

# 基于滑移铁电 $VTe_2$ 多铁隧道结的输运性质

朱小龙<sup>†</sup> 刘雨林

(华东交通大学理学院, 南昌 330013)

(2025年6月6日收到; 2025年8月21日收到修改稿)

利用基于密度泛函理论的第一性原理计算方法, 研究了以双层  $VTe_2$  为滑移铁电势垒层,  $Fe_3GaTe_2/Fe_3GeTe_2$  为左右磁性电极的范德瓦耳斯多铁隧道结的自旋相关输运特性. 研究发现, 通过控制  $Fe_3GaTe_2$ /双层  $VTe_2/Fe_3GeTe_2$  范德瓦耳斯型多铁隧道结中铁电势垒的极化方向和铁磁电极的磁化方向, 可以实现多个非易失性电阻态. 具体而言, 当双层铁电材料  $VTe_2$  发生相对滑移时, 铁电势垒的极化从左取向 ( $P_-$ ) 转变为右取向 ( $P_+$ ), 费米能级处的隧穿磁电阻 (TMR) 比从 727000% 增加到 1010000%. 当铁磁电极的磁化方向从平行排列 ( $M_{\uparrow\uparrow}$ ) 变为反平行排列 ( $M_{\uparrow\downarrow}$ ) 时, 隧穿电阻比几乎成倍增加. 此外, 在构建的四种多铁隧道结非易失性电阻态下都观察到了接近 100% 的自旋过滤效率. 本文研究结果表明, 构建的  $Fe_3GaTe_2$ /双层  $VTe_2/Fe_3GeTe_2$  多铁隧道结在多状态非易失性存储器和自旋过滤器方面具有潜在的应用前景, 为多功能电子器件的开发提供了一个有前景的平台.

**关键词:** 多铁性隧道结, 量子输运, 自旋过滤, 非易失性电阻**PACS:** 75.85.+t, 73.23.-b, 72.25.-b, 85.30.Mn**DOI:** 10.7498/aps.74.20250734**CSTR:** 32037.14.aps.74.20250734

## 1 引言

自二十世纪中叶以来, 电子器件在信息技术革命的推动下飞速发展. 人们对更高的存储密度、更快的读写速度以及更低功耗的小型化多功能电子器件的需求愈发强烈. 传统以硅为基础的金属氧化物半导体器件已经难以满足人们对高性能多功能电子器件的要求. 因此必须探索以更低能耗、更高速度为特点的新型信息存储技术来替代目前的硅基半导体存储技术<sup>[1-4]</sup>. 幸运的是自旋电子学器件可以通过材料的自旋特性来实现电子数据的储存、传送与处理, 有很大希望可以突破传统器件的量子壁垒, 成为信息存储技术的一个主要发展方向. 基于此, 人们对与自旋电子学相关的多铁隧道结进行了广泛研究, 旨在降低器件功耗, 突破物理尺寸限

制, 为开发高性能、低功率的电子器件铺平道路<sup>[5-10]</sup>. 多铁隧道结 (MFTJs) 由铁电材料和铁磁材料耦合而成, 使得隧穿电阻 (TER) 和隧穿磁阻 (TMR) 效应能够共存, 可以实现多种非易失性状态. 具体来说, 通过控制器件中心区铁电势垒的极化方向和电极区铁磁电极的磁化排列, 可以在 MFTJs 中实现多个非易失性电阻状态<sup>[11-14]</sup>. 因此, MFTJs 中的多个非易失性电阻状态为实现高密度数据存储, 提高数据传输速率和降低功耗提供了有效途径<sup>[15,16]</sup>. 这些特性使 MFTJs 在自旋电子学应用中受到广泛关注, 特别是在纳米级非易失性存储器件领域.

