

## مدهای پلاسمونی در سطح مشترک $\text{SrTiO}_3/\text{LaAlO}_3$

فریدی، آزاده<sup>۱</sup>؛ عسگری، رضا<sup>۲</sup>

<sup>۱</sup> دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی شریف، تهران

<sup>۲</sup> پژوهشکده فیزیک، پژوهشگاه دانش‌های بنیادی، تهران

### چکیده

در این مقاله ما به ارائه نتایج عددی برای مدهای پلاسمونی اپتیکی و آکوستیکی گاز الکترونی دو بعدی موجود در سطح مشترک  $\text{SrTiO}_3$  و  $\text{LaAlO}_3$  می‌پردازیم. محاسبات ما نشان می‌دهد که بسته به مقدار ثابت دی الکتریک علاوه بر وجود یک مد اپتیکی قابل مشاهده، در حد طول موج های بزرگ یک مد آکوستیکی بالای ناحیه برانگیختگی های الکترون-حفره نیز می‌تواند وجود داشته باشد.

## Plasmons at the interface of $\text{SrTiO}_3/\text{LaAlO}_3$

Faridi, Azadeh<sup>1,2</sup>; Asgari, Reza<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, Sharif University of Technology, Tehran

<sup>2</sup> School of Physics, Institute for Research in Fundamental Sciences(IPM), Tehran

### Abstract

*In this article we present numerical results for the optical and acoustic collective modes of the 2DEG at the interface of  $\text{SrTiO}_3$  and  $\text{LaAlO}_3$ . Our calculations show that depending on the dielectric constant of the medium, in addition to the optical mode, an undamped acoustic mode can also exist above the electron-hole continuum at long wavelength limit.*

PACS No.

قرار داده است. در این مقاله ما به محاسبه و بررسی ویژگی های مدهای پلاسمونی که در سطح مشترک این دو ماده ایجاد می شوند، پرداخته ایم.

### تئوری

گاز الکترونی دو بعدی در سطح مشترک عمدتاً در اوربیتال های  $t_{2g}(d_{xy}, d_{yz}, d_{zx})$  مربوط به  $\text{SrTiO}_3$  قرار می‌گیرند. این اوربیتال‌ها دسته‌ای از اوربیتال‌های  $d$  هستند که به دلیل میدان کریستالی به اندازه حدود 2ev در  $\text{SrTiO}_3$  از اوربیتال‌های  $e_{2g}(d_{x^2-y^2}, d_{z^2})$  پایین‌تر قرار می‌گیرند. باندهای انرژی اوربیتال‌های  $t_{2g}$  در سطح مشترک  $\text{SrTiO}_3/\text{LaAlO}_3$  در راستای

### مقدمه

کشف گاز الکترونی دو بعدی در سطح مشترک نارسا ناهای  $\text{LaAlO}_3$  و  $\text{SrTiO}_3$  که در سال ۲۰۰۴ توسط گروه Ohtomo صورت گرفت<sup>۱</sup> پنجره جدیدی را به روی فیزیک سیستم های الکترونی دو بعدی باز کرد. ویژگی های جالبی نظیر تحرک پذیری بالا، ابررسانایی در دمای پایین<sup>۲</sup>، خواص مغناطیسی<sup>۳</sup> و حتی وجود هم زمان ابررسانایی و فرومغناطش در یک گستره دمایی خاص<sup>۴</sup>، قابلیت گذار فاز از نارسا ناهای رسانا<sup>۵</sup> با افزایش ضخامت لایه  $\text{LaAlO}_3$ ، قابل تنظیم بودن بسیاری از خواص گاز الکترونی با تغییر ولتاژ گیت و یا چگالی الکترونی در سطح مشترک<sup>۶</sup> و بسیاری خواص دیگر، این سیستم ها را مورد توجه بسیاری از گروه ها

در نهایت صفرهای تابع دی الکترونیک که از معکوس کردن رابطه ماتریس پاسخ چگالی به دست می آید، مدهای پلاسمونی سیستم را به ما می دهند:

$$\varepsilon(\mathbf{q}, \omega) = (1 + v(\mathbf{q})\chi_1^0(\mathbf{q}, \omega)) \left[ 1 + v(\mathbf{q})(\chi_2^0(\mathbf{q}, \omega) + \chi_3^0(\mathbf{q}, \omega)) \right] - v^2(\mathbf{q})e^{-2qa}\chi_1^0(\mathbf{q}, \omega) \left[ \chi_2^0(\mathbf{q}, \omega) + \chi_3^0(\mathbf{q}, \omega) \right] \quad (2)$$

