

Physique

Exercice : Hétérostructures d'oxydes

Les systèmes bi-dimensionnels d'électrons sont des ingrédients cruciaux pour l'électronique moderne. La quête de réalisations de gaz bi-dimensionnels d'électrons aux interfaces entre différents oxydes de métaux de transition est à l'origine d'un nouveau domaine de recherche, appelé *oxyde electronics*. Cet exercice traite de telles *hétérostructures d'oxydes*, des “sandwichs” de différents composés oxydes.

Partie 0

Dans cette partie, nous allons établir quelques faits simples utiles par la suite.

- (1) Nous considérons deux grandes plaques bidimensionnelles (2D), de surfaces S , chargées respectivement de $-Q$ et $+Q$ ($Q > 0$), placées à une distance d l'une de l'autre. Nous allons négliger tout effet de bord (c'est-à-dire $S \rightarrow \infty$, $Q \rightarrow \infty$, Q/S fini).
- (a) Calculer le flux du champ électrique à travers une surface adéquate qui contient une partie de la plaque chargée positivement.
- (b) Calculer le flux du champ électrique à travers une surface adéquate qui contient une partie des deux plaques.
- (c) Donner une expression pour le champ électrique, entre les plaques et en dehors.
- (d) Calculer le potentiel électrostatique en fonction de z , où l'axe z a été choisi perpendiculaire aux plaques.
- (2) Nous considérons maintenant une double paire de plaques, c'est-à-dire quatre plaques 2D de surfaces S avec les charges $-Q$, $+Q$, $-Q$, $+Q$, à des distances d entre deux plaques consécutives.
- (a) Calculer le champ électrique partout dans l'espace.
- (b) Calculer le potentiel électrostatique en fonction de z .

Partie I

- (3) La structure cristalline de LaAlO_3 peut être comprise comme une suite de couches de LaO et de AlO_2 . Expliquer pourquoi une seule couche de AlO_2 porte une charge nette de $-N$, où N est le nombre de cellules unité (c'est-à-dire d'unités de AlO_2) dans le plan bi-dimensionnel. On notera cette couche comme “ AlO_2^- ”. Quelle est la charge portée par cette couche? Expliquer pourquoi on qualifie ces couches de “polaires”.

NB. La table des éléments est reproduite pour rappel à la fin de ce document.

- (4) Des considérations analogues peuvent être appliquées au SrTiO_3 , composé de couches de SrO et de TiO_2 . Etant donné que Ti se trouve dans un état de valence Ti^{4+} , indiquer la valence de TiO_2 et SrO . Ces couches sont-elles polaires?

Partie II

- (5) Nous allons maintenant considérer une hétérostructure de SrTiO_3 et LaAlO_3 comme représentée dans la Fig. 1a. Nous choisissons l'axe z perpendiculaire aux plans bi-dimensionnels. Esquisser le potentiel électrostatique en fonction de z .
- (6) Que se passe-t-il dans la limite d'un nombre infini de couches LaAlO_3 ? Commentaire?
- (7) Nous supposons pouvoir ajouter un demi électron supplémentaire par cellule unité à l'interface, et enlever un demi électron par cellule unité à la surface, voir Fig. 1b. Esquisser le potentiel électrostatique en fonction de z .
- (8) Que se passe-t-il dans la limite d'un nombre infini de couches LaAlO_3 ? Commentaire?
- (9) Quelle est la configuration stable du système? Est-il possible de réaliser les situations des Figs. 1a et 1b expérimentalement? Comment?

Partie III

Dans cette partie, nous étudions une hétérostructure de SrTiO_3 et LaAlO_3 , où un espaceur ("spacer material") a été introduit dans le LaAlO_3 , voir Fig. 2a. L'espaceur consiste en un certain nombre de couches d'oxyde non-polaire.

- (10) Esquisser le potentiel électrostatique en fonction de z .
- (11) Nous supposons à nouveau que nous pouvons ajouter un demi électron supplémentaire par cellule unité à l'interface, et enlever un demi électron par cellule unité à la surface, voir Fig. 2b. Esquisser le potentiel électrostatique en fonction de z .
- (12) Qu'est-ce qui se passe dans la limite d'un nombre infini de couches LaAlO_3 ? Commentaire?