然而, 到目前为止, 大部分传统的 MFTJs 都是基于钙钛矿氧化物材料作为铁电势垒层<sup>[17]</sup>, 在制造过程中受到自然缺陷、界面接触电阻和悬空键的影响. 由此制造的传统隧道结器件通常受到量子尺寸效应的约束, 并且通常表现出大的电阻-面积

<sup>†</sup> 通信作者. E-mail: zxlongwy@126.com

乘积 ( $RA$ ), 限制了它们满足小型化多功能电子器件中更高存储密度、更快读/写速度和更低功耗需求的能力, 在实际设备应用中很受限制<sup>[18-20]</sup>. 幸运的是, 二维范德瓦耳斯 (vdW) 材料具有厚度灵活可调、样品表面不存在悬挂键、拥有准二维平面结构的特点, 完美解决了传统隧道结器件通常受到的量子尺寸效应, 为研究 MFTJs 开辟了新途径<sup>[21]</sup>. 与此同时, 二维范德瓦耳斯铁电材料 (如  $\text{In}_2\text{Se}_3$ <sup>[22]</sup>,  $\text{CuInP}_2\text{S}_6$ <sup>[23]</sup>,  $\text{VSi}_2\text{N}_4$ <sup>[24]</sup>) 以及二维铁磁材料 (如  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$ <sup>[25,26]</sup>,  $\text{CrTe}_2$ <sup>[27]</sup>,  $\text{CrI}_3$ <sup>[28]</sup>) 的发现极大地丰富了 MFTJs 的研究前景. vdW-MFTJs 的概念由 Su 等<sup>[29]</sup> 基于  $\text{Fe}_n\text{GeTe}_2/\text{In}_2\text{Se}_3$  ( $n=3, 4, 5$ ) 异质结构正式引入. 后来, Yan 等<sup>[30]</sup> 提出基于  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2/\text{In}_2\text{Se}_3/\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$  异质结构的具有 6 个非易失性电阻状态的 vdW-MFTJs. 随后, 对 Ni/双层  $\text{In}_2\text{Se}_3/\text{BN}/\text{Ni}$  的 MFTJs 进行了探索<sup>[31]</sup>. 然而, 上述 MFTJs 中铁电材料自发极化的反转依赖于外部电场, 这导致多余的能量消耗. 近年来, 滑移铁电模型被提出: 二维范德瓦耳斯双层和多层中存在一种垂直极化, 可以通过层间相对滑移来切换垂直极化的方向<sup>[32-34]</sup>. 这是因为通过铁电层的相对滑移, 体系的对称性被打破, 导致层间的电荷重新分布, 在垂直方向产生铁电极化. 这种独特的铁电特性已在二维材料中得到实验验证, 例如过渡金属二硫属化物<sup>[35]</sup> 和氮化硼 (BN)<sup>[36]</sup>. 然而, 研究表明, 在使用 h-BN 作为铁电势垒的 MFTJs 中, 获得的最大 TMR 比率值仅为 33600%. 为了实现更高效的自旋电子器件, 有必要探索能够提供更大的 TMR、完美自旋过滤的新型范德瓦耳斯多铁隧道结器件.

本文选择双层  $\text{VTe}_2$  作为铁电材料, 因为双层  $\text{VTe}_2$  通过滑移便具有显著的面外垂直极化而且铁电反转势垒特别低, 这些特性使得  $\text{VTe}_2$  特别适合作为多铁隧道结中的铁电材料<sup>[37,38]</sup>. 已有研究表明, 铁电势垒两侧电极的不对称性有助于实现更高的 TER 比值<sup>[39,40]</sup>. 此外, 在非对称电极中,  $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2$  和  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$  的电极组合整体性能更为优异<sup>[41]</sup>. 因此, 对于铁磁材料的选取, 本文选择具有 220 K 居里温度、高磁各向异性的铁磁金属  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$ <sup>[42]</sup>, 及与  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$  具有相似层状结构和磁性的  $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2$ , 作为两侧的铁磁材料. 最后将铁电材料与铁磁材料结合起来, 构建多铁隧道结, 旨在实现高性能的范德瓦耳斯多铁隧道结器件. 研究表明, 通过改变铁磁电极的磁化方向从平行排列 ( $M_{\uparrow\uparrow}$ ) 到反平

行排列 ( $M_{\uparrow\downarrow}$ ), 可以获得显著的 TMR 比. 通过改变双层  $\text{VTe}_2$  堆叠方式使得极化方向在  $P_{\uparrow}$  和  $P_{\downarrow}$  之间切换, 可以观察到较高的 TER 比. 除此之外, 基于  $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2/\text{In}_2\text{Se}_3/\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$  构建的 MFTJs 不仅表现出多个非挥发性电阻态, 而且始终表现出完美的自旋过滤效应. 本文的工作在探索下一代多功能自旋电子器件方面具有重要的潜在用途.

