

# 铁磁电极单层二硫化钼纳米带量子结构中的自旋开关效应和巨磁阻\*

张明媚<sup>1)</sup> 郭亚涛<sup>1)</sup> 付旭日<sup>1)</sup> 李梦蕾<sup>1)</sup> 任宝藏<sup>1)</sup> 郑军<sup>2)</sup> 袁瑞琦<sup>1)†</sup>

1) (首都师范大学物理系, 北京 100048)

2) (渤海大学物理科学与技术学院, 锦州 121013)

(2023年3月29日收到; 2023年5月4日收到修改稿)

采用三带紧束缚模型和非平衡格林函数的方法理论研究了铁磁电极单层之字形二硫化钼纳米带量子结构中的自旋电子输运性质. 结果发现, 由于铁磁电极的磁交换作用与散射区域电场共同影响, 可获得能量依赖的100%自旋极化, 得到纯的自旋流. 这表明在该结构通过调控入射能可以实现自旋电子开关效应. 此外, 还发现当电导完全自旋极化时, 磁交换场强度可以对巨磁阻效应进行有效的调控. 该工作可为基于单层二硫化钼纳米带设计巨磁阻器件以及自旋过滤器提供理论参考.

**关键词:** 单层之字形二硫化钼纳米带, 磁交换场, 电场, 自旋输运, 巨磁阻效应

**PACS:** 72.25.-b, 73.43.Qt, 73.63.-b

**DOI:** 10.7498/aps.72.20230483

## 1 引言

近些年来, 大家越来越关注单层过渡金属硫化物量子结构中的量子输运. 单层过渡金属硫化物典型代表——单层二硫化钼 ( $\text{MoS}_2$ ), 具有本征的直接带隙<sup>[1]</sup>和强自旋-轨道耦合<sup>[2-4]</sup>, 是用作场效应晶体管沟道材料的优越候选者. 利用  $\text{MoS}_2$  的光学带隙, 已经在实验上实现了单层  $\text{MoS}_2$  的二维纳米电子器件, 如场效应晶体管<sup>[5]</sup>和超灵敏光电探测器<sup>[6]</sup>. 单层二硫化钼的结构与石墨烯类似, 呈六元环, 由单元层 S-Mo-S 的结构单元所组成. 与石墨烯的平面结构和弱自旋-轨道耦合作用不同, 由于单层二硫化钼中 Mo 原子之间键长较大导致部分  $\text{sp}^3$  杂化, 从而使其形成轻微曲的蜂窝结构<sup>[7]</sup>. 在单层二硫化钼中电荷载流子的传输是通过 Mo 原子进行

的, 由于 Mo 原子相对原子质量大、单层二硫化钼的微曲结构以及该材料缺乏反转对称性, 导致价带中发生强自旋-轨道耦合<sup>[4,8]</sup>, 使得单层二硫化钼成为自旋电子学的良好候选材料.

1988年巨磁阻效应被发现后, 自旋电子学得到了快速的发展<sup>[9]</sup>. 众多学者对其展开研究, 表明巨磁阻效应仅在纳米级材料中<sup>[10]</sup>, 且通常在由铁磁层和非铁磁层组成的交替层中可以观察到, 例如多层 Fe/Cr/Fe 结构中<sup>[9,11,12]</sup>. 这一发现极大程度上推动了数据存储技术的发展. 巨磁阻效应主要被用来存储硬盘的数据、制作磁传感器等磁感应电子设备. 近期, Zhang 等<sup>[13]</sup>基于二维半金属  $\text{Mn}_2\text{O}_2$  材料理论上设计出了性能优越的巨磁阻器件, 且所开发的器件是目前报道的磁阻比最高的自旋电子器件.

可见, 纳米技术的发展对磁阻效应的发展是至关重要的. 目前人们已成功制备出类石墨烯材料

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11804236, 11604226, 12174038)、北京市教育委员会科技发展计划 (批准号: KM201910028017, CIT-TC201904080) 和辽宁省“兴辽英才”青年拔尖人才项目 (批准号: XLYC2007141) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: yuanry@cnu.edu.cn

的准一维纳米带结构. 沿不同的晶相切割单层  $\text{MoS}_2$  可以获得具有两种不同形式的几何边缘, 分别为单层之字形二硫化钼 ( $\text{Z-MoS}_2$ ) 纳米带和单层扶手椅形二硫化钼纳米带. 第一原理计算表明, 单层  $\text{Z-MoS}_2$  纳米带具有铁磁性的特征, 磁性主要来源于边缘位置的不饱和原子, 其还具有金属性的特性, 可以作为金属导体; 而单层扶手椅形  $\text{MoS}_2$  纳米带具有半导体和非磁性的特征<sup>[14,15]</sup>.

为了更好地应用于纳米电子器件, 有必要研究之字形和扶手椅形单层二硫化钼纳米带中电子传输特性. 因之字形边缘单层二硫化钼纳米带晶体管的准一维金属特性, 使其已被用作场效应晶体管的沟道材料<sup>[5,16]</sup>, 并在构造晶体管方面具有显著的优势. 如较高的电子迁移率、高电流开关比和高密度封装等<sup>[17–21]</sup>. 目前, 关于二维材料纳米带中的自旋电子运输问题的研究得到了广泛的关注. Rachel 和 Ezawa<sup>[22]</sup> 研究了将  $x$  (Si, Ge, Sn) 烯的边缘态置于不同的外场下的情况, 结果表明边缘态受外场的影响, 且通过对边缘态的处理, 可得到完美的巨磁阻和自旋滤波效应. Li 等<sup>[23]</sup> 研究了二硫化钼结构中的自旋运输, 结果表明其可以通过栅极电压进行调控, 而且由于价带边缘的自旋谷耦合以及磁交换场的存在, 可以实现完美的谷和自旋极化导电. Zheng 等<sup>[24]</sup> 基于三带紧束缚模型和非平衡格林函数的方法研究了在  $x$  (Si, Ge, Sn) 烯纳米带中间区域施加周期性的非共振左/右圆偏振光的电子传输特性, 他们的结果表明通过仅调整圆偏振光的光强和偏振, 晶体管可在导通和非导通中切换, 同时系统可实现 100% 自旋极化的导通态. Lu 等<sup>[25]</sup> 研究发现, 通过在之字形  $x$  (Si, Ge) 烯纳米带上下边界施加反对称势场和对称磁交换场实现有效的自旋谷开关. You 等<sup>[26]</sup> 搭建了三端场效应管结构, 通过利用六带紧束缚模型研究了之字形边缘二硫化钼纳米带的电子能带结构和量子运输, 该研究结果为基于植入二硫化钼纳米带构建自旋器件提供了理论支撑. 此外, Li 和 Zhang<sup>[27]</sup> 研究了随机缺陷对之字形和扶手椅形硅烯纳米带中量子运输. 结果表明缺陷影响了纳米带中的电子运输能力. 对于之字形纳米带, 缺陷可导致系统的电导为 0; 而对于扶手椅形纳米带, 缺陷不能导致系统的电导为 0, 且不需要考虑其谷自由度. 以上研究为基于  $x$  烯及单层二硫化钼器件的自旋运输的研究提供了思路和方法.