در سیستمی با سه نوار انرژی، سه مد پلاسمونی وجود دارد: یک مد اپتیکی که در حد طول موج های بزرگ بصورت  $\omega_{op}(\mathbf{q} \rightarrow 0) \propto \sqrt{q}$  رفتار می کند. این مد پلاسمونی، مد مشترک بین تمام سیستم های چند نوری، تک نوری، چند لایه و تک لایه است و همواره بالای منطقه برانگیختگی های الکترون-حفره رخ می دهد و در نتیجه یک مد نامیرا است؛ اما همواره وجود حامل های بار متفاوت در سیستم (در نوارها و یا لایه های مختلف) باعث بوجود آمدن مدهای آکوستیکی در سیستم می شود. مدهای آکوستیکی در حد طول موج های بزرگ بصورت  $\omega_{ac}(\mathbf{q} \rightarrow 0) \propto q$  رفتار می کنند و بسته به ویژگی های سیستم می توانند در همین حد، بالا و یا زیر ناحیه برانگیختگی های الکترون-حفره قرار بگیرند. به عنوان مثال در سیستم های دو لایه، فاصله بین لایه ها، ثابت دی الکترونیک محیط اطراف و همچنین چگالی حامل های بار در هر لایه، عوامل موثر بر ایجاد پلاسمون های آکوستیکی میرا و یا نامیرا (در حد طول موج های بزرگ) هستند.

### محاسبات و نتیجه گیری

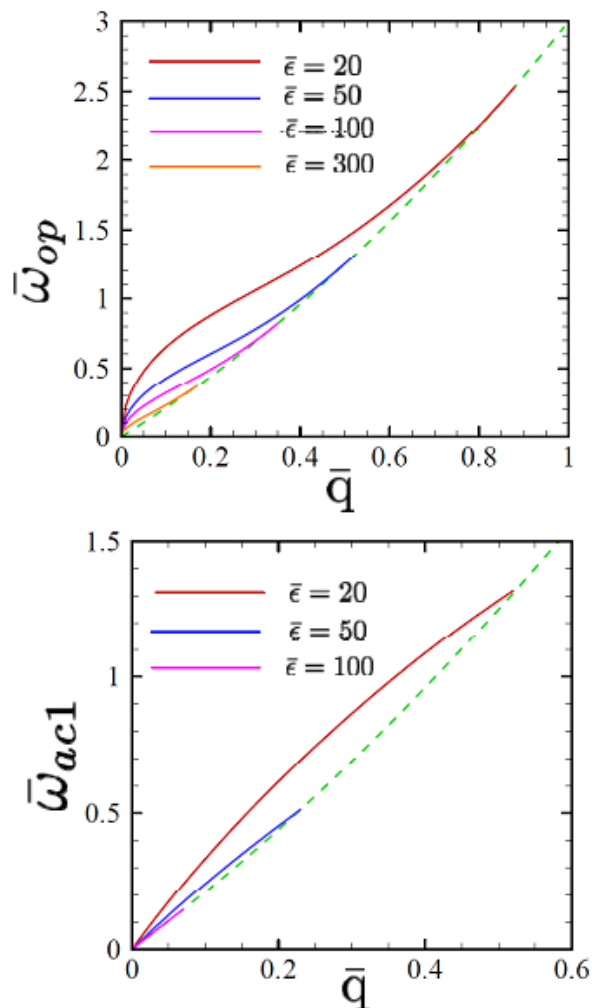
با صفر قرار دادن رابطه (۲)، مدهای پلاسمونی سیستم بدست می آیند که در شکل ۱ نشان داده شده اند. در سیستم مورد مطالعه ما وجود یک فاصله موثر بین اوربیتال های مختلف سیستم، می تواند باعث شود که یکی از مدهای آکوستیکی در حد طول موج های بزرگ بتواند بالای ناحیه برانگیختگی های الکترون-حفره بوجود بیاید. مقدار این فاصله موثر به چگالی الکترون ها در سطح مشترک وابسته است، به نحوی که برای چگالی های بالاتر این میزان

