结构, k 点网格的选取为 $3 \times 6 \times 1$.

3 结果与讨论

3.1 $(\text{SVO})_m/(\text{STO})_n(111)$ 超晶格的磁基态与结构

块体 STO 和 SVO 都是立方结构, 分别采用 GGA 和 GGA+ U 计算 STO 和 SVO 的晶格常数, 计算结果为 $a_{\text{STO}}^{\text{GGA}} = 3.944 \text{ \AA}$ ($a_{\text{STO}}^{\text{GGA}+U} = 3.977 \text{ \AA}$), $a_{\text{SVO}}^{\text{GGA}} = 3.869 \text{ \AA}$ ($a_{\text{SVO}}^{\text{GGA}+U} = 3.897 \text{ \AA}$), 与文献报道的 $a_{\text{STO}}^{\text{GGA}} = 3.931 \text{ \AA}$ ($a_{\text{STO}}^{\text{GGA}+U} = 3.982 \text{ \AA}$)^[28] 和 $a_{\text{SVO}}^{\text{GGA}} = 3.868 \text{ \AA}$ ($a_{\text{SVO}}^{\text{GGA}+U} = 3.895 \text{ \AA}$)^[29] 的计算结果非常接近. 鉴于使用 GGA+ U 方法计算获得的带隙比使用 GGA 更准确^[28], 本文采用 GGA + U 计算块体 STO 和 SVO 的电子结构. 结果显示, 块体 STO 是非磁绝缘体, 块体 SVO 为铁磁半金属, 与 Pardo 和 Pickett^[6] 的计算结果一致. 当 SVO 和 STO 组成超晶格时, 本文考虑了 FM 和 AFM (包括 A 型、C 型和 G 型 AFM) 结构, 对 $(\text{SVO})_m/(\text{STO})_n(111)$ 超晶格磁基态进行能量对比计算, 如图 1(g) 所示.

结果表明各模型铁磁态的能量最低, 故本文构建的 $(\text{SVO})_m/(\text{STO})_n(111)$ ($4 \leq m \leq 6, 1 \leq n \leq 6$) 的磁基态都是 FM 态, 与 Pardo 和 Pickett [6] 计算的沿 [001] 方向堆叠的 $(\text{STO})_4/(\text{SVO})_4$ 和 $(\text{STO})_4/(\text{SVO})_5$ 超晶格 FM 基态的结论具有一致性. 另外, $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1(111)$ 和 $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_4(111)$ 的磁基态能量对比 (图 1(g)) 可以看出, 在 SVO 同为 5 层的情况下, 间隔层 STO 层数的增加使得铁磁与反铁磁间的能量差增大. 同样, 在 $(\text{SVO})_4/(\text{STO})_2(111)$ 和 $(\text{SVO})_4/(\text{STO})_5(111)$ 超晶格、 $(\text{SVO})_6/(\text{STO})_3(111)$ 和 $(\text{SVO})_6/(\text{STO})_6(111)$ 超晶格的对比中也可见此趋势. 可见间隔层 STO 层数的增加, 可以使体系的铁磁基态更稳定. 只是相比含有 5 层或 6 层 SVO 的超晶格, 含有 4 层 SVO 的超晶格随间隔层 STO 层数的增加, 铁磁与反铁磁之间的能量差增幅不大, 仅由 0.16 eV 增至 0.21 eV. 也说明含有 4 层 SVO 的超晶格基态磁性结构可能存在铁磁与反铁磁结构的相互竞争, 磁基态的稳定性不及含有 5 层或 6 层 SVO 的超晶格.

表 1 展示了不同模型在结构优化后的面内晶格常数. 从表 1 可以看出, 在 SVO 层数相同的情况下, 超晶格的面内晶格常数会随着 STO 层数的增加而增加. 图 2 给出了沿 c 轴方向各超晶格相邻原子层之间距离的对比图. 可以看出, 层间距具有明显的对称性, STO 亚层的原子层间距明显大于 SVO 亚层的原子层间距. 这是因为 STO 块体材料的晶格常数大于 SVO 块体材料的晶格常数, STO 和 SVO 形成超晶格, 面内晶格常数保持一致, SVO 将受到面内拉伸应变, 而 STO 则受到面内压缩应变, 导致 STO 亚层的原子层间距变大, 而 SVO 亚层的原子层间距变小, 因此 STO 亚层的原子层间

距明显大于 SVO 亚层的原子层间距. 另外, 各模型中 STO 亚层的层间距相似, 但 SVO 亚层的层间距有着不同的表现: 在 $(\text{SVO})_4/(\text{STO})_5$, $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_4$, $(\text{SVO})_6/(\text{STO})_3$ 和 $(\text{SVO})_6/(\text{STO})_6$ 超晶格中, SVO 亚层层间距相似; 但在 $(\text{SVO})_4/(\text{STO})_2$ 和 $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1$ 超晶格中, SVO 亚层层间距变化明显.

表 1 不同 $(\text{SVO})_m/(\text{STO})_n(111)$ 超晶格模型的面内晶格常数

Table 1. In-plane lattice constants of the different $(\text{SVO})_m/(\text{STO})_n(111)$ superlattices.

m/n	4/2	4/5	5/1	5/4	6/3	6/6
面内晶格常数/Å	5.50	5.57	5.48	5.57	5.56	5.57

3.2 间隔层 STO 的原子层数对电子结构的影响

图 3 是各超晶格在费米能级附近的能带结构和总态密度 (TDOS) 的对比图. 从图 3(a), (b) 可知, $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1(111)$, $(\text{SVO})_4/(\text{STO})_2(111)$ 超晶格自旋向上和自旋向下的能带不相互重叠, 体系呈现铁磁态; 另外, 自旋向上的能带穿过费米能级, 具有金属性; 而自旋向下的能带存在带隙, 表现出绝缘性, 因而 $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1(111)$ 和 $(\text{SVO})_4/(\text{STO})_2(111)$ 超晶格是铁磁半金属. 对比图 3(a), (b) 能带图还可看出, $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1(111)$ 超晶格导带底的曲率大于 $(\text{SVO})_4/(\text{STO})_2(111)$ 超晶格导带底的曲率, 说明 $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1(111)$ 超晶格载流子的有效质量较小, 因而 $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1(111)$ 超晶格导电能力强于 $(\text{SVO})_4/(\text{STO})_2(111)$ 超晶格. 另外图 3(a), (b) 的能带图中沿 G - Z 方向的能带也有一定的带宽, 这意味着载流子能穿越间隔