本文通过在单层  $\text{Z-MoS}_2$  纳米带左右半无限长区域沉积铁磁条, 构建铁磁电极单层二硫化钼纳米带量子结构, 基于三带紧束缚跃迁模型研究了电场调控下单层  $\text{Z-MoS}_2$  纳米带中自旋电子输运性质. 结果表明, 自旋电导对磁交换场和电场有很好的依赖性, 通过调整磁交换场和电场的强度, 在低能区可以得到显著的自旋过滤效应; 此外, 研究还发现巨磁阻效应, 磁阻率最高可达 350%. 这些结果表明, 单层  $\text{Z-MoS}_2$  纳米带可用于设计出性能优越的巨磁电阻器件和自旋过滤器.

## 2 理论模型与方法

垂直电场调控下, 铁磁电极单层二硫化钼纳米带量子结构如图 1 所示. 之字形单层二硫化钼 ( $\text{Z-MoS}_2$ ) 纳米带左、右两边区域分别为源极和漏极, 在源极和漏极沉积铁磁条; 中间区域为正常单层二硫化钼, 在中间区域施加电场形成静电势垒, 调控量子结构的能带<sup>[28]</sup>.

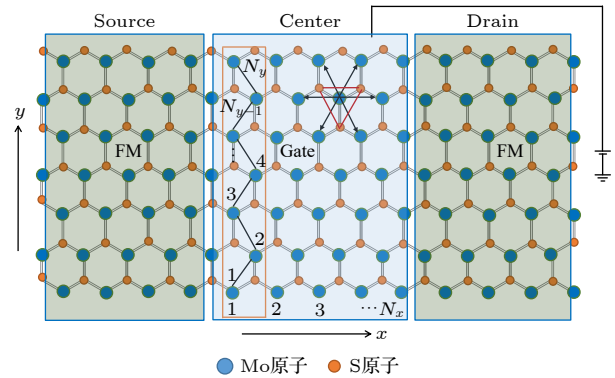


图 1 铁磁电极单层二硫化钼纳米带量子结构模型示意图. 桔色矩形区域表示元胞; 中间区域长度, 即元胞个数为  $N_x$ ; 纳米带宽度, 即 Mo 原子层数为  $N_y$

Fig. 1. Quantum structure model of monolayer  $\text{MoS}_2$  nanoribbons with ferromagnetic (FM) electrodes. The cell is represented by the orange rectangle. The length of the middle region, i.e., the number of cells is  $N_x$ ; nanoribbon width, i.e., Mo atomic layer number is  $N_y$ .

三带紧束缚模型下, 系统布洛赫态主要由 Mo 原子 3 个  $d(d_{z^2}, d_{xy}, d_{x^2-y^2})$  轨道组成, 这 3 个  $d$  轨道是导带和价带的主要成分<sup>[8]</sup>. 通过对比发现, 三带紧束缚近似所得边缘 Mo 原子的  $d_{z^2}$ ,  $d_{xy}$  和  $d_{x^2-y^2}$  轨道的边缘态与第一性原理符合得非常好<sup>[8]</sup>. 所以, 三带紧束缚模型虽然比较简单, 但也能够比较准确地描述二硫化钼的能带结构. 因此, 采用三带紧束缚模型结合非平衡格林函数方法计算能带

和电导时,只取了 Mo 原子 d 轨道的 3 个轨道,每个轨道对应一个相应的波矢  $\phi$ , 每个波矢对应一个能级,考虑两个 Mo 原子时,就是有 6 个波矢  $\phi$  之间进行线性叠加,组成轨道. 考虑自旋-轨道耦合和 Mo 原子间最近邻跃迁,根据三带紧束缚模型<sup>[8]</sup>,系统的哈密顿量可以表示为

$$H = \sum_{S,D} H_{S,(D)} + H_C, \quad (1)$$

其中  $H_{S,(D)}$  是单层 Z-MoS<sub>2</sub> 纳米带量子结构源极和漏极的哈密顿量,  $H_C$  是中间区域的哈密顿量.

由于,源极和漏极是铁磁电极,所以  $H_{S,(D)}$  可以写为

$$\begin{aligned} H_{S,(D)}(k_x) = & \sum_{k_x, n=1,2,\dots, N_y} c_{\alpha,\sigma}^+(k_x, n) \begin{pmatrix} h_0 + h_1 & 0 \\ 0 & h_0 + h_1 \end{pmatrix} c_{\beta,\sigma}(k_x, n) \\ & + \sum_{k_x, n=2,3,\dots, N_y} c_{\alpha,\sigma}^+(k_x, n-1) \begin{pmatrix} h_2 & 0 \\ 0 & h_2 \end{pmatrix} c_{\beta,\sigma}(k_x, n) \\ & + \sum_{k_x, n=1,2,\dots, N_y-1} c_{\alpha,\sigma}^+(k_x, n+1) \begin{pmatrix} h_2^+ & 0 \\ 0 & h_2^+ \end{pmatrix} c_{\beta,\sigma}(k_x, n), \end{aligned} \quad (2)$$