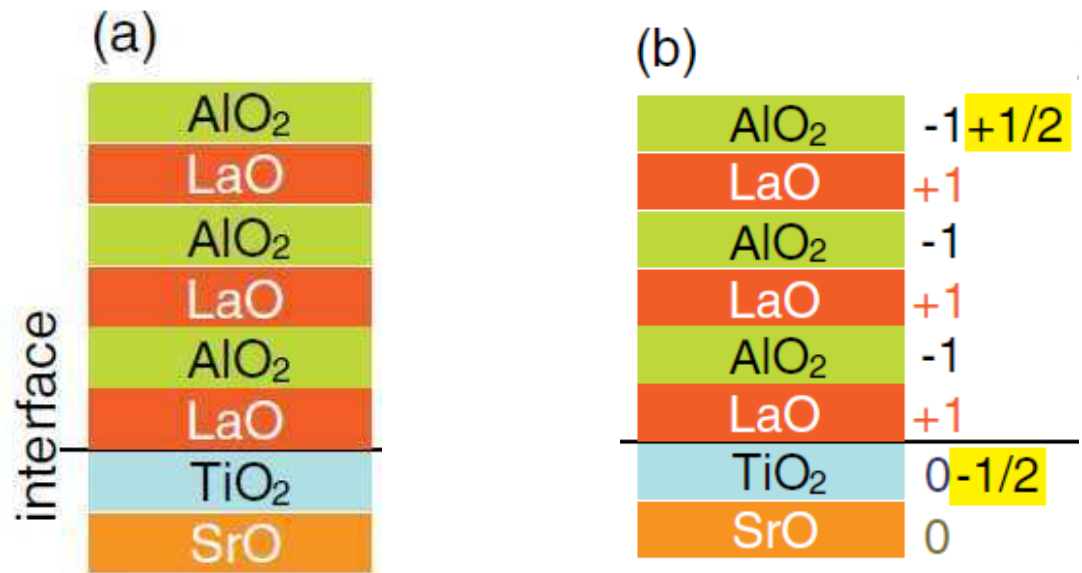


Figure 1: Hétérostructure de LaAlO₃/SrTiO₃

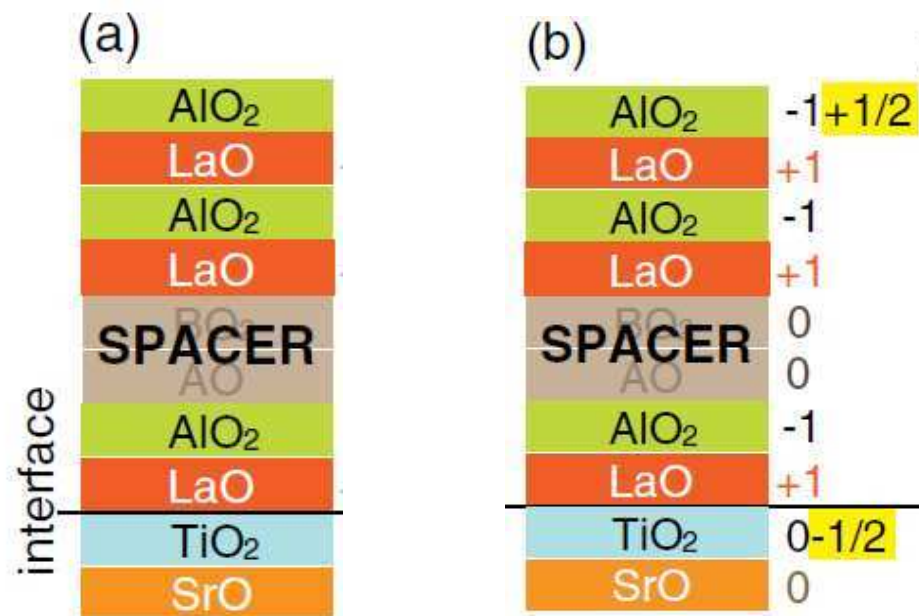


Figure 2: Hétérostructure de LaAlO₃/SrTiO₃, avec espaceur.