## 2 计算方法与细节

本文采用基于密度泛函理论的第一性原理计算方法, 所有计算均在 QuantumATK 软件包中实现<sup>[43]</sup>. 在这些计算中, 电子与电子间相互作用的交换关联函数采用广义梯度近似 (generalized gradient approximation, GGA) 中的 PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) 泛函进行处理<sup>[44,45]</sup>. 平面波基组被设置为具有 500 eV 的动能截止, 并且范德瓦耳斯相互作用使用 DFT-D3 方法<sup>[46]</sup>. 对于所有基于  $\text{VTe}_2$  的异质结构系统的布里渊区采样, 使用  $9 \times 9 \times 1$  Monkhorst-Pack  $k$  点网格<sup>[47]</sup>. 在几何优化过程中, 电子能量和力的收敛标准分别设置为  $10^{-5}$  eV 和  $0.01$  eV/Å. 在电子输运计算中, 本文使用 GGA 中的 PBE 泛函来描述交换相关效应, 并且将定义哈密顿矩阵的平面波基组的动能截止设置为 80 hartree (1 hartree =  $110.5 \times 10^{-21}$  J), 以确保足够的能量范围来捕获系统的电子性质. 在自洽场计算中, 哈密顿矩阵的收敛判据设为  $10^{-5}$  eV. 为了模拟室温条件, 费米-狄拉克分布温度设为 300 K. 考虑到计算效率, 器件计算中原子力的收敛标准为  $0.0005$  eV, 在保持精度的同时减少了计算工作量. 这种全面的方法确保了可靠和精确的结果, 为研究提供了坚实的理论基础. 自旋注入效率 ( $\eta$ ) 定义为

$$\eta = \left| \frac{T_{\uparrow} - T_{\downarrow}}{T_{\uparrow} + T_{\downarrow}} \right|, \quad (1)$$

其中  $T_{\uparrow}$  和  $T_{\downarrow}$  分别表示自旋向上和自旋向下的透射系数. 在平衡状态下, TMR 比可以根据下式计算<sup>[48]</sup>:

$$\text{TMR} = \frac{G_{\text{P}} - G_{\text{AP}}}{G_{\text{AP}}} = \frac{T_{\text{P}} - T_{\text{AP}}}{T_{\text{AP}}}, \quad (2)$$

其中  $T_{\text{P}}$  和  $T_{\text{AP}}$  分别是平行 (P) 和反平行 (AP) 磁状态下费米能级处通过的总透射系数. 同样, TER 比率定义为<sup>[49]</sup>

$$\text{TER} = \frac{|G_{P_{\leftarrow}} - G_{P_{\rightarrow}}|}{\min(G_{P_{\leftarrow}}, G_{P_{\rightarrow}})} = \frac{|T_{P_{\leftarrow}} - T_{P_{\rightarrow}}|}{\min(T_{P_{\leftarrow}}, T_{P_{\rightarrow}})}, \quad (3)$$

其中  $T_{P_{\leftarrow}}$  和  $T_{P_{\rightarrow}}$  分别是左极化 ( $P_{\leftarrow}$ ) 和右极化 ( $P_{\rightarrow}$ ) 状态的透射系数, 相应地,  $G_{P_{\leftarrow}}$  和  $G_{P_{\rightarrow}}$  分别对应左极化 ( $P_{\leftarrow}$ ) 和右极化 ( $P_{\rightarrow}$ ) 状态电导.