而对于纳米带量子结构的中间区域而言,哈密顿量可以表示为

$$\begin{aligned} H_C(k_x) = & \sum_{k_x, n=1,2,\dots, N_y} c_{\alpha,\sigma}^+(k_x, n) \begin{pmatrix} h_1 + h_3 & 0 \\ 0 & h_1 + h_3 \end{pmatrix} c_{\beta,\sigma}(k_x, n) \\ & + \sum_{k_x, n=2,3,\dots, N_y} c_{\alpha,\sigma}^+(k_x, n-1) \begin{pmatrix} h_2 & 0 \\ 0 & h_2 \end{pmatrix} c_{\beta,\sigma}(k_x, n) \\ & + \sum_{k_x, n=1,2,\dots, N_y-1} c_{\alpha,\sigma}^+(k_x, n+1) \begin{pmatrix} h_2^+ & 0 \\ 0 & h_2^+ \end{pmatrix} c_{\beta,\sigma}(k_x, n), \end{aligned} \quad (3)$$

方程 (2) 和 (3) 中,第 1 项表示元胞中第  $n$  层 Mo 原子间的最近邻相互作用,包括在位能;第 2 项为元胞中第  $n$  层与  $n-1$  层 Mo 原子间的最近邻相互作用;第 3 项为元胞中第  $n$  层与  $n+1$  层 Mo 原子间的最近邻相互作用.  $k_x$  为  $x$  方向的动量.  $c_{\alpha,\sigma}^+(c_{\beta,\sigma})$  为考虑自旋 ( $\sigma = \uparrow, \downarrow$ ) 时  $\alpha(\beta)$  点的产生(湮灭)算符.

$$h_0 = \begin{pmatrix} \sigma M & 0 & 0 \\ 0 & \sigma M & 0 \\ 0 & 0 & \sigma M \end{pmatrix}, \quad (4)$$

$$h_1 = \begin{pmatrix} 2t_0 \cos k_x + \varepsilon_1 & 2it_1 \sin k_x & 2t_2 \cos k_x \\ -2it_1 \sin k_x & 2t_{11} \cos k_x + \varepsilon_2 & 2it_{12} \sin k_x + i\lambda_{so} \\ 2t_2 \cos k_x & -2it_{12} \sin k_x - i\lambda_{so} & 2t_{22} \cos k_x + \varepsilon_2 \end{pmatrix}, \quad (5)$$

$$h_2 = \begin{pmatrix} 2t_0 \cos \frac{1}{2}k_x & i(t_1 + \sqrt{3}t_2) \sin \frac{1}{2}k_x & (\sqrt{3}t_1 - t_2) \cos \frac{1}{2}k_x \\ i(-t_1 + \sqrt{3}t_2) \sin \frac{1}{2}k_x & \frac{1}{2}(t_{11} + 3t_{22}) \cos \frac{1}{2}k_x & \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}it_{22} + \frac{\sqrt{3}}{2}it_{11} - 2it_{12}\right) \sin \frac{1}{2}k_x \\ (-\sqrt{3}t_1 - t_2) \cos \frac{1}{2}k_x & \left(\frac{\sqrt{3}}{2}it_{11} - \frac{\sqrt{3}}{2}it_{22} + 2it_{12}\right) \sin \frac{1}{2}k_x & \frac{1}{2}(3t_{11} + t_{22}) \cos \frac{1}{2}k_x \end{pmatrix}, \quad (6)$$

表 1 参数  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, t_0, t_1, t_2, t_{11}, t_{12}, t_{22}, \lambda_{so}$  取值 (单位: eV)<sup>[8]</sup>  
 Table 1. Values of parameter  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, t_0, t_1, t_2, t_{11}, t_{12}, t_{22}, \lambda_{so}$  (unit: eV)<sup>[8]</sup>.

$\varepsilon_1$	$\varepsilon_2$	$t_0$	$t_1$	$t_2$	$t_{11}$	$t_{12}$	$t_{22}$	$\lambda_{so}$
1.046	2.104	-0.184	0.401	0.507	0.218	0.338	0.057	0.073

$$h_3 = \begin{pmatrix} U & 0 & 0 \\ 0 & U & 0 \\ 0 & 0 & U \end{pmatrix}, \quad (7)$$

式中,  $M$  为铁磁电极激发的磁交换场强度;  $U$  为中间区域电势能;  $\varepsilon_j$  是 Mo 原子  $d_{z^2}, d_{xy}$  和  $d_{x^2-y^2}$  轨道基矢对应的本征能量, 而且每对基矢之间相互正交, 所以不存在基矢之间的重叠矩阵;  $t_1, t_2, t_{11}, t_{12}, t_{22}$  分别是 Mo 原子  $d_{z^2}, d_{xy}$  和  $d_{x^2-y^2}$  轨道间跃迁能. 由于研究系统对称性的限制, 参数  $\varepsilon_1, \varepsilon_2, t_0, t_1, t_2, t_{11}, t_{12}, t_{22}$  彼此之间是相互独立的, 相应的取值如表 1 所列.

基于非平衡格林函数方法, 系统的自旋电导写为

$$G_\sigma = \frac{2e^2}{h} \text{tr}(\Gamma_{S\sigma} G_{C,\sigma}^r \Gamma_{D\sigma} G_{C,\sigma}^a), \quad (8)$$

式中,  $h$  是普朗克常数;  $e$  是电子电荷;  $\Gamma_{S(D),\sigma} = i[\Sigma_{S(D),\sigma}^r - \Sigma_{S(D),\sigma}^a]$  表示线宽函数, 其中  $\Sigma_{S(D),\sigma}^r$  和  $\Sigma_{S(D),\sigma}^a$  是厄米共轭的自能项;  $G_{C,\sigma}^{r(a)}$  为中间区域哈密顿量的推迟 (超前) 格林函数,  $G_{C,\sigma}^r = [E_m \mathbf{I} - H_C - \Sigma_{S,\sigma}^r - \Sigma_{D,\sigma}^r]^{-1}$ , 其中  $E_m$  是电子的入射能,  $\mathbf{I}$  为单位矩阵.

### 3 结果和讨论

对于单层 Z-MoS<sub>2</sub> 纳米带量子结构而言, 本文从两个方面对纳米带中电子输运性质进行了理论计算研究. 首先, 在单层纳米带的两端沉积铁磁条, 通过铁磁条的磁化来改变磁邻近效应, 进而来调节单层 Z-MoS<sub>2</sub> 纳米带中电子自旋输运受磁交换场的影响; 其次, 在单层纳米带的中间区域施加强度为  $U$  的势场, 从而调节材料的带隙, 实现器件中自旋开关效应.

