

专题: 半导体物理与器件

基于交错磁自旋劈裂的简化双层隧道结隧穿磁阻*

徐一博¹⁾²⁾ 叶茂轩²⁾ 陈佳优²⁾ 杨维^{1)2)†} 林晓阳^{1)2)‡} 赵巍胜¹⁾²⁾

1) (杭州市北京航空航天大学国际创新研究院 (北京航空航天大学国际创新学院), 自旋芯片与技术全国重点实验室, 杭州 311115)

2) (北京航空航天大学集成电路科学与工程学院, 费尔北京研究院, 北京 100191)

(2025 年 12 月 2 日收到; 2026 年 1 月 20 日收到修改稿)

新型交错磁材料打破了传统反铁磁隧道结的自旋简并限制, 为开发新型自旋电子器件提供了新的机遇. 然而, 利用交错磁半导体在简化器件结构的同时保持高热稳定性和显著隧穿磁阻效应, 仍是实现高密度存储器件的关键挑战. 本文提出一种基于 V_2Se_2O/Fe_2B 范德瓦耳斯异质结构的隧道结. 该结构利用交错磁动量空间的自旋劈裂效应, 克服了传统反铁磁隧道结因自旋简并无法实现隧穿磁阻的限制; 同时, 通过铁磁/交错磁界面的交换偏置效应有效提升铁磁层热稳定性, 替代传统人工合成反铁磁钉扎层, 显著简化器件结构. 采用密度泛函理论结合非平衡格林函数方法的第一性原理计算表明, V_2Se_2O/Fe_2B 双层结构在室温下实现 283% 的隧穿磁阻效应, 并具有通过材料掺杂或静电门控进一步优化性能的潜力. 本研究所提出的 V_2Se_2O/Fe_2B 简化双层磁隧道结, 在显著降低结构复杂度的同时有效提升器件热稳定性, 验证了交错磁材料在新型自旋存储器中的可行性与应用前景.

关键词: 交错磁隧道结, 交错磁半导体, 隧穿磁阻

DOI: 10.7498/aps.75.20251642

CSTR: 32037.14.aps.75.20251642

1 引言

磁隧道结 (magnetic tunnel junction, MTJ)^[1,2] 采用铁磁/绝缘隧穿层/铁磁的“三明治”结构, 广泛应用于磁随机存储器 (magnetic random access memory, MRAM)^[3,4] 等先进磁存储技术中, 是实现非易失性存储^[5-7] 和逻辑应用^[8-10] 的核心元件. MTJ 中铁磁电极的相对磁化构型决定了器件的低阻与高阻, 分别对应存储信息的“0”和“1”^[11-15]. 相对磁化构型的切换使器件中存在隧穿磁阻效应 (tunneling magnetoresistance, TMR)^[16-18], 可以用 $TMR = (R_{AP} - R_P)/R_P$ 来定量描述, 其中 $R_{P(AP)}$ 分别代表铁磁电极平行和反平行磁化构型^[19-21].

然而, 随着器件工艺不断进步与尺寸持续缩小, 铁磁层的能量势垒 (如图 1(a) 中的 E_1) 不断降低, 使器件的存储稳定性和性能显著下降^[22-24]. 尽管广泛采用的 $MgO/CoFeB$ 界面产生的垂直磁各向异性能够提供一定的能量势垒, 但是不足以支撑 MTJ 尺寸进一步微缩. 这种尺寸与性能之间的内在矛盾极大地制约了高性能、高稳定性自旋电子器件的发展.

为增强存储稳定性, 传统方案通常增加势垒层和铁磁层的厚度^[25-28]. 然而, 当隧道结尺寸持续微缩时, 铁磁材料的磁各向异性性能和势垒层的隧穿效应显著减弱^[29-31], 使器件面临热稳定性下降和信号读出能力减弱的严峻挑战. 因此, 如何在小尺寸下同时实现高稳定性和显著 TMR 成为自旋电子

* 国家自然科学基金 (批准号: T2394475, 62371019, 52261145694, 12504127) 和杭州市北京航空航天大学国际创新研究院 (北京航空航天大学国际创新学院) (批准号: 2024KQ052, 2025BKZ001) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: spin_yang_1995@buaa.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: XYLin@buaa.edu.cn

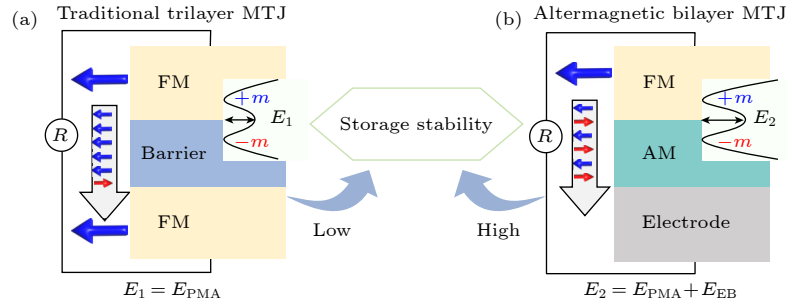


图 1 传统三层隧道结和交错磁简化隧道结示意图 (a) 两侧电极均为铁磁, 中间为氧化物势垒; 自由层的热稳定势垒为 E_1 , 等于磁各向异性能 E_{PMA} ; (b) 上层电极为铁磁, 下层电极只需是导电金属电极即可 (如 Au), 势垒层采用交错磁材料. 自由层的热稳定势垒为 $E_2 = E_{\text{PMA}} + E_{\text{EB}}$, 其中 E_{EB} 为铁磁/交错磁界面的交换偏置. 在相同铁磁体尺寸 (厚度/体积) 下 $E_2 > E_1$, 说明交错磁简化隧道结具有更高的热稳定性, 从而提升信息存储稳定性

Fig. 1. Schematic diagrams of traditional three-layer tunnel junction and simplified tunnel junction with altermagnetic material. (a) Both electrodes are ferromagnetic, with an oxide barrier in between. The thermal stability energy barrier of the free layer is E_1 , which is equal to the perpendicular magnetic anisotropy energy E_{PMA} . (b) The upper electrode is ferromagnetic, while the lower electrode only needs to be a conductive metal electrode (e.g., Au). The barrier layer is made of a altermagnetic material. The thermal stability energy barrier of the free layer is $E_2 = E_{\text{PMA}} + E_{\text{EB}}$, where E_{EB} is the exchange bias at the ferromagnetic/altermagnetic interface. Under the same ferromagnetic material size $E_2 > E_1$, indicating that the simplified altermagnetic tunnel junction has higher thermal stability, thus enhancing information storage stability.

器件研究的核心挑战. 为解决这一问题, 研究人员提出采用反铁磁材料作为势垒层^[32,33]或铁磁电极^[34-36]的替代材料. 反铁磁材料具有高热稳定性和零净磁矩特性^[37,38], 且与铁磁层之间的交换偏置效应能够进一步增强器件的存储稳定性^[39]. 然而, 大多数反铁磁材料 (如 CuMnAs ^[34,40], NiO ^[41] 等) 存在自旋简并特性, 导致无法在反铁磁隧道结 (antiferromagnetic tunnel junction, AFMTJ) 中实现 TMR 效应. 近年来, 交错磁材料 (如 CrSb ^[42,43], MnTe ^[44,45], MnF_2 ^[46] 以及 $\text{V}_2\text{Se}_2\text{O}$ ^[47]) 的发现为突破这一瓶颈提供了新思路, 其动量空间显著的自旋劈裂特性使其能够克服传统反铁磁自旋简并带来的限制.

因此, 本文提出一种新型的 $\text{V}_2\text{Se}_2\text{O}/\text{Fe}_2\text{B}$ 范德瓦耳斯异质结结构的交错磁隧道结器件. 该器件使用交错磁体 $\text{V}_2\text{Se}_2\text{O}$ 作为势垒层, 不仅可选择性地调控不同动量空间区域的自旋极化隧穿电流, $\text{V}_2\text{Se}_2\text{O}/\text{Fe}_2\text{B}$ 界面的交换偏置效应还能提升铁磁层磁矩的翻转能量势垒, 从而增强器件的热稳定性 (见图 1(b)). 此外, 交错磁/铁磁的双层异质结结构大幅简化了器件的制备工艺. 通过密度泛函理论 (density functional theory, DFT) 结合非平衡格林函数的第一性原理计算结果表明, 得益于 $\text{V}_2\text{Se}_2\text{O}$ 动量空间自旋劈裂效应, 在该器件中室温下实现了高达 283% 的 TMR. 本研究不仅证明了交错磁材料在磁隧道结中的可行性, 也为新型自旋

器件的发展提供了重要理论基础与设计策略.