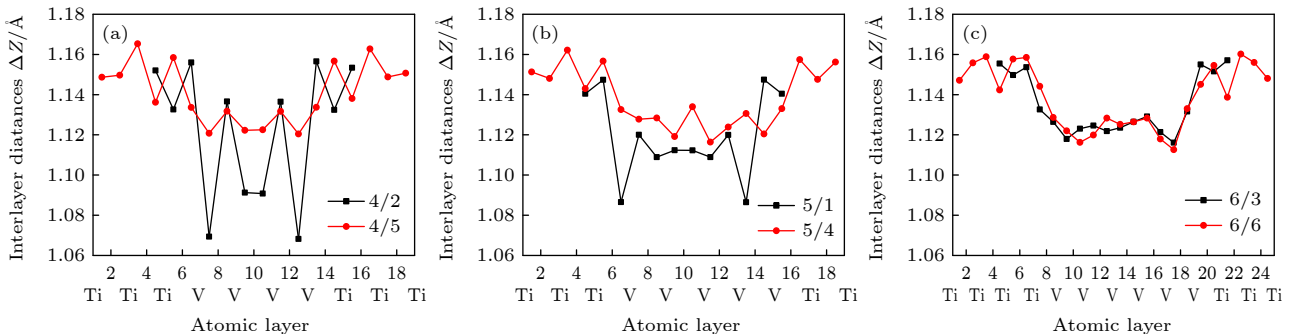


图 2 沿 c 轴方向, 各超晶格相邻原子层间距离对比图 (a) $(\text{SVO})_4/(\text{STO})_2$ 和 $(\text{SVO})_4/(\text{STO})_5$; (b) $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1$ 和 $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_4$; (c) $(\text{SVO})_6/(\text{STO})_3$ 和 $(\text{SVO})_6/(\text{STO})_6$

Fig. 2. The interplanar distance between consecutive planes of different superlattices along the c axis: (a) $(\text{SVO})_4/(\text{STO})_2$ and $(\text{SVO})_4/(\text{STO})_5$; (b) $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1$ and $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_4$; (c) $(\text{SVO})_6/(\text{STO})_3$ and $(\text{SVO})_6/(\text{STO})_6$.

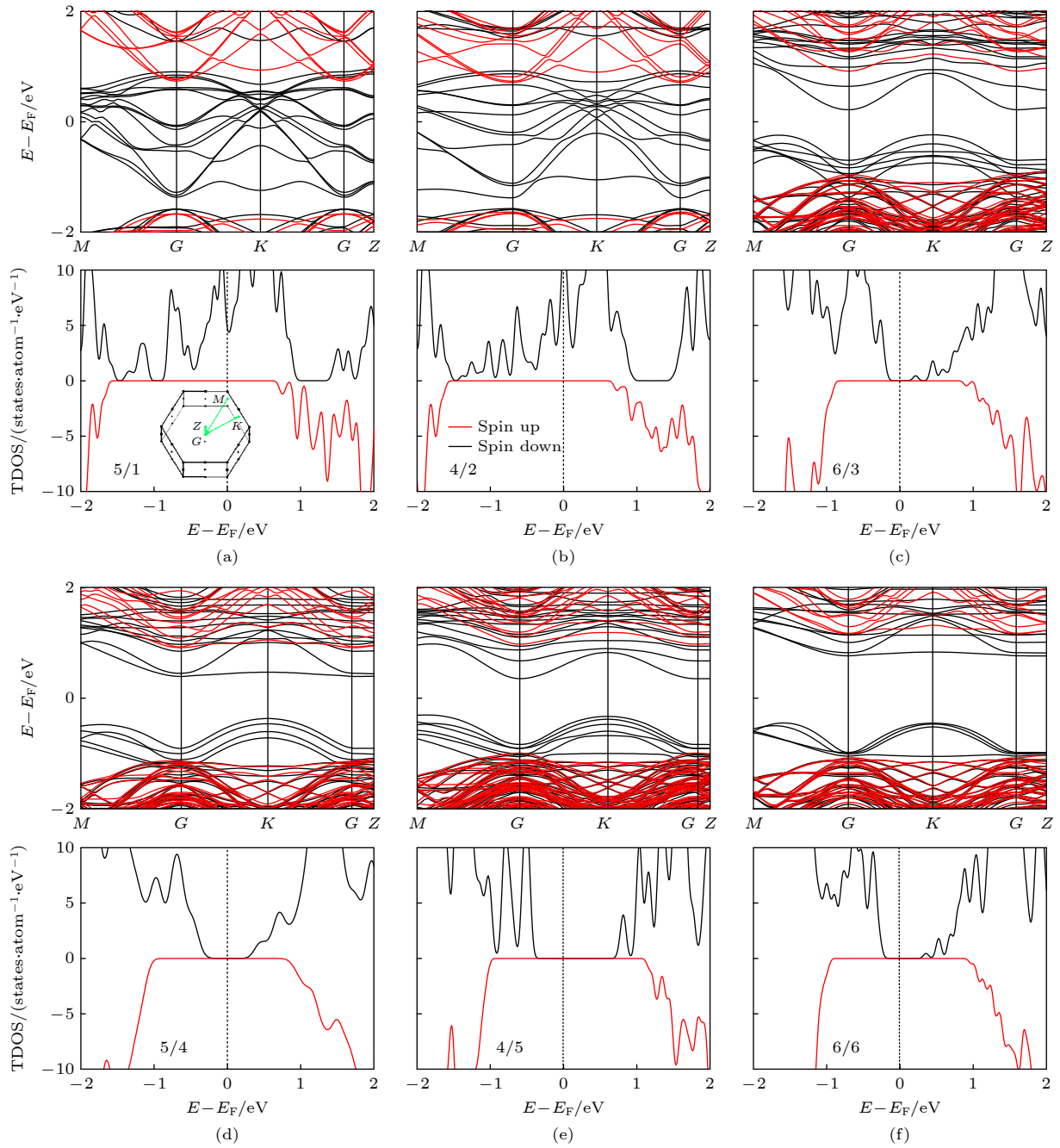


图3 超晶格在费米能级附近的能带结构和总态密度的对比图 (a) $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1$ (111); (b) $(\text{SVO})_4/(\text{STO})_2$ (111); (c) $(\text{SVO})_6/(\text{STO})_3$ (111); (d) $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_4$ (111); (e) $(\text{SVO})_4/(\text{STO})_5$ (111); (f) $(\text{SVO})_6/(\text{STO})_6$ (111). 高对称点如图中第一布里渊区所示; 对应的总态密度图显示在能带图下侧, 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. 3. Comparison of band structures and total state densities near the Fermi level of different superlattices: (a) $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1$ (111); (b) $(\text{SVO})_4/(\text{STO})_2$ (111); (c) $(\text{SVO})_6/(\text{STO})_3$ (111); (d) $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_4$ (111); (e) $(\text{SVO})_4/(\text{STO})_5$ (111); (f) $(\text{SVO})_6/(\text{STO})_6$ (111). The inset shows the Brillouin zone and the special points. Black and red lines are spin-up and spin-down states, respectively; the Fermi level is located at 0 eV (dotted black line).