图 2(a)—(d) 为左右铁磁电极磁化强度相同, 即磁交换场强度为  $M_1 = M_2 = M = 0.01$  eV ( $B \approx 16$  T)<sup>[29,30]</sup> 时, 自旋电导随能量变化的曲线图. 当中间区域不施加电场, 入射能为  $-0.5$  eV 左右时, 自旋向上电子相比于自旋向下电子在磁交换场的作用下更加活跃. 自旋向上电子在磁交换场的作用

下受到激发, 更多的电子参与到导电中, 所以如图 2(a) 所示, 自旋向上电导峰值更高. 而在费米面附近的电子电导变化趋势相同, 这是由于 Z-MoS<sub>2</sub> 的自旋-轨道耦合  $\lambda = 0.073$  eV 大于磁交换场强度  $M = 0.01$  eV, 自旋劈裂的影响较小导致. 此外, 如图 2(b)—(d) 所示, 随着进一步增大电场强度, 电导振荡峰逐渐被抑制, 从最初的  $12e^2/h$  下降到  $6e^2/h$ . 在这个过程中, 自旋向上和自旋向下的 0 电导平台向高能级移动, 单层 Z-MoS<sub>2</sub> 纳米带的带隙逐渐被打开, 带隙宽度拓宽到原来的 1 倍.

接着, 将磁交换场强度增加到  $M = 0.1$  eV, 可以从图 2(e)—(h) 看到, 在费米面附近, 因为磁交换场强度 ( $M = 0.1$  eV) 大于自旋-轨道耦合 ( $\lambda = 0.073$  eV), 能级发生劈裂, 所以自旋向上和自旋向下的电子劈裂到两个方向. 随着中心区域电场强度的增大, 自旋向上电导为 0 的平台向右移动且逐渐先变窄后变宽, 而自旋向下电导为 0 的平台向左移动且逐渐拓宽. 在费米面附近, 自旋向下电导逐渐被抑制到 0, 而自旋向上电子则逐渐被激发出来参与到导电中, 所以在入射能为  $-0.2—0$  eV 区间中, 自旋向下电导出现 0 平台, 自旋向上电导都大于 0; 这样就可以在一定的能量区间内进行自旋的过滤, 得到纯的自旋流, 而且能够通过入射能来控制器件的自旋电子开关效应.

为了更好地揭示单层 Z-MoS<sub>2</sub> 纳米带中自旋电子输运的性质, 图 2(g) 插图为其对应的自旋向上电子的能带图. 能带图揭示了在费米面附近价带电子能带分布密集, 对应于电导图中, 在这个区域内的电导出现剧烈振荡现象, 因为能带越多对应的电子能参与输运的通道越多; 在费米面之上, 价带顶和导带底之间没有电子轨道, 电子无法通过, 所以在电导图 2(g) 中对应于电导为 0 的带隙区域; 在导带中导电通道较少, 所以对应于电导图中的台阶变化比较平缓, 台阶较少.

从前面的研究结果可知, 带隙受到施加在中间区域电场的影响. 图 2(h) 插图展示了上自旋电导关于两个变量——入射能和电势能  $U$  变化的等高图. 从图 2(h) 插图可以看到, 带隙随电场的变