2 计算理论方法

本文基于 VASP (Vienna *ab initio* simulation package)^[48,49] 中的密度泛函理论对材料和器件进行结构优化和自洽计算. 广义梯度近似 (generalized gradient approximation, GGA) 和 PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) 泛函被用于描述计算过程中的交换关联相互作用^[50,51]. 在结构优化和自洽计算过程中, 平面波基组的截断能可设置为 500 eV, 并使用以 Γ 点为中心 $11 \times 11 \times 1$ 的 Monkhorst-Pack 网格对布里渊区进行采样. 由于 $\text{V}_2\text{Se}_2\text{O}$ 的自旋劈裂不依赖于自旋轨道耦合 (spin-orbit coupling, SOC), 因此在自洽计算过程中并不开启 SOC. 考虑到 V-3d 和 Fe-3d 轨道电子的强相互关联作用, 本文将两种原子的 Hubbard U 值分别设置为 3.8 eV^[47] 和 1.05 eV^[52], 考虑到交错磁电子结构对有效关联强度的敏感性, 进一步讨论了不同 U 值对体系从金属到绝缘体相变及自旋能谷锁定特征的具体影响 (详见附录 C). 在此基础上利用 Nanodcal^[53,54] 软件包的密度泛函理论结合非平衡格林函数方法进行输运性质计算. 计算过程中基组函数通过双 Zeta 加极化 (double-zeta plus polarization, DZP) 轨道基集的线性组合 (linear combination of atomic orbital, LCAO) 来描述原

子. 截断能设定为 160 Ry, 密度矩阵和哈密顿矩阵的收敛准则设定为 1×10^{-4} eV. 自旋依赖输运计算的 k 点网格分别设为 $12 \times 12 \times 1$ 和 $100 \times 100 \times 1$. 其中材料与器件的自洽计算采用 $12 \times 12 \times 1$ 网格, V_2Se_2O 和 Fe_2B 的局域态密度以及器件透射系数计算采用 $100 \times 100 \times 1$ 网格. 在平衡条件下, 透射系数在整个布里渊区内取平均值 [55]:

$$T_\sigma(E) = \frac{1}{A_{BZ}} \int_{BZ} T_\sigma(E, k_{//}) dk_{//}, \quad (1)$$

其中 A_{BZ} 是布里渊区的面积; $T_\sigma(E, k_{//})$ 表在横向布洛赫波矢 $k_{//}$ 和能量 E 下自旋态为 σ 的透射系数. TMR 是评估磁隧道结性能的重要参数, 它反映了器件信息读出能力的强弱, 提高 TMR 可以有效改善器件的信噪比. 在本研究中, TMR 通过以下公式进行计算 [56]:

$$\text{TMR} = \frac{|(T_{PCup} + T_{PCdown}) - (T_{APCup} + T_{APCdown})|}{T_{APCup} + T_{APCdown}} \times 100\%, \quad (2)$$

其中 T_{PCup} 和 T_{PCdown} 分别表示上下电极磁化平行配置时自旋向上和自旋向下的透射系数; T_{APCup} 和 $T_{APCdown}$ 分别表示上下电极磁化反平行配置时自旋向上和自旋向下的透射系数.

3 计算结果与分析

V_2Se_2O 具有空间群 $P4/mmm$, 其原子结构如图 2(a) 所示. 单层 V_2Se_2O 由三层原子构成四方结构, 中间层夹在两个 Se 原子层之间, 包含两个 V 原子和一个 O 原子. 每个 V 原子分别与四个 Se 原子和两个 O 原子相邻, 形成畸变八面体结构. 两个 V 原子亚晶格之间形成二维 Néel 反铁磁序. 如图 2(d) 所示, V_2Se_2O 自旋向上和自旋向下能带在高对称点路径上并未完全重叠, 尤其在 X 和 Y 点处出现了明显的能带谷, 这两个谷对应的 V 原子磁矩分别为 $-1.788\mu_B$ 和 $+1.788\mu_B$. 由于该反铁磁序破坏了空间反演-时间反演联合对称性 (PT), 从而允许在倒空间中存在自旋劈裂. 值得注意的是, 这自旋劈裂源于巡游电子与局域磁矩之间的交换耦合, 而非依赖 SOC. V_2Se_2O 同时具备优异的易剥离特性和高于室温的奈尔温度, 结合其动量空间自旋劈裂特性、反铁磁材料的无杂散磁场以及超快动态响应特性, 使其成为反铁磁器件中理想的势垒材料.

Fe_2B 与 V_2Se_2O 具有相同的空间群, 原子结构示意图如图 2(b) 所示. 单层 Fe_2B 由四个原子层构成四方结构, 其中 Fe 和 B 原子层交替堆叠, 每个

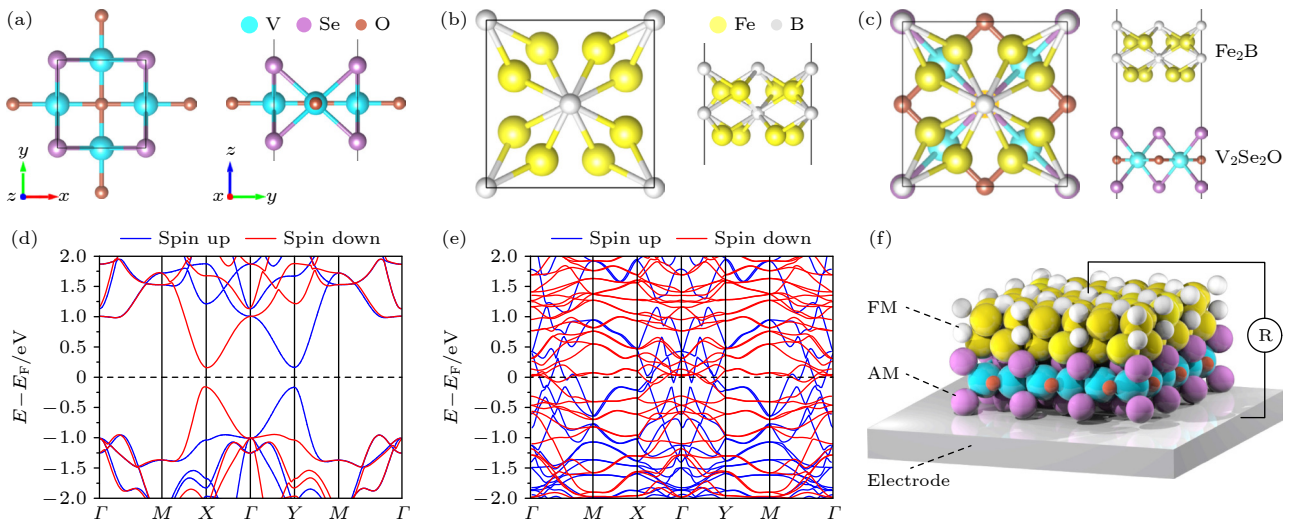


图 2 材料电子结构 (a) V_2Se_2O , (b) Fe_2B 以及 (c) V_2Se_2O/Fe_2B 异质结晶体结构的俯视图与侧视图. (d) 与 (e) 分别为 V_2Se_2O 与 Fe_2B 沿高对称路径的自旋极化能带, 蓝色代表自旋向上, 红色代表自旋向下. (f) 为简化隧道结的器件结构示意图: 铁磁层作为电极和自由层, 交错磁材料兼做势垒层与钉扎层, 另一端为非磁导体电极

Fig. 2. Material electronic structure. Top and side views of the crystal structure of (a) V_2Se_2O , (b) Fe_2B , and (c) V_2Se_2O/Fe_2B heterostructure. (d), (e) Spin-polarized band structures of V_2Se_2O and Fe_2B , where blue represents spin-up and red represents spin-down. (f) Schematic diagram of the simplified altermagnetic tunnel junction (SAMTJ) device structure: The ferromagnetic layer serves as both the electrode and the free layer, with the altermagnetic material functioning as both the barrier and pinning layer, and the other end as a non-magnetic conductive electrode.