Z محدود هستند و در نتیجه یک گاز الکترونی دوبعدی تشکیل می دهند. همین محدود بودن در راستای Z باعث می شود که باند  $d_{xy}$  به اندازه  $\Delta$  از دو باند دیگر پایین تر قرار بگیرد. وجود برهمکنش اسپین-مدار راشبا در این سیستم باعث شکستن تبهگنی باندهای انرژی می شود. با انتخاب مناسب چگالی گاز الکترونی می توان از اثر این برهمکنش صرف نظر کرد. اگر تنها بالاترین لایه  $SrTiO_3$  و نوارهای انرژی مربوط به آن را در نظر بگیریم، در نهایت سیستم ما متشکل از یک نوار انرژی دایروی ( $d_{xy}$ ) با انرژی  $\varepsilon_1(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_L}$  و دونوار انرژی بیضوی  $d_{yz}$  و  $d_{xz}$  با انرژی های  $\varepsilon_2(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_L} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_H} + \Delta$  و  $\varepsilon_3(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_H} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_L} + \Delta$  خواهد بود. در این روابط  $m_L = 0.68m_e$  و  $m_H = 7.56m_e$  و  $\Delta = 80mev$  جرم الکترون است. برای محاسبه مدهای پلاسمونی سیستم به ماتریس پاسخ چگالی در تقریب فاز تصادفی که بصورت

$$\hat{\chi}(\mathbf{q}, \omega)^{-1} = \hat{\chi}^0(\mathbf{q}, \omega)^{-1} - \hat{V}(\mathbf{q}) \quad (1)$$

تعریف می شود، احتیاج داریم. در این رابطه  $\hat{\chi}^0(\mathbf{q}, \omega)$  ماتریس چگالی قطری غیر برهمکنشی این سیستم می باشد که رابطه آن را برای یک سیستم دایروی می دانیم<sup>۱</sup> و برای باندهای بیضوی نیز می توان آن را با استفاده از تبدیل Herring-Vogt<sup>۴</sup> از روی رابطه دایروی به دست آورد. همچنین  $\hat{V}(\mathbf{q})$  ماتریس برهمکنش کولنی بین الکترون ها است با عناصر  $\hat{V}_{ij}(\mathbf{q}) = v(\mathbf{q})e^{-qa_{ij}} = \frac{2\pi e^2}{\epsilon q} e^{-qa_{ij}}$  و  $\bar{\epsilon}$  متوسط ثابت دی الکترونیک محیط است. از آنجایی که در این سیستم اوربیتال  $d_{xy}$  تقید بیشتری به سطح دارد، برهمکنش بین الکترون های این اوربیتال با الکترون های دیگر متفاوت خواهد بود که این اثر با معرفی فاصله موثر  $a_{ij}$  اعمال شده است به نحوی که  $a_{12} = a_{21} = a_{13} = a_{31} = a$  و بقیه مقادیر صفر خواهد بود<sup>۱</sup>.

بزرگ تر اثرات پوشانندگی کاهش می یابد و در نتیجه برهمکنش کولنی بین الکترون های نوارهای مختلف افزایش می یابد و باعث میرایی سریع تر مدهای پلاسمونی می شود.



شکل ۱: مدهای پلاسمونی در سطح مشترک  $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$  برای مقادیر مختلف ثابت دی الکتریک محیط.

### مرجع ها

[1] A. Ohtomo and H. Hwang; "A high-mobility electron gas at the  $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$  heterointerface"; *Nature* 427, No. 6973 (2004) 423  
 [2] N. Reyren et al; "Superconducting interfaces between insulating oxides"; *Science*.317 (2007) 1196  
 [3] A. Brinkman et al;"Magnetic effects at the interface between nonmagnetic oxides"; *Nat. Mater.*6 (2007) 493