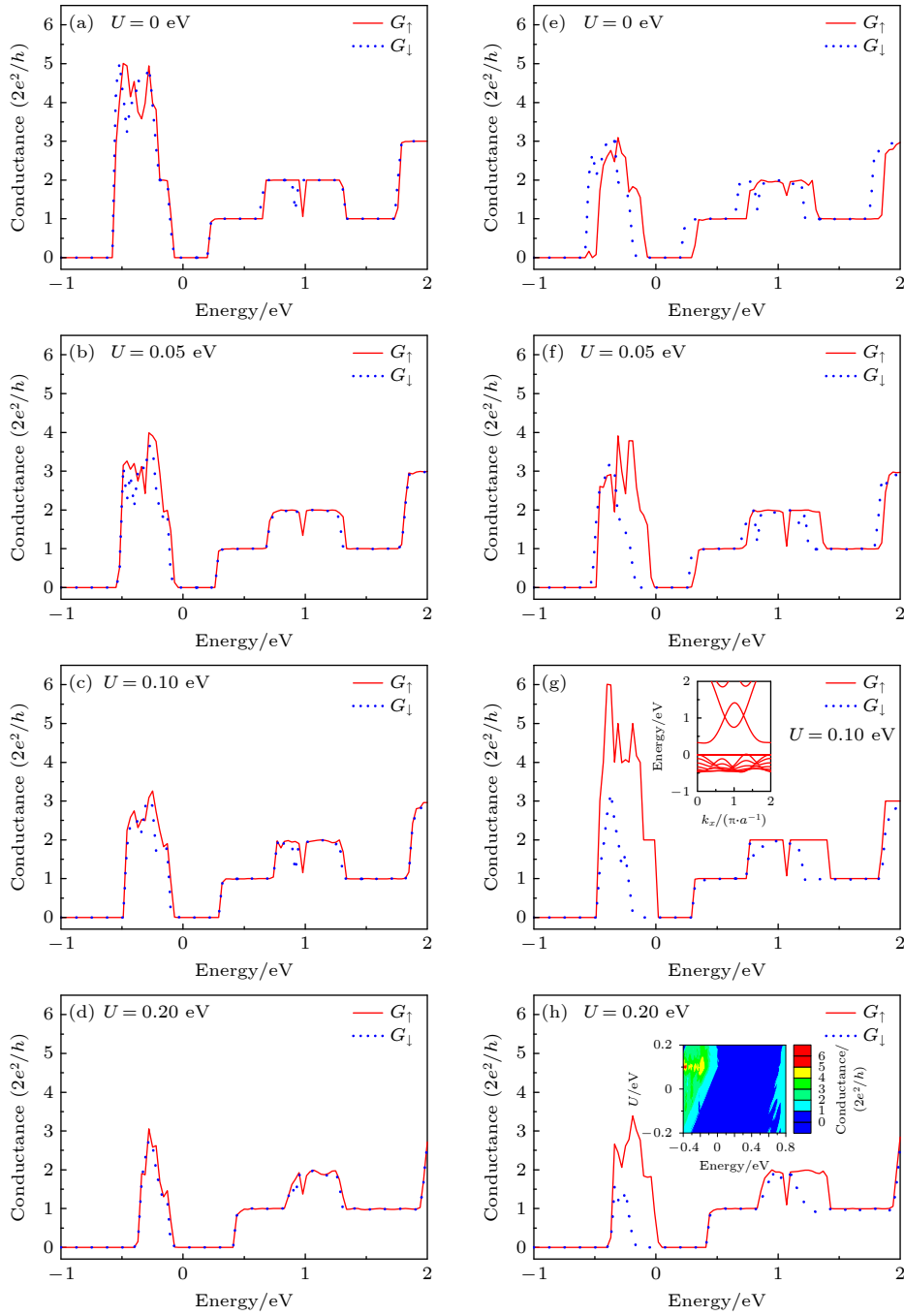


图2 磁交换场强度 ( $M$ ) 不变, 中间区域施加不同强度电场 ( $U$ ) 时, 自旋电导随入射能量变化的曲线图 (a)—(d)  $M = 0.01$  eV; (e)—(h)  $M = 0.1$  eV, (h) 中插图为上自旋电导随不同入射能、中间区域电势能变化的等高线图, (g) 中插图为上自旋电子的能带图. 其他参数为中间区域长度  $N_x = 14$ , 纳米带宽度  $N_y = 8$

Fig. 2. Spin conductance as a function of incident energy with several electric fields applied in the middle region for the magnetic exchange field of (a)–(d)  $M = 0.01$  eV and (e)–(h)  $M = 0.1$  eV. The insert in (h) shows the contour diagram of spin-up conductance with different incident energies and potential energies in the middle region. The insert in (g) shows the energy-band diagram of spin-up electrons. The other parameters are  $N_x = 14$ ,  $N_y = 8$ .

化, 更加直观地揭示了电场对带隙的影响.

前面讨论了磁交换场强度一定的情况下, 随着中间区域电场强度的增大, 电子参与导电的情况. 通过改变源极和漏极铁磁电极磁化强度的大小来研究随着磁交换场强度的变化, 电子参与导电的变

化. 从图 2(h) 发现, 当电势能  $U = 0.20$  eV 时, 自旋过滤效果最显著, 所以在中间区域施加的电势能为 0.20 eV. 从图 3 可知, 随着磁交换场强度的增大, 在入射能小于 0, 大于  $-0.3$  eV 的区域自旋向上电子逐渐被激发, 自旋向上电导在  $6e^2/h$ — $12e^2/h$

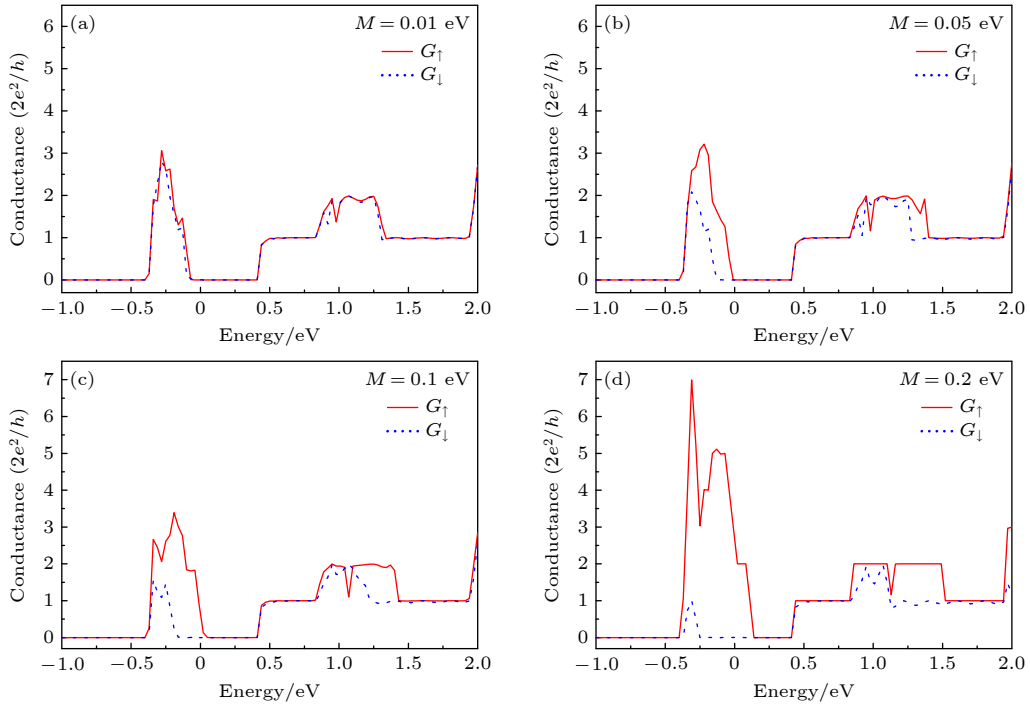


图 3 中间区域电势能  $U = 0.2$  eV, 源漏电极磁化强度变化时, 自旋电导随入射能变化的曲线图, 中间区域长度  $N_x = 14$ , 纳米带宽度  $N_y = 8$

Fig. 3. Spin conductance as a function of the incident energy with different magnetic exchange fields. The other parameters are  $U = 0.2$  eV,  $N_x = 14$  and  $N_y = 8$ .

之间振荡, 出现振荡峰, 该系统在费米能级附近出现不断展宽的 100% 的自旋过滤区间. 因为单层纳米带中的电子受洛伦兹力、电场力以及与自旋-轨道耦合的共同影响, 在外场强度大于 2 倍的自旋-轨道耦合时, 能级发生劈裂, 出现自旋过滤效应, 因此可以通过对电场和磁交换场的协同调控来实现完美的自旋电子开关效应.