B 原子被 8 个 Fe 原子包围. 同一层中的 Fe 原子磁矩分别为 $2.30\mu_B/2.712\mu_B/2.661\mu_B/2.248\mu_B$, 较大的原子磁矩使 Fe_2B 具有更高的磁各向异性和自旋极化率. 沿相同高对称性路径计算得到的能带结果 (如图 2(e) 所示) 表明, 一个自旋通道的电子态密度明显高于另一个自旋通道, 从而产生较高的自旋极化. 相较其他交错磁材料 (如 MnF_2 约 68.4 K)^[57], $\text{V}_2\text{Se}_2\text{O}$ 具有约 800 K 的奈尔温度^[58], 结合 Fe_2B 的高居里温度 (约 1017 K)^[59], 使 $\text{V}_2\text{Se}_2\text{O}/\text{Fe}_2\text{B}$ 异质结成为发展室温自旋电子器件的潜在材料体系.

基于上述材料优势, 本文构建了由 $\text{V}_2\text{Se}_2\text{O}$, Fe_2B 和 Au 组成的简化交错磁隧道结 (simplified altermagnetic tunnel junction, SAMTJ). 该器件的结构示意图和原子堆叠示意图分别如图 2(f) 和图 3(a) 所示. $\text{V}_2\text{Se}_2\text{O}$ 和 Fe_2B 的晶格常数分别为

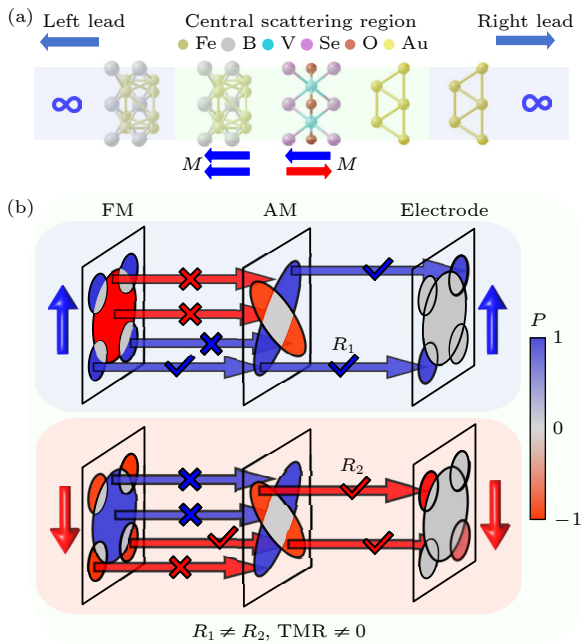


图 3 (a) 简化隧道结器件的原子堆叠示意图, 其中 Fe_2B 作为无限半电极, Au 作为另一端的无限半电极, $\text{Fe}_2\text{B}/\text{V}_2\text{Se}_2\text{O}/\text{Au}$ 结构作为中心透射区域; (b) 基于交错磁动量空间自旋劈裂的 TMR 机制示意图. Colorbar 显示了材料态密度的自旋极化, 蓝色代表自旋多态, 红色代表自旋少态, 灰色表示无自旋极化

Fig. 3. (a) Atomic stacking diagram of the SAMTJ device, where Fe_2B acts as an infinite half-electrode, Au as the other infinite half-electrode, and the $\text{Fe}_2\text{B}/\text{V}_2\text{Se}_2\text{O}/\text{Au}$ structure serves as the central tunneling region; (b) schematic illustration of the TMR mechanism based on momentum-space spin splitting in the altermagnetic. The colorbar shows the spin polarization of the material's density of states: blue denotes majority-spin states, red denotes minority-spin states, and gray indicates no spin polarization.

3.8488 Å 和 2.5457 Å. 在构建器件模型时, 考虑到 $\text{V}_2\text{Se}_2\text{O}$ 的交错磁性对外界应变敏感, 本文将其设置为衬底材料, 并采用 $\text{V}_2\text{Se}_2\text{O}$ 的 $\sqrt{2}\times\sqrt{2}$ 晶胞和 Fe_2B 的 2×2 超胞进行匹配. 该异质结的晶格失配率约为 6.9%, 较小的晶格失配保持了交变磁材料的本征磁性, 同时也为实验制备提高了良好的可行性. 本工作中铁磁电极 Fe_2B 的磁化方向分别设置为向上 (平行构型) 和向下 (反平行构型), 同时保持 $\text{V}_2\text{Se}_2\text{O}$ 的奈尔矢量不变, 以确保交错磁的反铁磁序稳定.

与传统反铁磁隧道结依赖精心设计的复杂非共线磁结构 (如 Mn_3X 或 RuO_2) 或通过界面工程在自旋筒并材料 (如 Fe_4GeTe_2) 中诱发自旋极化的设计方案相比, 交错磁简化隧道结利用其本征的动量空间自旋劈裂特性, 无需复杂的界面工程即可实现了显著的 TMR 效应. 如图 3(b) 所示, $\text{V}_2\text{Se}_2\text{O}$ 在费米能级处的自旋极化态密度呈现明显的交错分布特征, 中心重叠区域自旋极化为零, 周围分别分布着自旋多态和自旋少态, 两者在 K 空间中完全分离. 当铁磁层的磁化方向发生翻转时, 其自旋极化态与交错磁层在动量空间中的有效重叠程度改变, 导致自旋多态隧穿电阻 R_1 和自旋少态隧穿电阻 R_2 不相等, 即 $R_1 \neq R_2$, 从而产生显著的 TMR 效应.

接下来, 为了探究交错磁简化隧道结自旋极化通道在动量空间的分布, 本文首先计算了平行与反平行磁化构型的自旋分辨透射系数能谱 (图 4(a)). 计算结果表明, 在平行磁化和反平行磁化构型下, 自旋向上和自旋向下的透射系数并不相同, 呈现出与铁磁隧道结中类似的现象, 这一现象与交错磁材料的自旋劈裂特性密切相关. 接下来, 本文计算了器件在平行与反平行磁化构型下的自旋极化率, 计算公式为:

$$P_S = \frac{|T_{\text{PC(APC)}}^{\uparrow} - T_{\text{PC(APC)}}^{\downarrow}|}{T_{\text{PC(APC)}}^{\uparrow} + T_{\text{PC(APC)}}^{\downarrow}} \times 100\%,$$

其中 $T_{\text{PC(APC)}}^{\uparrow}$ 和 $T_{\text{PC(APC)}}^{\downarrow}$ 分别表示自旋向上和自旋向下的透射系数. 计算结果 (图 4(b)) 表明在费米能级附近存在“高隧穿效率能区”, 即在这一能量范围内自旋极化率较高, 器件有望获得更高的 TMR 性能. 为了进一步验证这一观点, 本文利用透射系数计算 TMR, 如图 4(c) 所示, 结果表明在负能量区域 ($[-1.25 \text{ eV}, 0.5 \text{ eV}]$) 内, TMR 维持较大值 (约 150%), 且与高自旋极化率区域高度重合.