层 STO, 形成跨平面间的传输, SVO 亚层之间通过 STO 间隔层实现层间耦合, 是超晶格材料呈现金属性的重要原因. 图 3(c) 给出了 $(\text{SVO})_6/(\text{STO})_3$ (111) 超晶格的能带图和总态密度 (TDOS) 图, 当间隔层 STO 的原子层数增加到 3 层时, 即便 SVO

亚层的原子层数 (6 层) 多于 $(\text{SVO})_4/(\text{STO})_2$ 和 $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1$ (111) 铁磁半金属材料的 4 层和 5 层, 自旋向上的能带也出现了小的带隙 (约 0.28 eV), G - Z 方向能带的带宽也明显变窄, 材料开始表现出绝缘特征. 可见, 超晶格中间隔层 STO 的厚度可

以有效抑制层间耦合效应, 而是否发生层间耦合在超晶格导电性方面似乎发挥了最重要的作用. 另外, $(\text{SVO})_6/(\text{STO})_3$ (111) 超晶格自旋向上和自旋向下的能带并不相互重叠, 因而体系呈现铁磁绝缘态. 图 3(d) 是 $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_4$ (111) 超晶格的能带图和总态密度图, 当间隔层 STO 的原子层数增加到 4 层时, 自旋向上的能带出现了约 0.51 eV 的带隙, 材料呈现绝缘态. G - Z 方向的能带也变成平带, 沿 [111] 方向的载流子有效质量变为无限大, 说明当间隔层 STO 原子层数增大到 4 层时, 层间耦合现象消失. 相较于 $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1$ (111) 超晶格载流子可以跨平面间传输的半金属铁磁态, 间隔层 STO 层数的增加导致超晶格成为铁磁绝缘体. 图 3(e) 是 $(\text{SVO})_4/(\text{STO})_5$ (111) 超晶格的能带图和总态密度图, 当间隔层 STO 的原子层数增加到 5 层时, 自旋向上的能带出现了更大的带隙 (约 1.00 eV), 材料呈现绝缘态. 对比图 3(b) 可知, 在 SVO 亚层相同时, 间隔层 STO 的层数能有效调控超晶格材料的导电性, 并随着 STO 层数的增加, 超晶格呈现铁磁半金属-铁磁绝缘体的转变. Wang 等 [4] 曾对 SVO/STO (001) 超晶格导电性进行实验研究, 发现在 STO 层数一定 ($n = 2$) 时, 电阻随 SVO 层数的增多而下降; SVO 层数一定 ($m = 4$) 时, 电阻随 STO 层数的减少而下降. Kim 等 [3] 实验研究也发现当间隔层 STO 增厚时, 尽管 SVO 亚层的厚度不变, 但超晶格的电阻率仍然增加. 本文的研究

为以上两个实验研究提供了理论支持. 图 3(f) 是 $(\text{SVO})_6/(\text{STO})_6$ (111) 超晶格的能带图和总态密度图. 与图 3(c) 对比可以看出, 在 SVO 亚层相同且超晶格都是绝缘态的情况下, $(\text{SVO})_6/(\text{STO})_6$ (111) 超晶格的带隙明显大于 $(\text{SVO})_6/(\text{STO})_3$ (111) 超晶格的带隙. 可见间隔层 STO 的原子层数对 $(\text{SVO})_m/(\text{STO})_n$ (111) 超晶格的带隙也有非常显著的调控作用.

所建模型中, $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1$ (111), $(\text{SVO})_4/(\text{STO})_2$ (111) 超晶格为铁磁半金属材料, 半金属能隙分别为 0.43, 0.51 eV, 远大于 LAO/STO (111) 超晶格的半金属能隙 (0.20 eV) [30], 也大于超晶格 CrSe/ZnSe (001) 超晶格的半金属能隙 (0.41 eV) [31] 和 V 掺杂的 LiZnP 新型稀磁半导体的半金属能隙 (0.44 eV) [32]. 为进一步分析体系半金属性的来源, 图 4(a), (b) 给出了两个超晶格各原子层在费米面附近的态密度图. 可以看出: 费米能级附近的自旋极化载流子几乎完全来自 SVO 层, 但与常见的 (001) 方向钙钛矿异质结 [33–35] 在界面形成二维电子气不同, 载流子几乎均匀地分布在 SVO 亚层的各个原子层, 与 $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ (111) 超晶格载流子分布具有相似性 [10]; STO 亚层有少量的贡献, 说明 SVO 亚层之间通过较薄的 STO 亚层发生层间耦合 [3]. 这与前面对超晶格 $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1$ (111), $(\text{SVO})_4/(\text{STO})_2$ (111) 能带分析的结果一致. 图 5(a) 和图 5(b) 给出了超晶格 $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1$ (111) 和