接下来研究源极和漏极磁交换场平行和反平行情况下系统电导. 从图 4(a)—(d) 可以看出, 平行组态下的电导总是比反平行组态下大. 在入射能为  $-0.6 \sim 0.6$  eV 的范围内, 平行组态下的电导在  $8e^2/h \sim 20e^2/h$  之间展现出量子化振荡现象. 相比而言, 反平行组态下的电导值略小, 在  $7e^2/h \sim 16e^2/h$  之间展现出量子化振荡现象. 此外, 随着磁交换场强度  $M$  的增大 (图 4(a)—(c)), 不管是平行组态下还是反平行组态下, 在低能区都出现电导的振荡峰, 电导都有一个明显的增大. 而且随着磁交换场强度的增大, 反平行组态下的电导 0 平台向低能区移动且不断拓宽, 平行组态下的电导 0 平台向高能区移动且不断变窄. 这是由于在费米面附近随着磁交换场强度的增大, 平行组态的电子参与了导

电, 而反平行组态的电子受到抑制. 更进一步, 由于平行组态和反平行组态电导之间存在差异导致了巨磁阻效应, 如图 4(e) 所示. 随着磁交换场强度的增大, 磁阻率在一定的范围内逐渐增大, 在费米能级附近达到峰值, 是因为在该点电导完全自旋极化导致的, 随后磁阻率单调下降至 0. 当入射能为  $-0.125$  eV 时, 根据磁阻率定义  $MR = (G_P - G_{AP})/G_{AP}$  画出磁阻率随磁交换场变化的趋势图, 其中,  $G_P$  和  $G_{AP}$  分别是指平行和反平行组态下的电导. 从图 4(f) 可观察到, 当  $M = 0.01$  eV 时 (小于  $\lambda = 0.073$  eV), 磁阻率仅为 0.018%, 是由于此时平行组态下的电子自旋极化不明显, 而反平行组态下的电子自旋简并, 导致总自旋电导相差甚小, 进而导致磁阻率减小. 图 4(e)—(f) 的结果表明磁化强度越大, 磁阻率越高. 在费米面附近磁交换场强度增大到  $M = 0.1$  eV 时 (大于  $\lambda = 0.073$  eV), 磁阻率增至约 54.651%, 此时平行组态下的电子逐渐被激发出来参与导电中, 电导 0 平台向高能区移动且不断变窄, 而反平行组态下的电子受到明显的抑制作用, 电导 0 平台向低能区移动且不断拓宽, 具有明显的巨磁阻效应. 如果继续增大磁交换场的强度,

磁阻率的峰值会进一步增大。

最后, 进一步研究电场强度对巨磁阻效应的影响. 此时, 磁交换场的强度设置为  $M = 0.1$  eV, 随着电场强度  $U$  的增大, 发现磁阻率峰值不再呈现单调增大的趋势, 而呈现微振荡现象, 如图 5(a) 所示. 在入射能  $E_{in} = -0.125$  eV 时, 图 5(b) 为磁阻率随电场变化的趋势图, 可以看出磁阻率呈现先升

后降的趋势. 若进一步增大  $U$ , 磁阻率则继续下降直到 0. 这是由于电场强度的增大, 电导的振荡峰逐渐被抑制, 平行与反平行组态下的电导差值逐渐减小. 因此可以通过调控磁交换场强度和电场强度在一定的能量区间内观察到巨磁阻效应, 得到大的磁阻比, 这一研究有助于推动基于单层 Z-MoS<sub>2</sub> 纳米带制作巨磁电阻器件的发展.

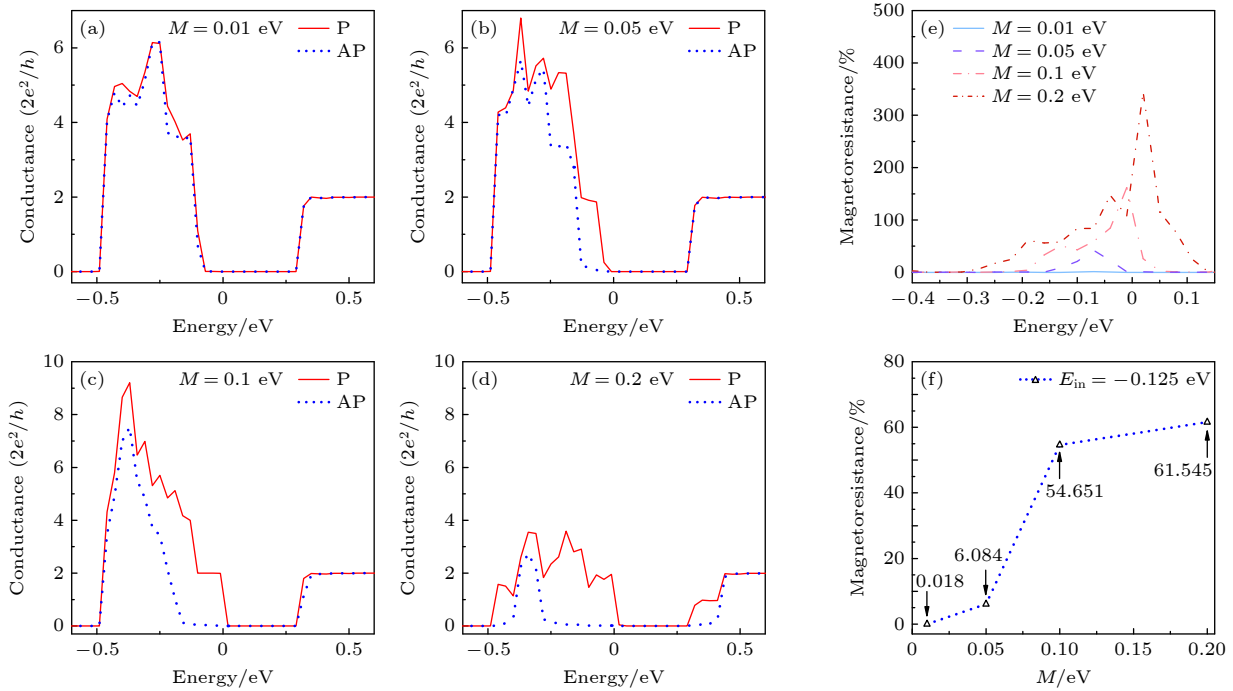


图 4 (a)–(d) 不同磁化强度下, 磁化方向平行和反平行时电导随入射能的变化曲线图; (e) 磁阻率随入射能变化的曲线图; (f) 磁阻率随磁交换场强度变化的趋势图, 入射能  $E_{in} = -0.125$  eV. 其他参数为中间区域长度  $N_x = 14$ , 纳米带宽度  $N_y = 8$ , 中间区域电势能  $U = 0.1$  eV

Fig. 4. (a)–(d) Spin conductance as a function of the incident energy when the magnetization directions are parallel and anti-parallel with different magnetization intensities; (e) the magnetoresistance as a function of the incident energy; (f) the magnetoresistance as a function of the magnetic exchange field intensity, where the incident energy is  $E_{in} = -0.125$  eV. The other parameters are  $N_x = 14$ ,  $N_y = 8$ , and  $U = 0.1$  eV.