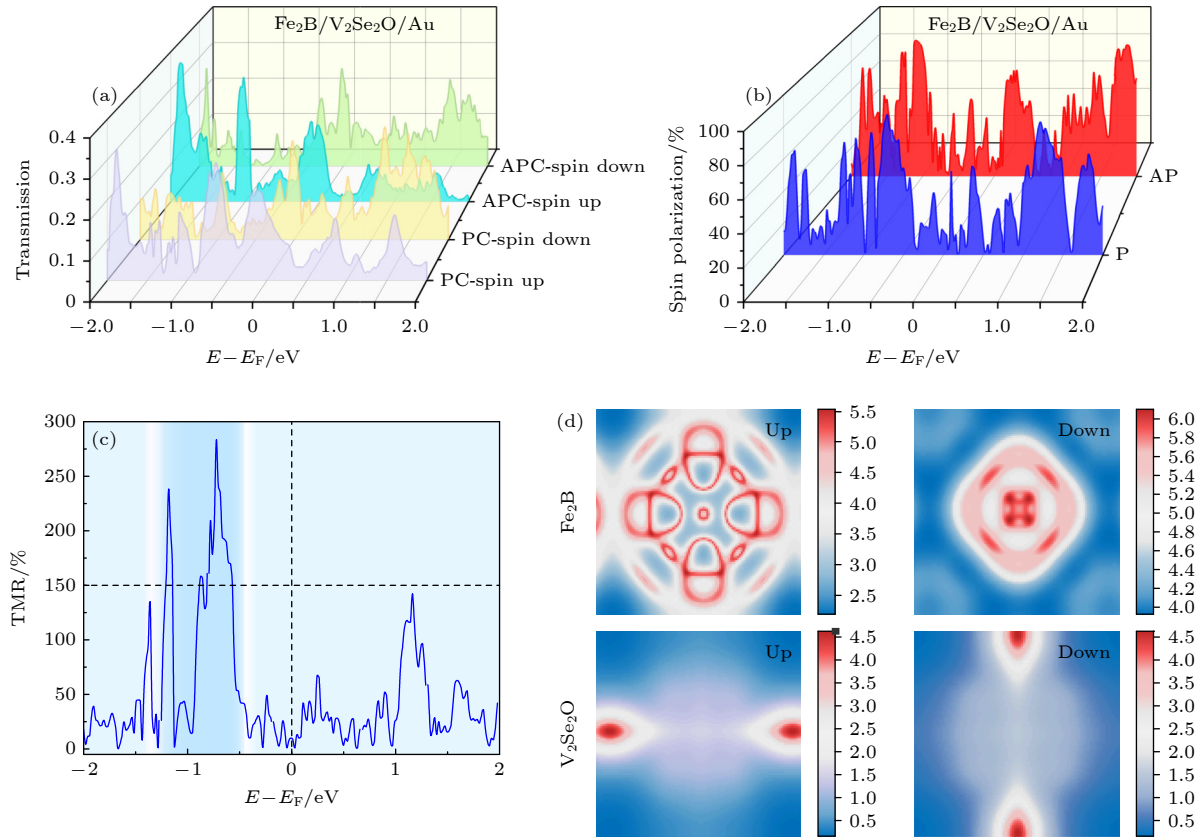


图 4 交错磁简化隧道结的输运性质 (a) 平行与反平行磁化构型下, 自旋向上和自旋向下的透射系数能谱; (b) 平行与反平行磁化构型下的自旋极化能谱; (c) TMR 能谱, 其中深蓝色区域表示 $\text{TMR} > 150\%$ 的能量范围; (d) 费米能级处, Fe_2B 和 $\text{V}_2\text{Se}_2\text{O}$ 自旋向上和自旋向下的二维布里渊区态密度分布图

Fig. 4. Transport properties of the simplified altermagnetic tunnel junction: (a) Transmission spectra of spin-up and spin-down under parallel and antiparallel magnetization configurations; (b) spin-polarization spectra under parallel and antiparallel magnetization configurations; (c) TMR spectra, where the dark-blue region denotes the energy range with $\text{TMR} > 150\%$; (d) two-dimensional Brillouin-zone-resolved density of states for spin-up and spin-down in Fe_2B and $\text{V}_2\text{Se}_2\text{O}$ at the Fermi level.

与传统反铁磁相比, 交错磁隧道结在所有的能量范围内均能产生 TMR 效应, 在费米能级处 TMR 为 9.8%. 此外, TMR 表现出显著的能量依赖性, 如 $0.12 \text{ eV}: 41.6\%$, $-0.56 \text{ eV}: 152.7\%$, $-0.72 \text{ eV}: 283\%$, 这与交错磁材料的动量空间自旋劈裂及铁磁电极的自旋极化特性密切相关. 实验中可通过栅压调控或化学掺杂精准调节费米能级位置, 使其移动至高自旋极化能区, 从而在实际应用中获得显著的 TMR 效应^[60,61].

本文进一步计算了 Fe_2B 和 $\text{V}_2\text{Se}_2\text{O}$ 中自旋分辨的 k_{\parallel} 依赖二维布里渊区态密度分布 (图 4(d)). 该参数决定了电极入射态和势垒层的分布特征. 在费米能级处, Fe_2B 自旋向上的态密度主要集中在 Γ -X 和 Γ -Y 路径上, 而自旋向下的态密度分布则集中在 Γ 点附近的小正方形区域. 值得注意的是, 费米能级处的态密度表明 Fe_2B 自身较高的自旋极化率, 这有助于形成倾向某种自旋的极化通道. 交

错磁材料 $\text{V}_2\text{Se}_2\text{O}$ 的态密度分布与本文对能带的分析完全一致. 在 Γ 点附近, 自旋向上和自旋向下的态密度几乎完全重合并且数量较少, 而分别分布在 Y 点和 X 点的椭圆区域则具有不同分布. 关于 SOC 效应, 铁磁电极 Fe_2B 中原子均为轻元素, 所以 SOC 不会显著影响自旋极化流的产生. 在自旋运输中, 虽然 SOC 诱发的自旋翻转散射会导致自旋通道间的混合, 从而使自旋极化率随传输距离呈指数衰减, 但其特征长度通常处于 10 nm 量级^[62], 而单层 $\text{V}_2\text{Se}_2\text{O}$ 的厚度 (1.5 nm) 远小于自旋扩散长度. 另一方面, Liu 等^[47] 的计算结果表明, 在考虑 SOC 的情况下, $\text{V}_2\text{Se}_2\text{O}$ 动量空间自旋劈裂依旧存在. 因此, 我们的器件模型中 SOC 的作用可以忽略不计. 综合考虑交错磁材料 $\text{V}_2\text{Se}_2\text{O}$ 高于室温的奈尔温度、铁磁电极的可调控性以及铁磁/交错磁界面效应, 为开发基于交错磁自旋电子纳米器件提供了优异的应用基础.

4 结 论

本文提出了一种创新的范德瓦耳斯异质结构的隧道结, 通过交错磁体独特的动量空间自旋劈裂特性, 解决了传统反铁磁隧道结因自旋简并而无法产生 TMR 的限制. 基于密度泛函理论结合非平衡态格林函数计算表明, 所构建的 V_2Se_2O/Fe_2B 异质结构在室温下实现高达 283% 的 TMR. 更为重要的是, 交错磁与铁磁层界面处的交换偏置效应能够有效钉扎铁磁层磁矩, 从而显著提升器件的热稳

定性和信息存储可靠性. 本研究为新型反铁磁隧道结开辟了新的设计思路, 有望推动更简化、更稳定的新型自旋电子器件的发展.

附录 A

为研究不同亚晶格中 V 原子的贡献, 如图 A1 所示, 分别对 V_1 与 V_2 进行了自旋极化投影能带计算 (图 A2). 结果表明, 尽管两者在结构上沿对角线对称, 其对能带及磁矩的贡献却显著不同, 表现为相反的自旋特性; 且在高对称点 (X 和 Y) 处均出现明显的自旋劈裂, 反映出不同亚晶格在动量空间自旋分裂中的重要作用.

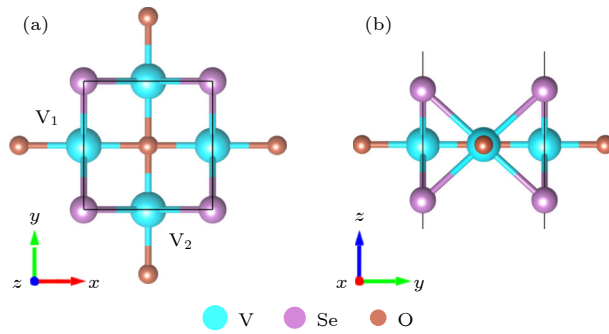


图 A1 V_2Se_2O 晶体结构的 (a) 俯视图, (b) 侧视图. 其中两个 V 原子 V_1 和 V_2 相对于晶体的对角线是对称的

Fig. A1. (a) Top and (b) side view of the crystal structure of V_2Se_2O , where the two V atoms, V_1 and V_2 , are symmetric with respect to the diagonal of the crystal.