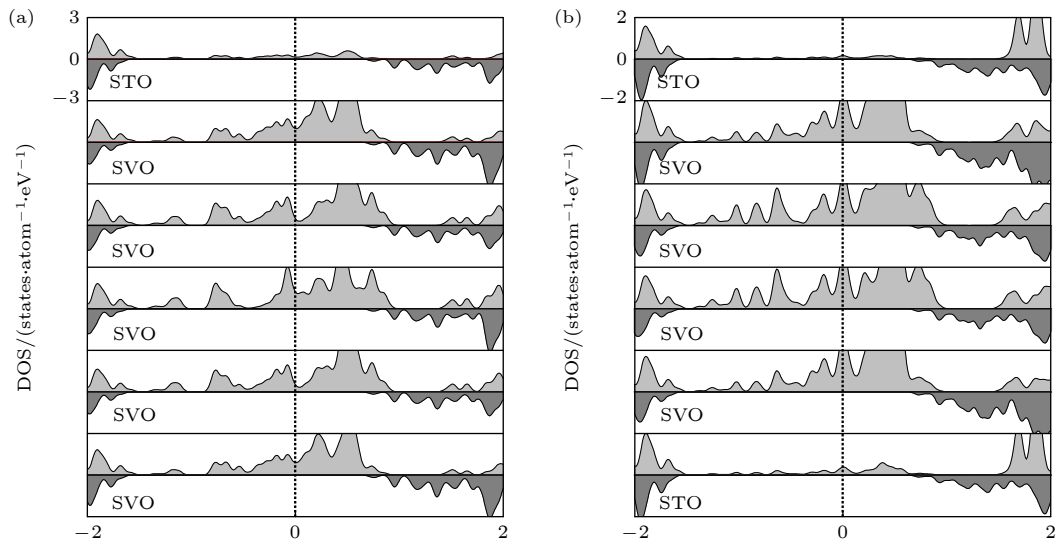


图 4 (a), (b) $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1$ (111) 和 $(\text{SVO})_4/(\text{STO})_2$ (111) 超晶格各原子层在费米能级附近的态密度图. 图中自旋向上的电子态密度由浅灰色区域表示, 自旋向下的电子态密度由深灰色区域表示; 黑色虚线表示费米能级

Fig. 4. (a), (b) Layer-resolved partial DOS of $(\text{SVO})_5/(\text{STO})_1$ (111) and $(\text{SVO})_4/(\text{STO})_2$ (111) superlattices. Light gray and dark gray areas are spin-up and spin-down states, respectively. The Fermi level is located at 0 eV (dotted black line).

(SVO)₄/(STO)₂ (111) 超晶格中 Ti, Sr, O 原子的态密度图. 对比图 5(c) 和图 5(d), V 原子 3d 轨道的分波态密度图, 可以看出, 两个超晶格在费米能级附近的自旋极化载流子主要是由 V 和 O 原子贡献的, 且 V 3d 的 t_{2g} 和 e_g 轨道都越过费米能级, 是体系中自旋极化载流子的最主要来源. 因此, (SVO)₅/(STO)₁ (111) 以及 (SVO)₄/(STO)₂ (111) 超晶格的半金属性主要来自 V 原子, 其次是来自 O 原子.

图 6 给出了各超晶格 V 3d 轨道的分波态密度图. 费米能级以下的线表示占据态, 费米能级以上的线表示未占据态. 从图 6 可以看出, 所有超晶格中的 V 3d 轨道 (t_{2g} 和 e_g) 都被占据, 且占据态都是自旋向上态, 因此这里的 V 是高自旋状态 [36]. 表 2 列出了各超晶格 V 和 O 原子的磁矩及体系的总磁矩. 从表 2 可以看出, 各超晶格的磁矩主要来自 V 原子, 且各 V 原子都贡献了约 $1\mu_B$ 的磁矩. 所建超晶格模型的总磁矩都是整数磁矩, 总磁矩为玻尔磁子的整数倍也是材料作为铁磁半金属的一个重要特征. 从各模型磁矩的对比可看出: 超晶格 (SVO)₅/(STO)₁ (111) 和 (SVO)₅/(STO)₄ (111) 的总磁矩均为 $5.0\mu_B$; 超晶格 (SVO)₄/(STO)₂ (111) 和 (SVO)₄/(STO)₅ (111) 的总磁矩均为 $4.0\mu_B$; 超晶

格 (SVO)₆/(STO)₃ (111) 和 (SVO)₆/(STO)₆ (111) 的总磁矩均为 $6.0\mu_B$. 可见, 间隔层 STO 层数虽能调控体系金属-绝缘体的转变和带隙的大小, 却并未影响体系磁性.

3.3 界面附近 Ti-V 的混合缺陷对电子结构的影响

实验研究发现, 在 SVO/STO 界面附近容易形成 Ti-V 的混合缺陷导致的界面粗糙与无序 [18,19], 而这些缺陷可能会对超晶格电子结构产生显著影响, 需要进一步研究. 为了研究界面附近 Ti-V 的混合缺陷对 SVO/STO(111) 超晶格电子结构的影响, 我们在前面研究的 6 个 SVO/STO(111) 超晶格界面处设计了 Ti-V 的混合形成的缺陷界面. 图 7(a) 是 2×1 的超晶格模型之一: 含有 Ti-V 混合缺陷界面的 (SVO)₅/(ST_{0.5}V_{0.5}O)₁/(STO)₃(111) 超晶格的顶视图, 图 7(b) 是 (SVO)₅/(ST_{0.5}V_{0.5}O)₁/(STO)₃ (111) 超晶格的侧视图. 所有模型只在 STO 亚层的一侧设计了一层 Ti-V 混合形成的缺陷界面, 总间隔层的层数和 SVO 亚层的层数与之前研究的 6 个理想界面超晶格模型相比没有变化, 以此对比研究间隔层的界面 Ti-V 混合缺陷对 SVO/STO(111) 超晶格磁性和导电性的影响.

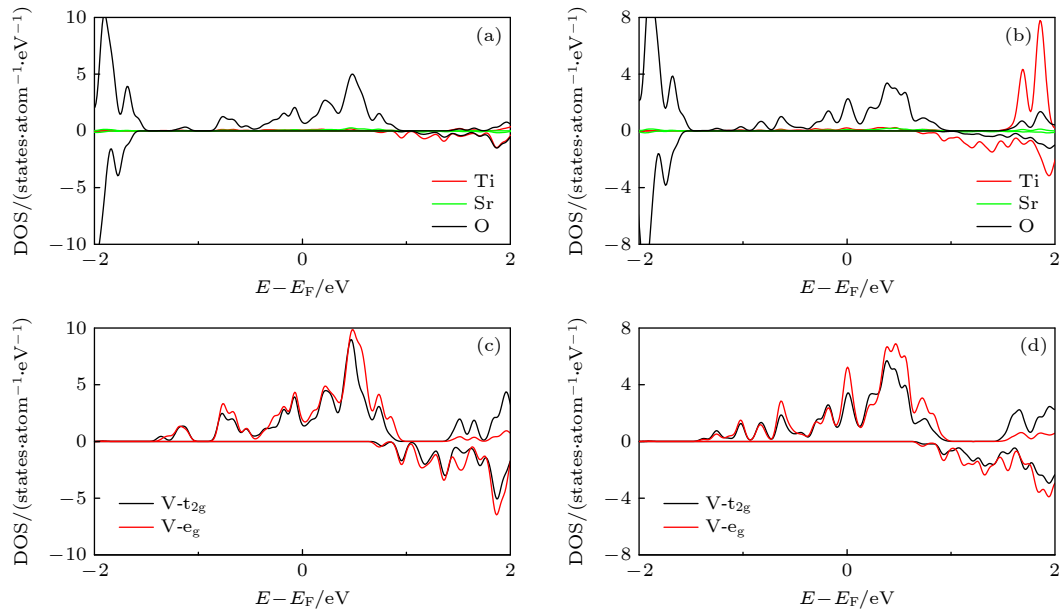


图 5 (SVO)₅/(STO)₁ (111) (a) 和 (SVO)₄/(STO)₂ (111) (b) 超晶格中 Ti, Sr, O 原子的态密度图; (SVO)₅/(STO)₁ (111) (c) 和 (SVO)₄/(STO)₂ (111) (d) 超晶格中 V 原子 3d 轨道的分波态密度图, 黑色虚线表示费米能级