کاهش می یابد. بنابراین برای یک چگالی الکترونی خاص، نمی توان مقدار این فاصله را تغییر داد. در چنین شرایطی احتمال این که مد آکوستیکی بتواند در حد طول موج های بزرگ بالای ناحیه برانگیختگی های الکترون- حفره بوجود بیاید، به شدت به مقدار ثابت دی الکتریک محیط بستگی دارد. مقدار ثابت دی الکتریک  $\text{SrTiO}_3$  در دماهای پایین  $\epsilon_s = 25000$  گزارش شده است، اما این مقدار به میدان الکتریکی و یا چگالی بار در سطح مشترک بستگی دارد و با افزایش چگالی بار در سطح مشترک کاهش می یابد. گرچه چنین رفتاری توسط گروه های مختلف نشان داده شده است<sup>[۱،۲]</sup>، اما همچنان مقدار عددی یکسانی برای یک چگالی بار مشخص گزارش نشده است. به همین دلیل ما مدهای پلاسمونی سیستم را برای مقادیر مختلف ثابت دی الکتریک  $\text{SrTiO}_3$ ،  $\epsilon_s = 20, 50, 100, 300$  که منجر به مقادیر  $\epsilon_s = 15, 75, 175, 575$  برای متوسط ثابت دی الکتریک سیستم می شوند، نشان داده ایم (ثابت دی الکتریک  $\text{LaAlO}_3$ ، ۲۵ در نظر گرفته شده است).

خطوط نقطه چین در شکل ها مرز ناحیه برانگیختگی های الکترون- حفره سیستم را نشان می دهند. در نواحی زیر این خطوط قسمت موهومی تابع دی الکتریک یک مقدار متناهی خواهد داشت که باعث میرایی مدهای پلاسمونی می شود. خطوط پررنگ در شکل بالا مدهای اپتیکی و در شکل پایین مدهای آکوستیکی اول سیستم را نشان می دهند.

مد آکوستیکی دوم، مدی همواره میراست و به همین دلیل در شکل نشان داده نشده است. می توان نشان داد که حتی در حد طول موج های بزرگ هم این مد آکوستیکی در هیچ شرایطی نامیرا نخواهد بود. اما میرایی مد آکوستیکی اول به شدت به مقدار ثابت دی الکتریک بستگی دارد و برای ثابت های دی الکتریک کوچک همواره می توان ناحیه ای از طول موج ها را یافت که به ازای آنها این مد آکوستیکی نامیرا باشد. هرچه ثابت دی الکتریک محیط بیشتر باشد ناحیه ای که این مد در آن نامیرا است کوچک تر خواهد بود و در نهایت برای  $\epsilon_s = 300$  این مد کاملاً در زیر ناحیه برانگیختگی های الکترون حفره ایجاد می شود. همچنین دیده می شود که میرایی مد اپتیکی نیز در  $\epsilon_s$  های کوچک تر، در انرژی های بالاتری رخ می دهد. در واقع برای سیستمی با ثابت دی الکتریک

- [۴] L.Li, C. Richter, J. Mannhart, & Ashoori; "Coexistence of magnetic order and two-dimensional superconductivity at LaAlO<sub>3</sub>/SrTiO<sub>3</sub> interfaces"; *Nature Phys.* **7** (2011) 762
- [۵] S. Thiel et al; "Tunable quasi-two-dimensional electron gas in oxide heterostructures"; *Science*. **313** (2006) 1942
- [۶] M. Hosoda et al; "Compositional and gate tuning of the interfacial conductivity in LaAlO<sub>3</sub>/SrTiO<sub>3</sub> heterostructures"; *Appl. Phys. Lett.* **102** (2013) 103507
- [۷] K. Younghyu, R. M. Lutchyn, C. Nayak; "Origin and transport signatures of spin-orbit interactions in one and two-dimensional SrTiO<sub>3</sub>-based heterostructures"; *Phys. Rev. B.* **87** (2013) 245121
- [۸] G.F. Giuliani and G. Vignale, "*Quantum Theory of the Electron Liquid*" Cambridge University Press, Cambridge (2005)
- [۹] C. Herring and E. Vogt, "Transport and deformation-potential theory for many-valley semiconductors with anisotropic scattering"; *Phys. Rev.* **101** (1956) 944
- [۱۰] J.R. Tolsma, A. Principi, R. Asgari, M. Polini and A.H. MacDonald; "Quasiparticle mass enhancement and fermi surface shape modification in oxide two-dimensional electron gases"; *Phys. Rev. B.* **83** (2016) 045120
- [۱۱] S. Gariglio, A. Fete and J. M. Triscone; "Electron confinement at the LaAlO<sub>3</sub>/SrTiO<sub>3</sub> interface"; *J. Phys.: Condens. Matter.* **27** (2015) 283201
- [۱۲] O. Copie et al; "Towards two-dimensional metallic behavior at LaAlO<sub>3</sub>/SrTiO<sub>3</sub> interfaces"; *Phys. Rev. Lett.* **102** (2009) 216804