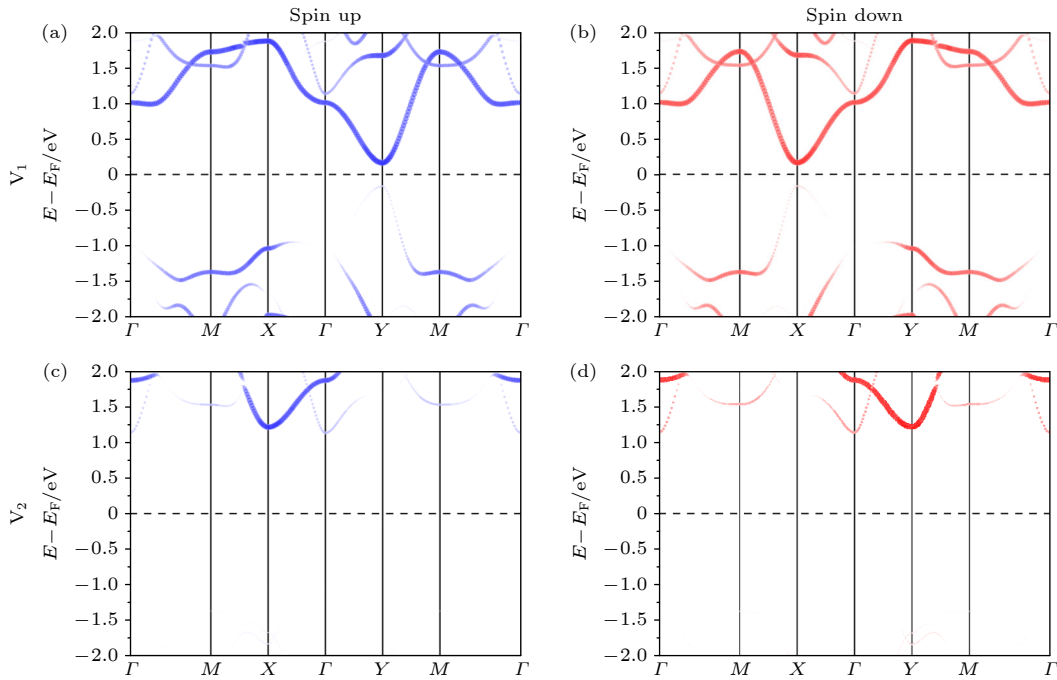


图 A2 V_2Se_2O 的原子投影自旋极化能带结构 (a) 和 (b) 分别为 V_1 原子的自旋向上和自旋向下能带结构; (c) 和 (d) 分别为 V_2 原子的自旋向上和自旋向下能带结构

Fig. A2. Spin-polarized band structure with atomic projections for V_2Se_2O : (a), (b) The spin-up and spin-down band structures for the V_1 atom, respectively; (c), (d) the spin-up and spin-down band structures for the V_2 atom, respectively.

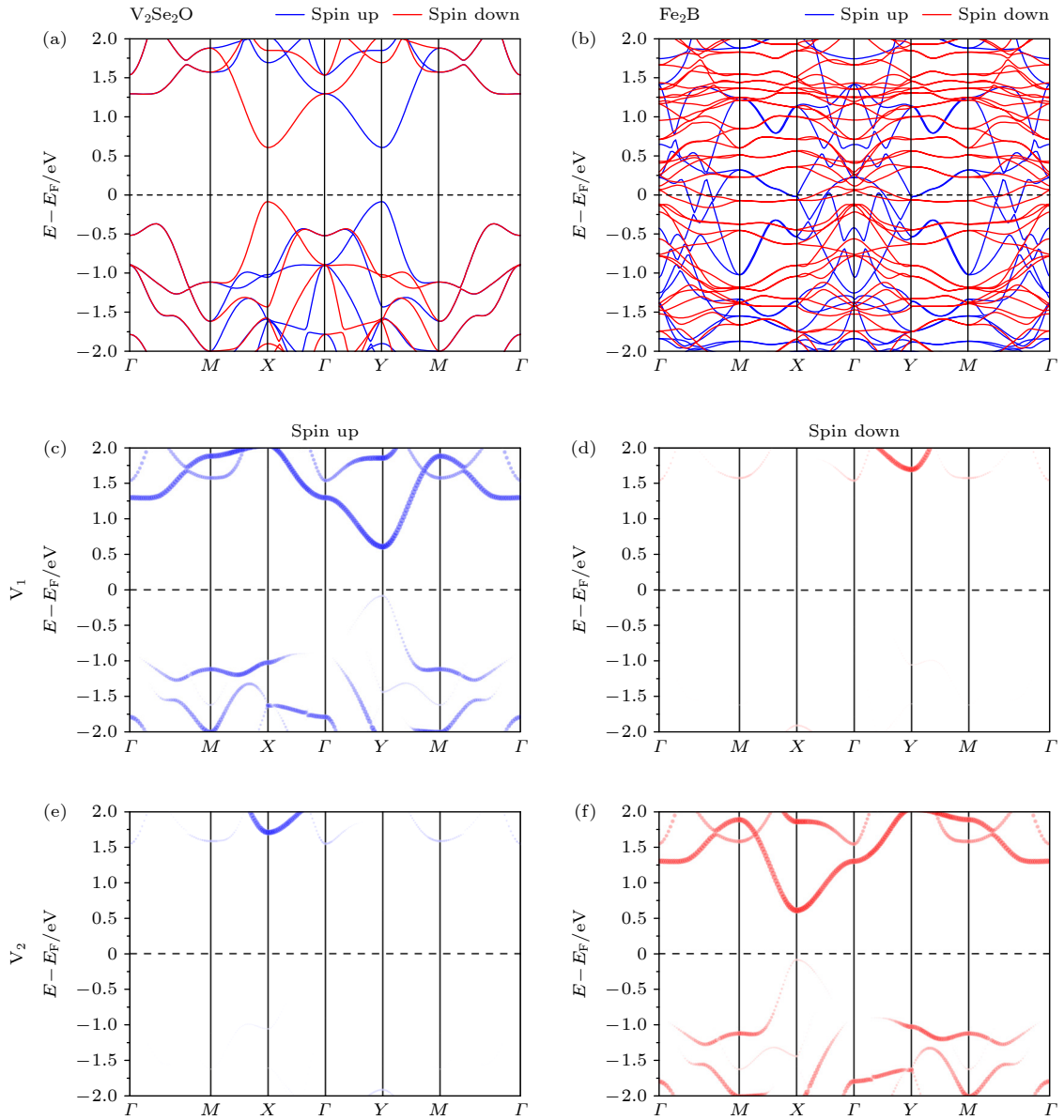


图 B1 自旋极化能带结构 (a) 压缩应变下的 V_2Se_2O ; (b) 拉伸应变下的 Fe_2B ; (c) 和 (d) 分别为 V_1 原子的自旋向上和自旋向下能带; (e) 和 (f) 分别为 V_2 原子的自旋向上和自旋向下能带. V_1 和 V_2 的位置排列方式与图 A1 中相同

Fig. B1. Spin-polarized band structures: (a) compressive strain V_2Se_2O ; (b) tensile strain Fe_2B ; (c), (d) spin-up and spin-down bands projected onto atom V_1 ; (e), (f) spin-up and spin-down bands projected onto atom V_2 . The positions of V_1 and V_2 are as arranged in Fig. A1.

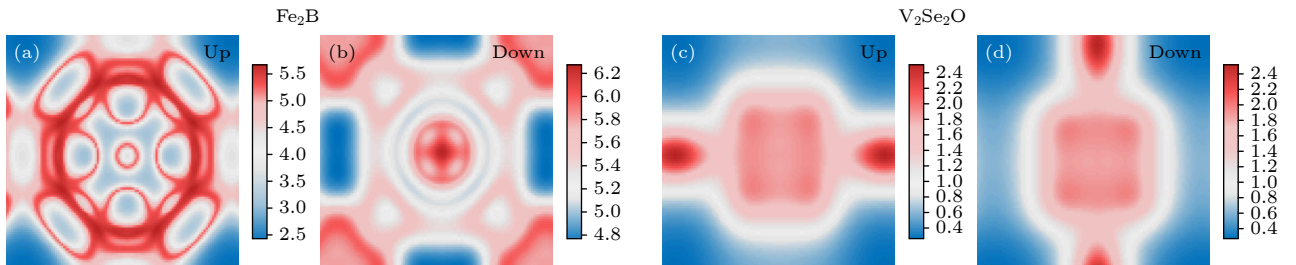


图 B2 在费米能级处, 受拉伸应变的 Fe_2B 与受压缩应变的 V_2Se_2O 中, 自旋向上与自旋向下通道的平行动量 $k_{//}$ 依赖的二维布里渊区态密度分布

Fig. B2. $k_{//}$ -dependent 2D Brillouin zone density of states distribution for spin-up and spin-down channels in tensile strain Fe_2B and compressive strain V_2Se_2O at the Fermi level.