Fig. 5. Densities of states near the Fermi level of Ti, Sr and O in (SVO)₅/(STO)₁ (111) (a) and (SVO)₄/(STO)₂ (111) (b) superlattices; the partial density of states of V 3d orbitals of (SVO)₅/(STO)₁ (111) (c) and (SVO)₄/(STO)₂ (111) (d) superlattices. The Fermi level is located at 0 eV (dotted black line).

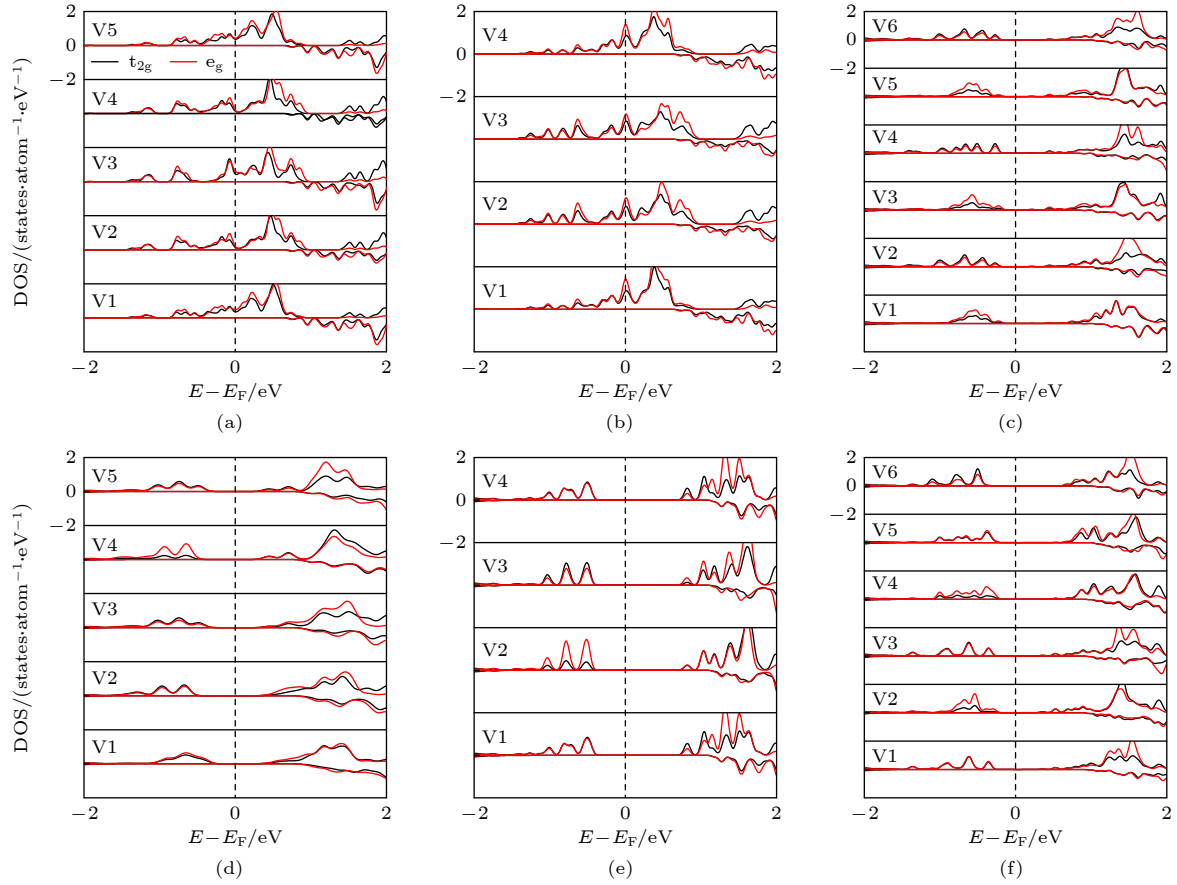


图 6 各超晶格 V 原子 3d 轨道的分波态密度图 (a) (SVO)₅/(STO)₁ (111); (b) (SVO)₄/(STO)₂ (111); (c) (SVO)₆/(STO)₃ (111); (d) (SVO)₅/(STO)₄ (111); (e) (SVO)₄/(STO)₅ (111); (f) (SVO)₆/(STO)₆ (111). 其中, 图 (b) 中 V 原子的位置与图 1(b) 中 V 原子位置一致, 其余模型中 V 原子的排列与图 1(b) 中 V 原子排列相似, 从下往上 V 原子序号递增. 图中黑色虚线表示费米能级

Fig. 6. The partial density of states of V 3d orbitals of different superlattices: (a) (SVO)₅/(STO)₁ (111); (b) (SVO)₄/(STO)₂ (111); (c) (SVO)₆/(STO)₃ (111); (d) (SVO)₅/(STO)₄ (111); (e) (SVO)₄/(STO)₅ (111); (f) (SVO)₆/(STO)₆ (111). Among them, the position of the V atoms in figure (b) are consistent with the position of the V atoms in Fig. 1(b). The arrangement of V atoms in the rest of the models is similar to the arrangement of V atoms in Fig. 1(b). The atomic numbers get bigger and bigger from the bottom up. The Fermi level is located at 0 eV (dotted black line).