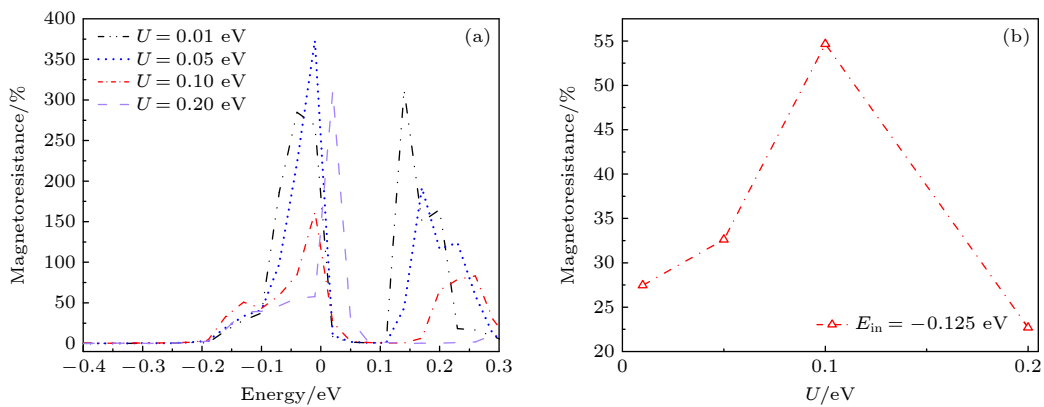


图 5 (a) 磁阻率随入射能变化的曲线图; (b) 磁阻率随电场强度变化的趋势图, 入射能  $E_{in} = -0.125$  eV. 其他参数为中间区域长度  $N_x = 14$ , 纳米带宽度  $N_y = 8$ , 磁交换场强度  $M = 0.1$  eV

Fig. 5. (a) Magnetoresistance as a function of the incident energy; (b) the magnetoresistance as a function of the electric field intensity, where the incident energy is  $E_{in} = -0.125$  eV. The other parameters are  $N_x = 14$ ,  $N_y = 8$ , and  $M = 0.1$  eV.

## 4 结 论

基于三带紧束缚模型,研究了电场调控下铁磁电极单层 Z-MoS<sub>2</sub> 纳米带中自旋输运性质. 结果表明,磁场平行时,自旋输运依赖磁场的变化效果明显. 由于电子受洛伦兹力、电场力以及强自旋-轨道耦合作用的共同影响,能级发生劈裂,自旋向下的电导向低能级移动,而自旋向上的电导不受影响,所以在费米能级附近出现 100% 的自旋过滤现象. 当在中间区域额外施加电场时,其强度的变化对单层 Z-MoS<sub>2</sub> 纳米带的带隙影响很大,并且自旋电导过滤的效果更加显著. 此外,研究发现磁化强度和电场强度均对于单层 Z-MoS<sub>2</sub> 纳米带量子结构中巨磁阻效应有影响,磁化强度越大,电导对其依赖性越好,巨磁阻效应的现象越明显. 以上结果表明该结构有助于巨磁阻器件以及自旋过滤器的发展.

## 参考文献

- [1] Mak K F, Lee C, Hone J, Heinz T F 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 136805
- [2] Lu H Z, Yao W, Xiao D, Shen S Q 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 016806
- [3] Xiao D, Liu G B, Feng W X, Xu X D, Yao W 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 196802
- [4] Zhu Z Y, Cheng Y C, Schwingenschlögl U 2011 *Phys. Rev. B* **84** 153402
- [5] Radisavljević B, Radenović A, Brivio J, Giacometti V, Kis A 2011 *Nat. Nanotechnol.* **6** 147
- [6] Lopez-Sanchez O, Lembke D, Kayci M, Radenović A, Kis A 2013 *Nat. Nanotechnol.* **8** 497
- [7] Rahimi F, Phirouznia A 2022 *Sci. Rep.* **12** 7800
- [8] Liu G B, Shan W Y, Yao Y, Yao W, Xiao D 2013 *Phys. Rev. B* **88** 085433
- [9] Baibich M N, Broto J M, Fert A, Nguyen V D F, Petroff F, Etienne P, Creuzet G, Friederich A, Chazelas J 1988 *Phys. Rev. Lett.* **61** 2472
- [10] Thompson S M 2008 *Appl. Phys.* **41** 093001
- [11] Prinz G A 1998 *Science* **282** 1660
- [12] Binasch G, Grünberg P, Saurenbach F, Zinn W 1989 *Phys. Rev. B* **39** 4828
- [13] Zhang X L, Gong P W, Liu F Q, Yao K L, Wu J, Zhu S C 2022 *Front. Phys.* **17** 53510
- [14] Pan H, Zhang Y W 2012 *J. Mater. Chem.* **22** 7280
- [15] Botello-Méndez A R, López-Urfas F, Terrones M, Terrones H 2009 *Nanotechnology* **20** 325703
- [16] Tong X, Ashalley E, Lin F, Li H, Wang Z M 2015 *Nano-Micro. Lett.* **7** 203
- [17] Backman J, Lee Y, Luisier M 2022 *Solid State Electron.* **35** 8092
- [18] Song J F, Qi Y B, Xiao Z Y, Wang K, Li D W, Kim S H, Kingon A I, Rappe A M, Hong X 2019 *NPJ 2D Mater. Appl.* **6** 77
- [19] Lembke D, Kis A 2013 *ACS Nano* **7** 3730
- [20] Zhang L Y, Fang L, Peng X Y 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 127101 (in Chinese) [张理勇, 方粮, 彭向阳 2016 物理学报 **65** 127101]
- [21] Dong H M 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 206101 (in Chinese) [董海明 2013 物理学报 **62** 206101]
- [22] Rachel S, Ezawa M 2014 *Phys. Rev. B* **89** 195303
- [23] Li H, Shao J M, Yao D X, Yang G W 2014 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **6** 1759
- [24] Zheng J, Xiang Y, Li C L, Yuan R Y, Chi F, Guo Y 2020 *Phys. Rev. Applied* **14** 034027
- [25] Lu W T, Sun Q F, Li Y F, Tian H Y 2021 *Phys. Rev. B* **104** 195419
- [26] You S, Park D, Kim H, Kim N 2022 *Curr. Appl. Phys.* **37** 52
- [27] Li F, Zhang Q T 2022 *Micro. Nanostruct.* **163** 107129
- [28] Li Y, Jiang W Q, Ding G Y, Peng Y Z, Wen Z C, Wang G Q, Bai R, Qian Z H, Xiao X B, Zhou G H 2019 *J. Appl. Phys.* **125** 244304
- [29] Srivastava A, Sidler M, Allain A V, Lembke D S, Kis A, Imamoglu A 2015 *Nature Nanotech.* **10** 491
- [30] Srivastava A, Sidler M, Allain A V, Lembke D S, Kis A, Imamoglu A 2015 *Nature Phys.* **11** 141