附录 B

考虑到外加应变对 V_2Se_2O 的影响, 本文计算了以 Fe_2B 为衬底时的能带结构 (图 B1), 这种情况下 V_2Se_2O 承受压缩应变. 自洽计算结果表明, V_1 与 V_2 的磁矩分别为 $+1.873\mu_B$ 和 $-1.873\mu_B$, 从而保持零净磁矩. 自旋极化能带以及 V 原子投影的能带显示, 高对称点 X 与 Y 处的能带特征与压缩前基本相同. 这两个点处自旋向上与自旋向下能带的能量差为 $62 \mu eV$, 对于理论计算来说可以忽略不计; 因此, 轻微压缩下的 V_2Se_2O 仍能保持交错磁性.

本文还研究了在 V_2Se_2O 作为衬底时 Fe_2B 在拉伸应变下的行为 (图 B2). 自旋极化能带计算表明, Fe_2B 在费米能级附近仍保持铁磁性. 因此, 在该器件设计中施加小幅度

的拉伸或压缩应变是合理可行的.

附录 C

由于 V_2Se_2O 中 V 原子具有显著的强电子关联效应, 其电子结构对 U 值得设定具有显著的敏感性. 因此, 本文系统计算了不同 U 值 (0, 1, 2, 3, 4 eV) 下的自旋极化能带结构和布里渊区态密度分布, 如图 C1 和图 C2 所示. 能带结果表明, 随着 U 值增加, 单层 V_2Se_2O 会经历从金属到绝缘体的相变过程, 在本研究中选取 $U = 3.8$ eV 是为了符合隧道结对势垒层的要求. 此外, 布里渊区态密度的计算表明, 只有在较强关联强度下 ($U \geq 3.0$ eV), V_2Se_2O 才能展现出稳定且显著的自旋极化能谷特征. 这一结果证明了强电子关联在诱导动量空间自旋劈裂中的重要作用.

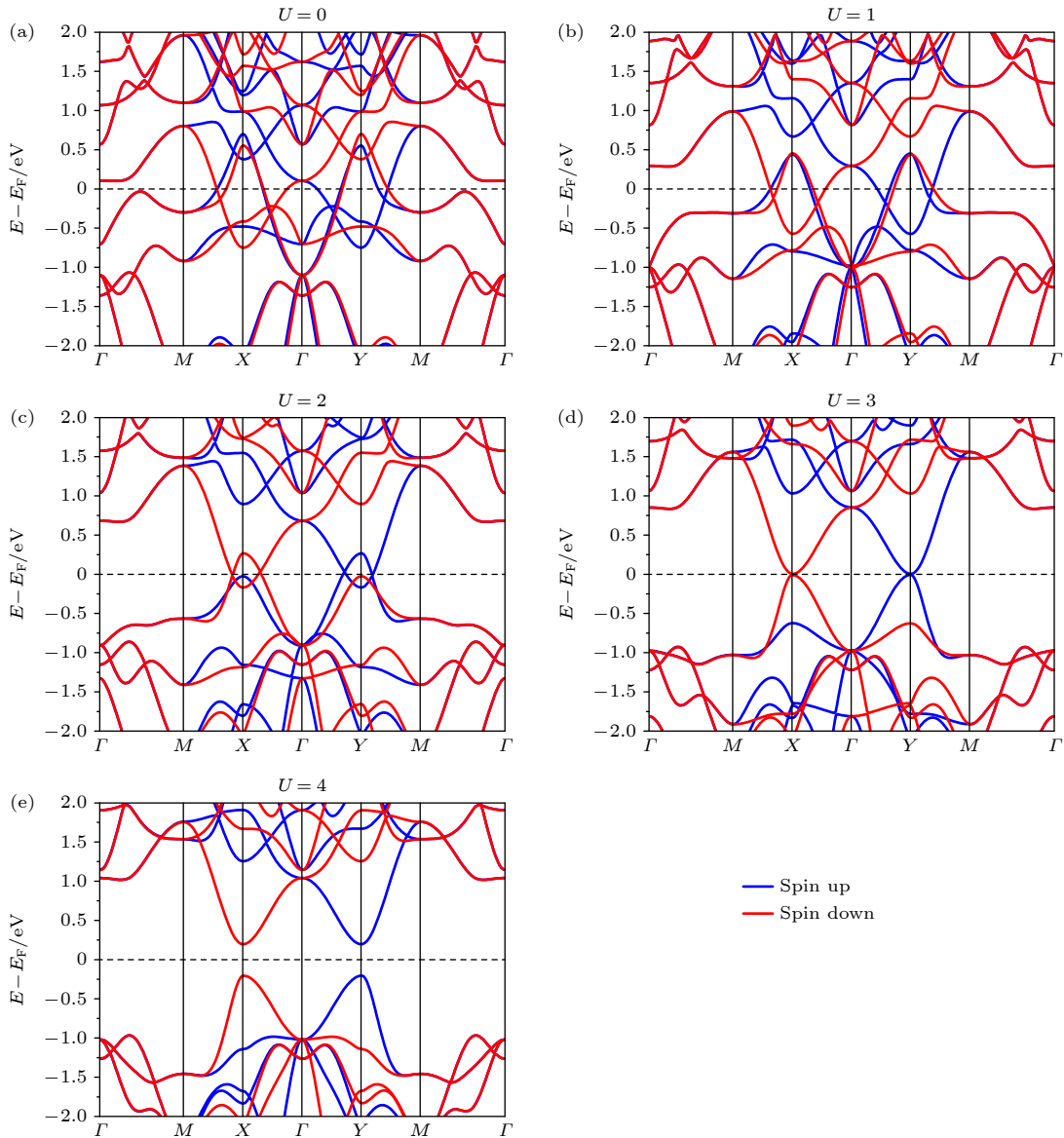


图 C1 不同 U 值情况下的自旋极化能带结构 (a) $U = 0$; (b) $U = 1$ eV; (c) $U = 2$ eV; (d) $U = 3$ eV; (e) $U = 4$ eV

Fig. C1. Spin-polarized band structures under different U values: (a) $U = 0$; (b) $U = 1$ eV; (c) $U = 2$ eV; (d) $U = 3$ eV; (e) $U = 4$ eV.