表 2 (SVO)_m/(STO)_n (111) 各超晶格 V 和 O 的磁矩及体系总磁矩, 各模型中 V 原子的排列与图 1(b) 中 V 原子排列相似, 从下往上 V 原子的序号递增

Table 2. Magnetic moments of V and O atoms and the total magnetic moments of (SVO)_m/(STO)_n (111) superlattices. The arrangement of V atoms in the models is similar to the arrangement of V atoms in Fig. 1(b). The atomic numbers get bigger and bigger from the bottom up.

m/n	5/1	4/2	6/3	5/4	4/5	6/6
M_{-v_1}/μ_B	1.13	1.01	1.00	1.00	1.00	1.01
M_{-v_2}/μ_B	1.18	1.20	1.02	1.02	1.01	1.00
M_{-v_3}/μ_B	1.04	1.20	1.00	1.02	1.01	1.02
M_{-v_4}/μ_B	1.04	1.01	1.02	1.00	1.00	1.01
M_{-v_5}/μ_B	1.18		1.00	1.00		1.01
M_{-v_6}/μ_B			1.00			1.01
$M_{-Vtotal}/\mu_B$	5.57	4.42	6.04	5.04	4.02	6.06
M_{-O}/μ_B	-0.93	-0.74	-0.32	-0.28	-0.23	-0.34
M_{-Total}/μ_B	5.0	4.0	6.0	5.0	4.0	6.0

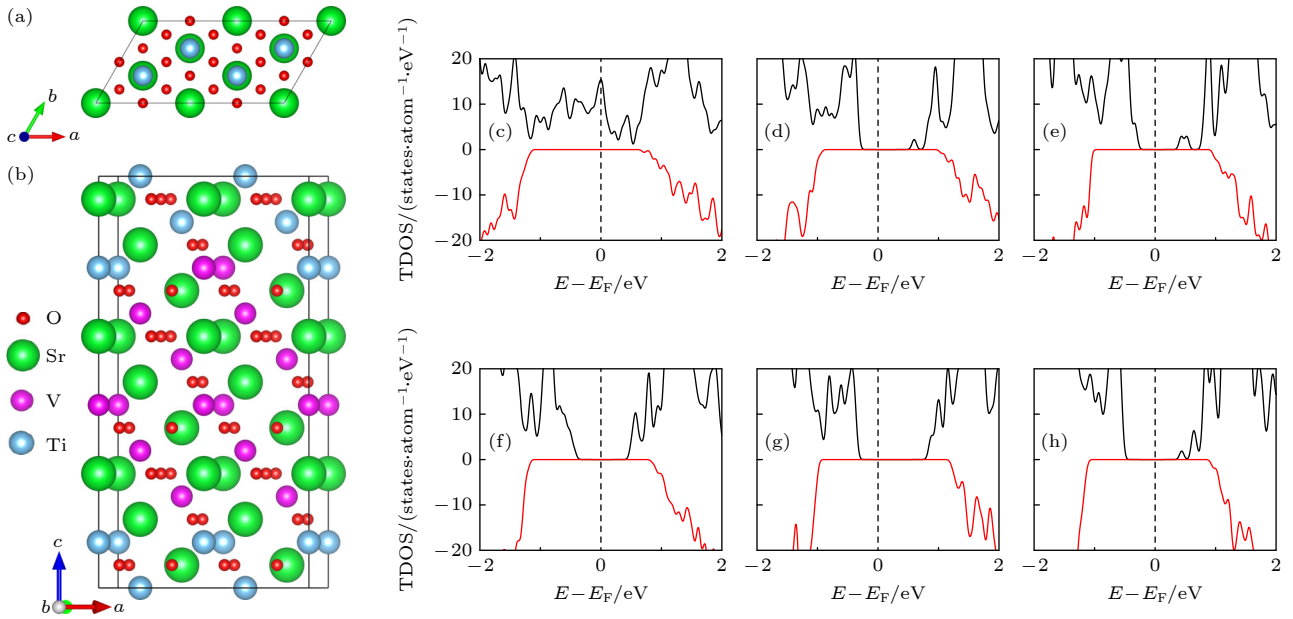


图 7 (a) 含有 Ti-V 混合缺陷界面的 $(\text{SVO})_m/(\text{ST}_{0.5}\text{V}_{0.5}\text{O})_1/(\text{STO})_{n-1}(111)$ ($4 \leq m \leq 6$; $1 \leq n \leq 6$) 超晶格之一 $(\text{SVO})_5/(\text{ST}_{0.5}\text{V}_{0.5}\text{O})_1/(\text{STO})_3(111)$ 的俯视图; (b) $(\text{SVO})_5/(\text{ST}_{0.5}\text{V}_{0.5}\text{O})_1/(\text{STO})_3(111)$ 超晶格的侧视图; (c)–(h) 各含有 Ti-V 混合缺陷界面的超晶格在费米能级附近的总态密度的对比图, 其中, (c) $(\text{SVO})_5/(\text{ST}_{0.5}\text{V}_{0.5}\text{O})_1/(\text{STO})_3(111)$; (d) $(\text{SVO})_4/(\text{ST}_{0.5}\text{V}_{0.5}\text{O})_1/(\text{STO})_1(111)$; (e) $(\text{SVO})_6/(\text{ST}_{0.5}\text{V}_{0.5}\text{O})_1/(\text{STO})_2(111)$; (f) $(\text{SVO})_5/(\text{ST}_{0.5}\text{V}_{0.5}\text{O})_1/(\text{STO})_3(111)$; (g) $(\text{SVO})_4/(\text{ST}_{0.5}\text{V}_{0.5}\text{O})_1/(\text{STO})_4(111)$; (h) $(\text{SVO})_6/(\text{ST}_{0.5}\text{V}_{0.5}\text{O})_1/(\text{STO})_5(111)$. 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. 7. (a) Top view of $(\text{SVO})_5/(\text{ST}_{0.5}\text{V}_{0.5}\text{O})_1/(\text{STO})_3(111)$ superlattice containing the defect interface; (b) side view of $(\text{SVO})_5/(\text{ST}_{0.5}\text{V}_{0.5}\text{O})_1/(\text{STO})_3(111)$ superlattice; (c)–(h) comparison of total state densities near the Fermi level for the different superlattices, (c) $(\text{SVO})_5/(\text{ST}_{0.5}\text{V}_{0.5}\text{O})_1/(\text{STO})_3(111)$; (d) $(\text{SVO})_4/(\text{ST}_{0.5}\text{V}_{0.5}\text{O})_1/(\text{STO})_1(111)$; (e) $(\text{SVO})_6/(\text{ST}_{0.5}\text{V}_{0.5}\text{O})_1/(\text{STO})_2(111)$; (f) $(\text{SVO})_5/(\text{ST}_{0.5}\text{V}_{0.5}\text{O})_1/(\text{STO})_3(111)$; (g) $(\text{SVO})_4/(\text{ST}_{0.5}\text{V}_{0.5}\text{O})_1/(\text{STO})_4(111)$; (h) $(\text{SVO})_6/(\text{ST}_{0.5}\text{V}_{0.5}\text{O})_1/(\text{STO})_5(111)$. Black and red lines are spin-up and spin-down states, respectively. The Fermi level is located at 0 eV (dotted black line).