# Spin-switching effect and giant magnetoresistance in quantum structure of monolayer MoS<sub>2</sub> nanoribbons with ferromagnetic electrode\*

Zhang Ming-Mei<sup>1)</sup> Guo Ya-Tao<sup>1)</sup> Fu Xu-Ri<sup>1)</sup> Li Meng-Lei<sup>1)</sup>  
Ren Bao-Cang<sup>1)</sup> Zheng Jun<sup>2)</sup> Yuan Rui-Yang<sup>1)†</sup>

1) (*Department of Physics, Capital Normal University, Beijing 100048, China*)

2) (*College of Physics Science and Technology, Bohai University, Jinzhou 121013, China*)

( Received 29 March 2023; revised manuscript received 4 May 2023 )

## Abstract

Spintronics is a new type of electronics based on electron spin rather than charge as the information carrier, which can be stored and calculated by regulating and manipulating the spin. The discovery and application of the giant magnetoresistance effect opens the door to the application of electron spin properties. Realizing on-demand control of spin degree of freedom for spin-based devices is essential. The two-dimensional novel material, monolayer transition metal dichalcogenide (TMD) (MoS<sub>2</sub> is a typical example from the family of TMD materials), has become an excellent platform for studying spintronics due to its novel physical properties, such as direct band gap and strong spin-orbit coupling. Obtaining high spin polarization and achieving controllability of degrees of freedom are fundamental problems in spintronics. In this paper, we construct the monolayer zigzag MoS<sub>2</sub> nanoribbon quantum structure of electrically controlled ferromagnetic electrode to solve this problem. Based on the non-equilibrium Green's function method, the regulation of the magnetic exchange field and electrostatic barrier on the spin transport in parallel configuration and anti-parallel configuration are studied. It is found that in the parallel structure, spin transport is obviously related to the magnetic exchange field, and 100% spin filtering can occur near the Fermi energy level to obtain pure spin current. When an additional electric field is applied to the middle region, the spin filtering effect is more significant. Therefore, the spin switching effect can be achieved by regulating the incident energy. In addition, it is also found that within a specific energy range, electrons in the parallel configuration are excited to participate in transport, while electrons in the anti-parallel structure are significantly inhibited. Consequently, a noticeable giant magnetoresistance effect can be obtained in this quantum structure. Moreover, it can be seen that the magnetic exchange field strength can effectively modulate the giant magnetoresistance effect. These results provide valuable theoretical references for the development of giant magnetoresistance devices and spin filters based on monolayer zigzag MoS<sub>2</sub> nanoribbons.

**Keywords:** monolayer zigzag MoS<sub>2</sub> nanoribbon, magnetic exchange field, electric field, spin transport, giant magnetoresistance effect

**PACS:** 72.25.-b, 73.43.Qt, 73.63.-b

**DOI:** 10.7498/aps.72.20230483

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11804236, 11604226, 12174038), the General Program of Science and Technology Development Project of Beijing Municipal Education Commission of China (Grant Nos. KM201910028017, CIT-TCD201904080), and the Revitalization Talents Program of Liaoning Province, China (Grant No. XLYC2007141).

† Corresponding author. E-mail: [yuanry@cnu.edu.cn](mailto:yuanry@cnu.edu.cn)



## 铁磁电极单层二硫化钼纳米带量子结构中的自旋开关效应和巨磁阻

张明媚 郭亚涛 付旭日 李梦蕾 任宝藏 郑军 袁瑞琦

### Spin-switching effect and giant magnetoresistance in quantum structure of monolayer MoS<sub>2</sub> nanoribbons with ferromagnetic electrode

Zhang Ming-Mei Guo Ya-Tao Fu Xu-Ri Li Meng-Lei Ren Bao-Cang Zheng Jun Yuan Rui-Yang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 157202 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20230483

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230483>

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

非共振圆偏振光作用下单层二硫化钼电子结构及其自旋/谷输运性质

Electronic structure and spin/valley transport properties of monolayer MoS<sub>2</sub> under the irradiation of the off-resonant circularly polarized light

物理学报. 2018, 67(10): 107101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180213>

不同方向局域交换场对锡烯自旋运输的影响

Effects of local exchange field in different directions on spin transport of stanene

物理学报. 2022, 71(14): 147201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220277>

局域交换场和电场调控的锗烯纳米带自旋过滤效应

Spin filter effect of germanene nanoribbon controlled by local exchange field and electric field

物理学报. 2019, 68(18): 187302 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190817>

拉伸应变对单层二硫化钼光电特性的影响

Effects of photoelectric properties of monolayer MoS<sub>2</sub> under tensile strain

物理学报. 2021, 70(21): 217101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210816>

高质量单层二硫化钼薄膜的研究进展

Research progress of high-quality monolayer MoS<sub>2</sub> films

物理学报. 2018, 67(12): 128103 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180732>

单层二硫化钼的制备及在器件应用方面的研究

Controllable growth of monolayer MoS<sub>2</sub> films and their applications in devices

物理学报. 2022, 71(10): 108102 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212447>