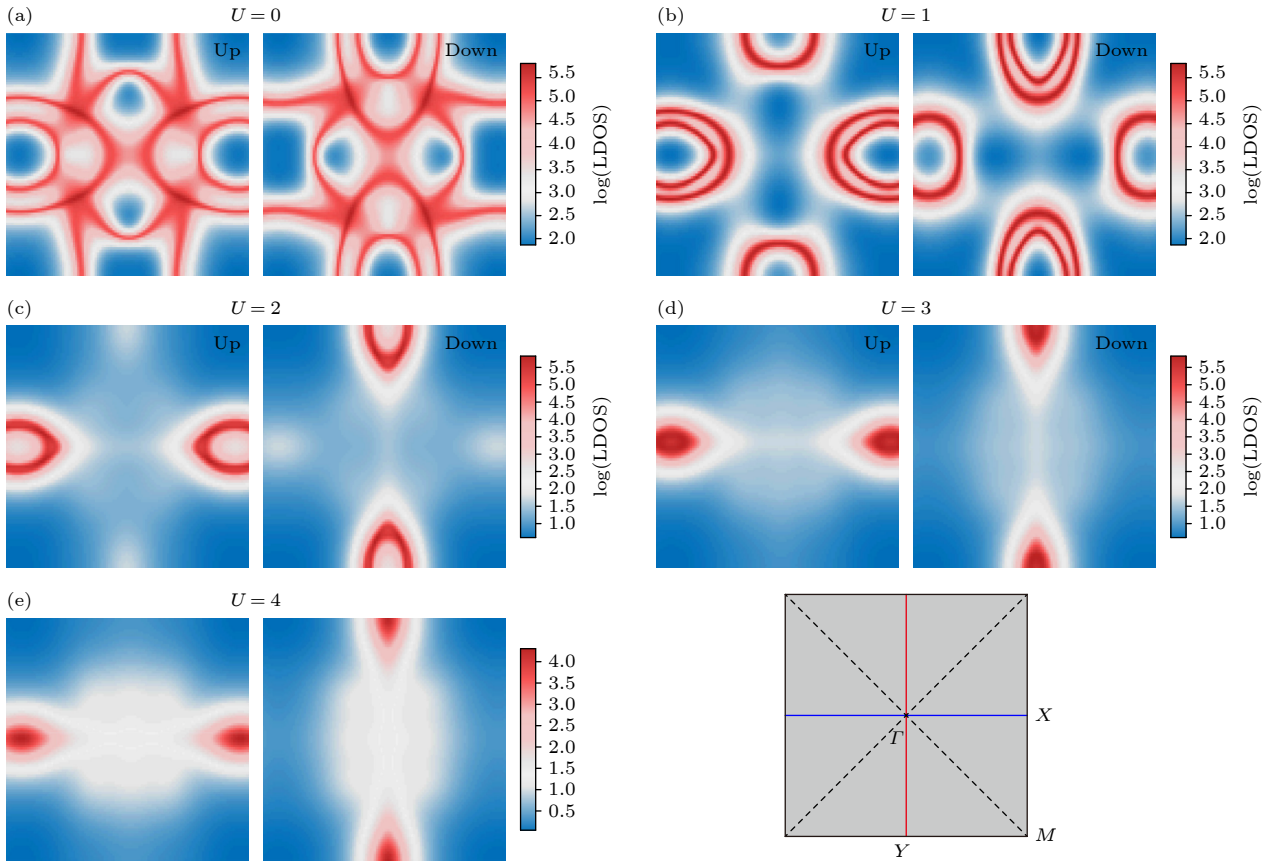


图 C2 不同 U 值情况下的布里源区态密度分布 (a) $U = 0$; (b) $U = 1$ eV; (c) $U = 2$ eV; (d) $U = 3$ eV; (e) $U = 4$ eV. 右下角为二维布里源区示意图

Fig. C2. Brillouin-zone-resolved density of states under different U values: (a) $U = 0$; (b) $U = 1$ eV; (c) $U = 2$ eV; (d) $U = 3$ eV; (e) $U = 4$ eV. Bottom right panel, schematic of the 2D square Brillouin zone.

参考文献

- [1] Ikeda S, Miura K, Yamamoto H, Mizunuma K, Gan H D, Endo M, Kanai S, Hayakawa J, Matsukura F, Ohno H 2010 *Nat. Mater.* **9** 721
- [2] Joshi V K, Barla P, Bhat S, Kaushik B K 2020 *IEEE Access* **8** 194105
- [3] Apalkov D, Dieny B, Slaughter J M 2016 *Proc. IEEE* **104** 1796
- [4] Bhatti S, Sbiaa R, Hirohata A, Ohno H, Fukami S, Piramanayagam S N 2017 *Mater. Today* **20** 530
- [5] Hu J, Chen L, Nan C 2016 *Adv. Mater.* **28** 15
- [6] Li D, Frauenheim T, He J 2021 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **13** 36098
- [7] Yang J, Wu B, Zhou J, Lu J, Yang J, Shen L 2023 *Nanoscale* **15** 16103
- [8] Zhao W, Torres L, Guillemenet Y, Cargnini L V, Lakys Y, Klein J, Ravelosona D, Sassatelli G, Chappert C 2011 *Proceedings of the 21st edition of the Great Lakes Symposium on Great Lakes Symposium on VLSI* New York, NY, USA, 2011-1-1, 2011 pp431
- [9] Chiu Y C, Khwa W S, Yang C S, Teng S H, Huang H Y, Chang F C, Wu Y, Chien Y A, Hsieh F L, Li C Y, Lin G Y, Chen P J, Pan T H, Lo C C, Liu R S, Hsieh C C, Tang K T, Ho M S, Lo C P, Chih Y D, Chang T Y J, Chang M F 2023 *Nat. Electron.* **6** 534
- [10] Soni S, Nehete H, Monga A, Verma G, Shukla A K, Pramanik T 2025 *APL Electronic Devices* **1** 26121
- [11] Julliere M 1975 *Phys. Lett. A* **54** 225
- [12] Moodera J S, Kinder L R, Wong T M, Meservey R 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 3273
- [13] Butler W H, Zhang X G, Schulthess T C, MacLaren J M 2001 *Phys. Rev. B* **63** 54416
- [14] Wu H, Chen A, Zhang P, He H, Nance J, Guo C, Sasaki J, Shirokura T, Hai P N, Fang B, Razavi S A, Wong K, Wen Y, Ma Y, Yu G, Carman G P, Han X, Zhang X, Wang K L 2021 *Nat. Commun.* **12** 6251
- [15] Yu X, Zhang X, Wang J 2023 *ACS Nano* **17** 25348
- [16] Baibich M N, Broto J M, Fert A, Van Dau F N, Petroff F, Etienne P, Creuzet G, Friederich A, Chazelas J 1988 *Phys. Rev. Lett.* **61** 2472
- [17] Mathon J, Umerski A 2001 *Phys. Rev. B* **63** 220403
- [18] Chappert C, Fert A, Van Dau F N 2007 *Nat. Mater.* **6** 813
- [19] Santos T S, Lee J S, Migdal P, Lekshmi I C, Satpati B, Moodera J S 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 16601
- [20] Yang W, Xu Y, Li S, Han J, Lin X, Zhao W 2025 *Sci. Chin. Mater.* **68** 1622
- [21] Scheike T, Wen Z, Sukegawa H, Mitani S 2022 *Appl. Phys. Lett.* **120** 32404
- [22] Sato H, Yamanouchi M, Miura K, Ikeda S, Gan H D, Mizunuma K, Koizumi R, Matsukura F, Ohno H 2011 *Appl. Phys. Lett.* **99** 42501
- [23] Muratov C B, Osipov V V, Vanden-Eijnden E 2015 *J. Appl.*