WebElements: the periodic table on the world-wide web

<http://www.shef.ac.uk/chemistry/web-elements/>

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
hydrogen 1 H 1.00794(7)																	helium 2 He 4.002602(2)	
lithium 3 Li 6.941(2)	beryllium 4 Be 9.012182(3)	Key: element name atomic number element symbol 1995 atomic weight (mean relative mass)											boron 5 B 10.811(7)	carbon 6 C 12.0107(8)	nitrogen 7 N 14.00674(7)	oxygen 8 O 15.9994(3)	fluorine 9 F 18.9984032(5)	neon 10 Ne 20.1797(6)
sodium 11 Na 22.989770(2)	magnesium 12 Mg 24.3050(6)											aluminium 13 Al 26.981538(2)	silicon 14 Si 28.0855(3)	phosphorus 15 P 30.973761(2)	sulfur 16 S 32.066(6)	chlorine 17 Cl 35.4527(9)	argon 18 Ar 39.948(1)	
potassium 19 K 39.0983(1)	calcium 20 Ca 40.078(4)	scandium 21 Sc 44.955910(8)	titanium 22 Ti 47.867(1)	vanadium 23 V 50.9415(1)	chromium 24 Cr 51.9961(6)	manganese 25 Mn 54.938049(9)	iron 26 Fe 55.845(2)	cobalt 27 Co 58.933200(9)	nickel 28 Ni 58.6934(2)	copper 29 Cu 63.546(3)	zinc 30 Zn 65.39(2)	gallium 31 Ga 69.723(1)	germanium 32 Ge 72.61(2)	arsenic 33 As 74.92160(2)	selenium 34 Se 78.96(3)	bromine 35 Br 79.904(1)	krypton 36 Kr 83.80(1)	
rubidium 37 Rb 85.4678(3)	strontium 38 Sr 87.62(1)	yttrium 39 Y 88.90585(2)	zirconium 40 Zr 91.224(2)	niobium 41 Nb 92.90638(2)	molybdenum 42 Mo 95.94(1)	technetium 43 Tc [98.9063]	ruthenium 44 Ru 101.07(2)	rhodium 45 Rh 102.90550(2)	palladium 46 Pd 106.42(1)	silver 47 Ag 107.8682(2)	cadmium 48 Cd 112.411(8)	indium 49 In 114.818(3)	tin 50 Sn 118.710(7)	antimony 51 Sb 121.760(1)	tellurium 52 Te 127.60(3)	iodine 53 I 126.90447(3)	xenon 54 Xe 131.29(2)	
caesium 55 Cs 132.90545(2)	barium 56 Ba 137.327(7)	57-70 *	lutetium 71 Lu 174.967(1)	hafnium 72 Hf 178.49(2)	tantalum 73 Ta 180.9479(1)	tungsten 74 W 183.84(1)	rhenium 75 Re 186.207(1)	osmium 76 Os 190.23(3)	iridium 77 Ir 192.217(3)	platinum 78 Pt 195.078(2)	gold 79 Au 196.96655(2)	mercury 80 Hg 200.59(2)	thallium 81 Tl 204.3833(2)	lead 82 Pb 207.2(1)	bismuth 83 Bi 208.98038(2)	polonium 84 Po [208.9824]	astatine 85 At [209.9871]	radon 86 Rn [222.0176]
francium 87 Fr [223.0197]	radium 88 Ra [226.0254]	89-102 **	lawrencium 103 Lr [262.110]	rutherfordium 104 Rf [261.1089]	dubnium 105 Db [262.1144]	seaborgium 106 Sg [263.1186]	bohrium 107 Bh [264.12]	hassium 108 Hs [265.1306]	meitnerium 109 Mt [268]	ununnium 110 Uun [269]	ununium 111 Uuu [272]	unbinium 112 Uub [277]						

*lanthanides

**actinides

lanthanum 57 La 138.9055(2)	cerium 58 Ce 140.116(1)	praseodymium 59 Pr 140.90765(2)	neodymium 60 Nd 144.24(3)	promethium 61 Pm [144.9127]	samarium 62 Sm 150.36(3)	europium 63 Eu 151.964(1)	gadolinium 64 Gd 157.25(3)	terbium 65 Tb 158.92534(2)	dysprosium 66 Dy 162.50(3)	holmium 67 Ho 164.93032(2)	erbium 68 Er 167.26(3)	thulium 69 Tm 168.93421(2)	ytterbium 70 Yb 173.04(3)
actinium 89 Ac [227.0277]	thorium 90 Th 232.0381(1)	protactinium 91 Pa 231.03588(2)	uranium 92 U 238.0289(1)	neptunium 93 Np [237.0482]	plutonium 94 Pu [244.0642]	americium 95 Am [243.0614]	curium 96 Cm [247.0703]	berkelium 97 Bk [247.0703]	californium 98 Cf [251.0796]	einsteinium 99 Es [252.0830]	fermium 100 Fm [257.0951]	mendelevium 101 Md [258.0984]	nobelium 102 No [259.1011]

Symbols and names: the symbols of the elements, their names, and their spellings are those recommended by IUPAC. After some controversy, the names of elements 101-109 are now confirmed: see Pure & Appl. Chem., 1997, **69**, 2471-2473. Names have not been proposed as yet for the most recently discovered elements 110-112 so those used here are IUPAC's temporary systematic names: see Pure & Appl. Chem., 1979, **51**, 381-384. In the USA and some other countries, the spellings aluminum and cesium are normal while in the UK and elsewhere the usual spelling is sulphur.

Periodic table organisation: for a justification of the positions of the elements La, Ac, Lu, and Lr in the WebElements periodic table see W.B. Jensen, "The positions of lanthanum (actinium) and lutetium (lawrencium) in the periodic table", J. Chem. Ed., 1982, **59**, 634-636.

Group labels: the numeric system (1-18) used here is the current IUPAC convention. For a discussion of this and other common systems see: W.C. Fernelius and W.H. Powell, "Confusion in the periodic table of the elements", J. Chem. Ed., 1982, **59**, 504-508.

Atomic weights (mean relative masses): see Pure & Appl. Chem., 1996, **68**, 2339-2359. These are the IUPAC 1995 values. Elements for which the atomic weight is contained within square brackets have no stable nuclides and are represented by one of the element's more important isotopes. However, the three elements thorium, protactinium, and uranium do have characteristic terrestrial abundances and these are the values quoted. The last significant figure of each value is considered reliable to ± 1 except where a larger uncertainty is given in parentheses.

©1998 Dr Mark J Winter [University of Sheffield, webelements@sheffield.ac.uk]. For updates to this table see <http://www.shef.ac.uk/chemistry/web-elements/pdf/periodic-table.html>. Version date: 1 March 1998.