图 7(c)–(h) 是各含有 Ti-V 混合缺陷界面的 SVO/STO(111) 超晶格在费米能级附近的总态密度对比图. 从图 7(c) 可以看出, $(\text{SVO})_5/(\text{ST}_{0.5}\text{V}_{0.5}\text{O})_1(111)$ 超晶格仍然呈现铁磁半金属态, 说明界面处的 Ti-V 混合缺陷没有影响其铁磁性, 且该界面的缺陷程度也并不足以抑制超晶格亚层间的层间耦合, 因此 $(\text{SVO})_5/(\text{ST}_{0.5}\text{V}_{0.5}\text{O})_1(111)$ 超晶格仍具有金属导电性. 这与 Liu 等^[37] 用 Ti 取代 SVO 中的 V, 虽会导致 $\text{SrTi}_{1-x}\text{V}_x\text{O}_3$ 的电导率降低, 但在取代量很小时, 体系仍然保持金属性的研究结果, 具有一致性. 图 7(d) 中 $(\text{SVO})_4/(\text{ST}_{0.5}\text{V}_{0.5}\text{O})_1/(\text{STO})_1(111)$ 超晶格呈现铁磁绝缘态, 说明界面缺陷没有影响其铁磁性, 但该缺陷界面抑制了超晶格亚层间的层间耦合, 因此, $(\text{SVO})_4/(\text{ST}_{0.5}\text{V}_{0.5}\text{O})_1/(\text{STO})_1(111)$ 超晶格变成绝缘体. 相较呈现铁磁半金属态的理想界面 $(\text{SVO})_4/(\text{STO})_2(111)$ 超晶格, 发现当间隔层相同时, Ti-V 混合缺陷降低了 SVO/STO(111) 超晶格金属-绝缘体转变所需间隔层的层数. 这为 Kim 等^[3] 从实验角度提出的关于界面粗糙度和导电性关系

的预测提供了理论支持. 结合表 3 中各理想界面与缺陷界面超晶格自旋向上态密度带隙值的对比, 可以看出, 在间隔层 $3 \leq n \leq 6$ 的范围内, 除了 $n = 5$ 时的理想界面与缺陷界面超晶格带隙变化不明显外, 其余都显示缺陷界面超晶格的带隙大于理想界面超晶格的带隙. 可见间隔层的 Ti-V 混合缺陷可以使超晶格呈现更大的带隙, 也更利于形成稳定的铁磁绝缘体.

表 3 $(\text{SVO})_m/(\text{STO})_n(111)$ 各理想界面与 Ti-V 混合缺陷界面超晶格自旋向上态密度带隙值

Table 3. Band gaps of spin-up states of $(\text{SVO})_m/(\text{STO})_n(111)$ superlattices with ideal or defect interfaces.

	Band gap of spin-up states/eV					
m/n	5/1	4/2	6/3	5/4	4/5	6/6
Ideal interfaces	0	0	0.28	0.51	1.00	0.48
Defect interfaces	0	0.69	0.56	0.74	1.03	0.77

4 结 论

本文利用基于密度泛函理论的第一性原理, 系

统研究了不同间隔层厚度和界面 Ti-V 混合缺陷对 $(\text{SVO})_m/(\text{STO})_n(111)$ 超晶格电、磁性能的影响. 通过对不同厚度间隔层的超晶格进行电子结构的计算分析, 证明了间隔层 STO 的厚度可以有效地调控 $(\text{SVO})_m/(\text{STO})_n(111)$ 超晶格的导电性, 并可实现铁磁半金属-铁磁绝缘体的转变. 进一步通过对比界面处 Ti-V 混合掺杂前后的电子结构, 发现 Ti-V 混合缺陷确实在超晶格的金属-绝缘体转变中发挥了重要的作用. 相比理想界面, Ti-V 混合缺陷界面更能抑制超晶格的层间耦合效应, 诱导超晶格从铁磁半金属-铁磁绝缘体的转变. 目前, 不论是铁磁半金属还是铁磁绝缘体, 都被视为构建自旋电子器件的理想材料, 但这两种材料在钙钛矿超晶格中都很罕见. 本研究不但在 SVO/STO(111) 超晶格中发现铁磁半金属和铁磁绝缘体, 而且在超晶格 SVO/STO(111) 中实现了铁磁半金属-铁磁绝缘体转变的有效调控, 这将使该材料有可能在新一代自旋电子设备中发挥重要作用, 也将进一步拓展钙钛矿超晶格在自旋电子学领域的应用.