Phys. **117** 17D118

- [24] Iwata-Harms J M, Jan G, Liu H, Serrano-Guisan S, Zhu J, Thomas L, Tong R, Sundar V, Wang P 2018 *Sci. Rep.* **8** 14409
- [25] Watanabe K, Jinnai B, Fukami S, Sato H, Ohno H 2018 *Nat. Commun.* **9** 663
- [26] Igarashi J, Jinnai B, Watanabe K, Shinoda T, Funatsu T, Sato H, Fukami S, Ohno H 2024 *npj Spintronics* **2** 1
- [27] Perrissin N, Lequeux S, Strelkov N, Chavent A, Vila L, Buda-Prejbeanu L D, Auffret S, Sousa R C, Prejbeanu I L, Dieny B 2018 *Nanoscale* **10** 12187
- [28] Kumar P, Sharma V, Khanna M K, Kuanr B K 2025 *Phys. Lett. A* **553** 130722
- [29] Sato H, Yamanouchi M, Miura K, Ikeda S, Koizumi R, Matsukura F, Ohno H 2012 *IEEE Magn. Lett.* **3** 3000204
- [30] Sato H, Enobio E C I, Yamanouchi M, Ikeda S, Fukami S, Kanai S, Matsukura F, Ohno H 2014 *Appl. Phys. Lett.* **105** 62403
- [31] Jinnai B, Watanabe K, Fukami S, Ohno H 2020 *Appl. Phys. Lett.* **116** 160501
- [32] Chen Y, Samanta K, Shahed N A, Zhang H, Fang C, Ernst A, Tsymbal E Y, Parkin S S P 2024 *Nature* **632** 1045
- [33] Cheng M, Hu Q, Huang Y, Ding C, Qiang X, Hua C, Fang H, Lu J, Peng Y, Yang J, Xi C, Pi L, Watanabe K, Taniguchi T, Lu H, Novoselov K S, Lu Y, Zheng Y 2024 *Nat. Phys.* **20** 1973
- [34] Stamenova M, Mohebbi R, Seyed-Yazdi J, Rungger I, Sanvito S 2017 *Phys. Rev. B* **95** 60403
- [35] Chou C, Ghosh S, McGoldrick B C, Nguyen T, Gurung G, Tsymbal E Y, Li M, Mkhoyan K A, Liu L 2024 *Nat. Commun.* **15** 7840
- [36] Guo Z, Wang X, Wang W, Zhang G, Zhou X, Cheng Z 2025 *Adv. Mater.* n/a 2505779
- [37] Jungwirth T, Sinova J, Manchon A, Martí X, Wunderlich J, Felser C 2018 *Nat. Phys.* **14** 200
- [38] Jungwirth T, Martí X, Wadley P, Wunderlich J 2016 *Nat. Nanotechnol.* **11** 231
- [39] Borders W A, Akima H, Fukami S, Moriya S, Kurihara S, Horio Y, Sato S, Ohno H 2016 *Appl. Phys. Express* **10** 13007
- [40] Wadley P, Novák V, Campion R P, Rinaldi C, Martí X, Reichlová H, Železný J, Gazquez J, Roldan M A, Varela M, Khalyavin D, Langridge S, Kriegner D, Mácá F, Mašek J, Bertacco R, Holý V, Rushforth A W, Edmonds K W, Gallagher B L, Foxon C T, Wunderlich J, Jungwirth T 2013 *Nat. Commun.* **4** 2322
- [41] Kozioł-Rachwał A, Ślęzak M, Zajac M, Drózdź P, Janus W, Szytma M, Nayyef H, Ślęzak T 2020 *APL Mater.* **8** 61107
- [42] He Q L, Kou X, Grutter A J, Yin G, Pan L, Che X, Liu Y, Nie T, Zhang B, Disseler S M, Kirby B J, Ratcliff II W, Shao Q, Murata K, Zhu X, Yu G, Fan Y, Montazeri M, Han X, Borchers J A, Wang K L 2017 *Nat. Mater.* **16** 94
- [43] Reimers S, Odenbreit L, Šmejkal L, Strocov V N, Constantinou P, Hellenes A B, Jaeschke Ubiergo R, Campos W H, Bharadwaj V K, Chakraborty A, Denneulin T, Shi W, Dunin-Borkowski R E, Das S, Kläui M, Sinova J, Jourdan M 2024 *Nat. Commun.* **15** 2116
- [44] Krempaský J, Šmejkal L, D Souza S W, Hajlaoui M, Springholz G, Uhlířová K, Alarab F, Constantinou P C, Strocov V, Usanov D, Pudelko W R, González-Hernández R, Birk Hellenes A, Jansa Z, Reichlová H, Šobáň Z, Gonzalez Betancourt R D, Wadley P, Sinova J, Kriegner D, Minár J, Dil J H, Jungwirth T 2024 *Nature* **626** 517
- [45] Osumi T, Souma S, Aoyama T, Yamauchi K, Honma A, Nakayama K, Takahashi T, Ohgushi K, Sato T 2024 *Phys. Rev. B* **109** 115102
- [46] Yuan L, Wang Z, Luo J, Rashba E I, Zunger A 2020 *Phys. Rev. B* **102** 14422
- [47] Ma H, Hu M, Li N, Liu J, Yao W, Jia J, Liu J 2021 *Nat. Commun.* **12** 2846
- [48] Hafner J, Kresse G 1993 *Phys. Rev. B* **47** 558
- [49] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11169
- [50] Blöchl P E 1994 *Phys. Rev. B* **50** 17953
- [51] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 1396
- [52] Hussain R, Ali Z, Murad M, T Alharbi Y, A. Alderhami S, Almanqur L 2023 *Physica B* **666** 415145
- [53] Guo H, Wang J, Taylor J 2001 *Phys. Rev. B* **63** 245407
- [54] Mozos J, Ordejón P, Taylor J, Stokbro K, Brandbyge M 2002 *Phys. Rev. B* **65** 165401
- [55] Yang W, Xu Y, Li S, Han J, Chen J, Rojas-Sánchez J, Mangin S, Lin X, Zhao W 2025 *ACS Nano* **19** 38573
- [56] Li X, Lü J, Zhang J, You L, Su Y, Tsymbal E Y 2019 *Nano Lett.* **19** 5133
- [57] Sivaprakash P, Ashok Kumar K, Subalakshmi K, Bathula C, Sandhu S, Arumugam S 2020 *Mater. Lett.* **275** 128146
- [58] Singh S, Rout P C, Ghadiyali M, Schwingenschlögl U 2025 *Mater. Sci. Eng., R* **166** 101017
- [59] Wang D, Ma L, Li L, Xu X L, Guo Y B, Zhao S Q 2018 *J. Supercond. Novel Magn.* **31** 431
- [60] Li X, Zhu M, Dong J, Wu K, Zheng F, Zhang J 2025 *Chin. Phys. Lett.* **42** 100701
- [61] H Xiao, M J Mi, Y L Wang 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 127503 (in Chinese) [肖寒, 弭孟娟, 王以林 2021 物理学报 **70** 127503]
- [62] Wang T, Wang W, Xie Y, Warsi M A, Wu J, Chen Y, Lorenz V O, Fan X, Xiao J Q 2017 *Sci. Rep.* **7** 1306

SPECIAL TOPIC—Semiconductor physics and devices

Tunneling magnetoresistance in a simplified bilayer tunnel junction based on altermagnetic spin splitting*

XU Yibo¹⁾²⁾ YE Maoxuan²⁾ CHEN Jiayou²⁾ YANG Wei^{1)2)†}
LIN Xiaoyang^{1)2)‡} ZHAO Weisheng¹⁾²⁾

1) (*State Key Laboratory of Spintronics, Hangzhou International Innovation Institute, Beihang University, Hangzhou 311115, China*)

2) (*Fert Beijing Institute, School of Integrated Circuit Science and Engineering, Beihang University, Beijing 100191, China*)

(Received 2 December 2025; revised manuscript received 20 January 2026)

Abstract

Altermagnetic materials have recently broken through the spin degeneracy limitation of conventional antiferromagnetic tunnel junctions, offering new opportunities for developing novel spintronic devices. However, maintaining high thermal stability and significant tunneling magnetoresistance (TMR) while utilizing altermagnetic semiconductors to simplify device architecture remains a key challenge for achieving high-density storage devices. This work presents a tunnel junction based on a V_2Se_2O/Fe_2B van der Waals heterostructure. By exploiting the spin-splitting effect in the momentum space of altermagnetic materials, this structure overcomes the inability to achieve TMR in conventional antiferromagnetic tunnel junctions due to spin degeneracy. Simultaneously, the exchange bias effect at the ferromagnetic/altermagnetic interface effectively enhances the thermal stability of the ferromagnetic layer, replacing the conventional synthetic antiferromagnetic pinning layer and significantly simplifying the device architecture. First-principles calculations based on density functional theory combined with non-equilibrium Green's function demonstrate that the V_2Se_2O/Fe_2B heterostructure achieves a TMR of 283% at room temperature, with further optimization potential through material doping or electrostatic gating. This study demonstrates the feasibility and application prospect of altermagnetic materials in next-generation spintronic memory devices, while substantially reducing structural complexity and enhancing thermal stability.

Keywords: altermagnetic tunnel junction, altermagnetic semiconductor, tunneling magnetoresistance

DOI: [10.7498/aps.75.20251642](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251642)

CSTR: [32037.14.aps.75.20251642](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20251642)

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. T2394475, 62371019, 52261145694, 12504127) and the Hangzhou International Innovation Institute, Beihang University, China (Grant Nos. 2024KQ052, 2025BKZ001).

† Corresponding author. E-mail: spin_yang_1995@buaa.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: XYLin@buaa.edu.cn

基于交错磁自旋劈裂的简化双层隧道结隧穿磁阻

徐一博 叶茂轩 陈佳优 杨维 林晓阳 赵巍胜

Tunneling magnetoresistance in a simplified bilayer tunnel junction based on altermagnetic spin splitting

XU Yibo YE Maoxuan CHEN Jiayou YANG Wei LIN Xiaoyang ZHAO Weisheng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 080707 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251642

CSTR: 32037.14.aps.75.20251642

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251642>

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

基于MgO磁性隧道结的五种隧穿磁电阻线性传感单元性能比较

Comparison of performance among five types of tunneling magnetoresistance linear sensing units based on MgO magnetic tunnel junction

物理学报. 2022, 71(23): 238502 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221278>

自旋-轨道力矩驱动的交错磁体磁动力学

Magnetization dynamics of altermagnet driven by spin-orbit torque

物理学报. 2026, 75(6): 238502 <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251628>

CrCl₃隧穿磁阻的界面效应与多场效应调控

Tuning magnetoresistance of chromium chloride tunnel junction through the interface and multi-field effect

物理学报. 2024, 73(13): 137302 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240431>

隧穿磁阻传感器研究进展

Research progress of tunneling magnetoresistance sensor

物理学报. 2022, 71(5): 058504 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211883>

交错磁研究进展: 材料物性与交叉应用

Recent advances in altermagnetism research: Material properties and cross applications

物理学报. 2026, 75(6): 058504 <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251637>

碳基分子磁隧道结的设计和自旋输运性质研究

Design and spin-dependent transport properties of carbon-based molecular magnetic tunnel junctions

物理学报. 2025, 74(21): 217201 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250880>