参考文献

- [1] Moyer J A, Eaton C, Engel-Herbert R 2013 *Adv. Mater.* **25** 3578
- [2] Zhang L, Zhou Y, Guo L, Zhao W, Barnes A, Zhang H-T, Eaton C, Zheng Y, Brahlek M, Haneef H F, Podraza N J, Chan M H W, Gopalan V, Rabe K M, Engel-Herbert R 2016 *Nat. Mater.* **15** 204
- [3] 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
- [4] Wang J, Gauquelin N, Huijben M, Verbeeck J, Rijnders G, Koster G 2020 *Appl. Phys. Lett.* **117** 133105
- [5] Wang G, Wang Z, Meng M, Saghaezhian M, Chen L, Chen C, Guo H, Zhu Y, Plummer W, Zhang J 2019 *Phys. Rev. B* **100** 155114
- [6] Pardo V, Pickett W E 2010 *Phys. Rev. B* **81** 245117
- [7] Sohn C, Skoropata E, Choi Y, Gao X, Rastogi A, Huon A, McGuire M A, Nuckols L, Zhang Y, Freeland J W, Haskel D, Lee H N 2019 *Adv. Mater.* **31** 1805389
- [8] Meng D, Guo H, Cui Z, Ma C, Zhao J, Lu J, Xu H, Wang Z, Hu X, Fu Z, Peng R, Guo J, Zhai X, Brown G J, Knize R, Lu Y 2018 *PNAS* **115** 2873
- [9] Okamoto S, Zhu W, Nomura Y, Arita R, Xiao D, Nagaosa N 2014 *Phys. Rev. B* **89** 195121
- [10] Beltrán J I, Muñoz M C 2017 *Phys. Rev. B* **95** 245120
- [11] Verissimo-Alves M, Garcia-Fernandez P, Bilc D L, Ghosez P, Junquera J 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 107003
- [12] Cossu F, Jilili J, Schwingschlögl U 2014 *Adv. Mater. Interfaces* **1** 1400057
- [13] Song G, Zhang W 2014 *Sci. Rep. UK* **4** 4564
- [14] Cossu F, Kim H S, Sanyal B, Di Marco I 2022 *NPJ Comp. Mater.* **8** 1
- [15] Yao X, Yi H T, Jain D, Han M G, Oh S 2021 *Nano Lett.* **21** 5914
- [16] Cen C, Thiel S, Hammerl G, Schneider C W, Andersen K E, Hellberg C S, Mannhart J, Levy J 2008 *Nat. Mater.* **7** 298
- [17] Li Y, Lu W J 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 218503 (in Chinese) [李文建 2021 物理学报 **70** 218503]
- [18] Li J, Yin D, Li Q, Sun R, Huang S, Meng F 2017 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19** 6945
- [19] 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
- [20] Kramer B, MacKinnon A, 1993 *Rep. Prog. Phys.* **56** 1469
- [21] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11169
- [22] Blöchl P E 1994 *Phys. Rev. B* **50** 17953
- [23] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [24] Anisimov V I, Zaanen J, Andersen O K 1991 *Phys. Rev. B* **44** 943
- [25] 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
- [26] Park S Y, Kumar A, Rabe K M 2017 *Phys. Rev. Lett.* **118** 087602
- [27] Monkhorst H J, Pack J D 1976 *Phys. Rev. B* **13** 5188
- [28] Kuganathan N, Baiutti F, Morata A, Tarancon A, Choneos A 2021 *AIP Adv.* **11** 075029
- [29] Musa Saad HE M 2021 *B. Mater. Sci.* **44** 1
- [30] 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
- [31] Xiong L, Yi L, Gao G Y 2014 *J. Magn. Magn. Mater.* **349** 69
- [32] Jia Q, Du Y Y, Du C X, Chen T, Liu J, Yu Y, Zhang H Y, Liu M, Wu Z M 2019 *J. Funct. Mater.* **50** 12183 (in Chinese) [贾倩, 杜颖妍, 杜成旭, 陈婷, 刘焦, 于越, 张恒源, 刘明, 毋志民 2019 功能材料 **50** 12183]
- [33] Ohtomo A, Muller D A, Grazul J L, Hwang H Y 2002 *Nature* **419** 378
- [34] Biscaras J, Bergeal N, Kushwaha A, Wolf T, Rastogi A, Budhani R C, Lesueur J 2010 *Nat. Commun.* **1** 1
- [35] Xu Q F, Wu D, Li A D 2013 *Phys. Lett. A* **377** 577
- [36] Fan Y F 2019 *M. S. Thesis* (Nanjing: Nanjing University of Posts and Telecommunications) (in Chinese) [范漾方 2019 硕士学位论文 (南京: 南京邮电大学)]
- [37] Liu Z T Y, Podraza N J, Khare S V, Sarin P 2018 *Comput. Mater. Sci.* **144** 139

Spacer-layer-tunable ferromagnetic half-metal-ferromagnetic insulator transition in $\text{SrVO}_3/\text{SrTiO}_3$ superlattice^{*}

Fang Xiao-Nan¹⁾ Wei Qin²⁾ Sui Na-Na²⁾ Kong Zhi-Yong²⁾
Liu Jing²⁾ Du Yan-Ling^{2)†}

¹⁾ (*Information Engineering College, Shandong Management University, Jinan 250357, China*)

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

(Received 9 September 2022; revised manuscript received 8 October 2022)

Abstract

In this work, the first-principle calculations based on density functional theory (DFT) are employed to investigate the electronic and magnetic properties of $\text{SrVO}_3/\text{SrTiO}_3(111)$ superlattices. The studies show that the transition from ferromagnetic half-metal to ferromagnetic insulator can be achieved by adjusting the thickness of the spacer-layer SrTiO_3 . The interlayer coupling between the SrVO_3 sublayers can occur across two unit-cell (uc) distance of SrTiO_3 , and the superlattice is ferromagnetic half-metal. When the SrTiO_3 sublayers are 3uc, a small band gap (about 0.28 eV) appears in the superlattice. When the SrTiO_3 sublayers are more than 3uc, the superlattice has a large band gap and exhibits ferromagnetic insulating state. Further studies show that the Ti-V mixed defects play an important role in realizing the transition of metal-insulator. Compared with the ideal interface, the Ti-V mixed interface can inhibit the interlayer coupling and induce the transition of ferromagnetic half-metal to ferromagnetic insulator. These results provide a theoretical basis for the transition of ferromagnetic half-metal to ferromagnetic insulator by adjusting the number of SrTiO_3 layers in $\text{SrVO}_3/\text{SrTiO}_3(111)$ superlattices.

Keywords: superlattice, metal-insulator transition, ferromagnetic half-metal, ferromagnetic insulator

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

DOI: 10.7498/aps.71.20221765

^{*} 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).

[†] Corresponding author. E-mail: duyanling@sdutcm.edu.cn

间隔层调控 $\text{SrVO}_3/\text{SrTiO}_3$ 超晶格铁磁半金属-铁磁绝缘体转变

房晓南 危芹 隋娜娜 孔志勇 刘静 杜颜伶

Spacer-layer-tunable ferromagnetic half-metal-ferromagnetic insulator transition in $\text{SrVO}_3/\text{SrTiO}_3$ superlattice

Fang Xiao-Nan Wei Qin Sui Na-Na Kong Zhi-Yong Liu Jing Du Yan-Ling

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 237301 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20221765

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221765>

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

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

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

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

物理学报. 2022, 71(18): 187301 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220627>

掺杂维度和浓度调控的 δ 掺杂的 La:SrTiO_3 超晶格结构金属-绝缘体转变

Tuning metal-insulator transition in δ -doped 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>

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>

极性补偿对 $\text{LaMnO}_3/\text{LaNiO}_3$ 超晶格交换偏置场强度的影响

Influence of polarity compensation on exchange bias field in $\text{LaMnO}_3/\text{LaNiO}_3$ superlattices

物理学报. 2022, 71(15): 156801 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220365>

反铁磁轴子绝缘体候选材料 EuIn_2As_2 的表面原子排布和电子结构

Surface and electronic structure of antiferromagnetic axion insulator candidate EuIn_2As_2

物理学报. 2021, 70(18): 186801 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210783>