### 3 结果与讨论

#### 3.1 滑移铁电材料双层 $\text{VTe}_2$ 及 MFTJs 的构建

作为一种新型二维材料,  $\text{VTe}_2$  近年来在铁谷、铁磁、铁弹、多铁耦合等方面的研究中取得了一系列进展. 此外, 根据以往的研究, 双层 (2H)- $\text{VTe}_2$  是一种滑移铁电材料, 其面外极化仅需要通过层间相对滑移就可以克服层间弱的范德瓦耳斯力实现极化反转. 而且有研究表明, 2H- $\text{VTe}_2$  极化的翻转势垒只有 5.97 meV<sup>[50]</sup>, 这意味着极化的反转很容易实现. 鉴于此, 2H- $\text{VTe}_2$  有望作为多铁性材料中铁电阻挡层的理想候选者. 然而, 以 2H- $\text{VTe}_2$  为铁电材料, 利用其滑移铁电特性构建 MFTJs 结构尚未进行研究. 通过 2H- $\text{VTe}_2$  的相对滑移, 其上下表面将存在大的电偶极矩以及面外垂直铁电极化强度. 这是因为, 层间的相对滑移破坏了 2H- $\text{VTe}_2$  的空间反转对称性, 改变了上下表面的电荷密度分布, 使得空间上的电荷密度不再对称, 从而获得了大的面外铁电极化强度. 这些特性为  $\text{VTe}_2$  在构建多铁隧道结和非易失性存储等纳米器件中提供了广阔的应用前景. 为此, 本文首先研究了 2H- $\text{VTe}_2$  的面外铁电行为及其表现出的  $P_{\uparrow}$  和  $P_{\downarrow}$  态. 2H- $\text{VTe}_2$  的结构示意图如图 1 所示, 通过层间相对滑移, 使层间结构不再对称, 从而引起自发的垂直铁电极化, 形成两种不同的极化态. 具体而言, 如图 1(a) 所示, 通过层间滑移, 当上层的碲 (Te) 原子直接排列在下层的钒 (V) 原子正上方, 而下层中的碲原子却没有位于上层钒原子的正下方. 这将产生不对称的层间结构从而引起沿坐标轴  $+z$  方向的自发垂直铁电极化, 此时  $P_{\uparrow}$  极化向上; 如图 1(b) 所示, 当上层的钒原子正好在下层的碲原子正上方, 而下层的钒原子却没有位于上层碲原子的正下方, 这种不对称的层间结构又将导致沿坐标轴  $-z$  方向的自发垂直铁电极化, 此时  $P_{\downarrow}$  极化向下. 因此双层  $\text{VTe}_2$  可以通过层间相对滑移产生极化 (这一点将在图 2 中的电荷密度差和平面平均电

荷密度中进一步验证), 而且极化方向可以轻易在  $P_{\uparrow}$  与  $P_{\downarrow}$  之间进行切换.

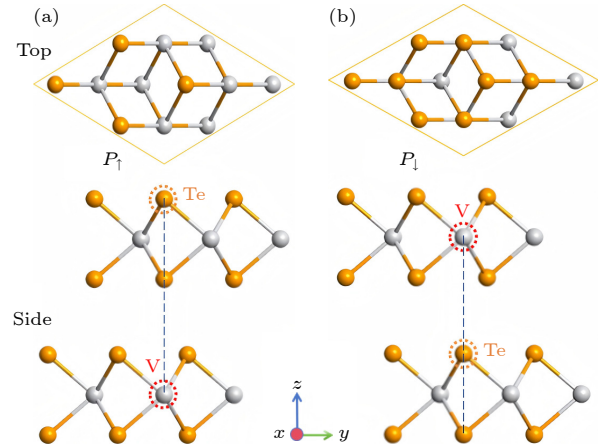


图 1 双层  $\text{VTe}_2$  两种不同构型顶视图和侧视图 (a)  $P_{\uparrow}$ ; (b)  $P_{\downarrow}$ .  $P_{\uparrow}$  和  $P_{\downarrow}$  分别表示极化向上和极化向下. 橙色和白色球体分别代表 Te 原子和 V 原子

Fig. 1. Top and side views of the bilayer  $\text{VTe}_2$  with two different configurations: (a)  $P_{\uparrow}$ ; (b)  $P_{\downarrow}$ .  $P_{\uparrow}$  and  $P_{\downarrow}$  denote polarization up and polarization down, respectively. Orange and white spheres represent Te and V atoms.

在双层  $\text{VTe}_2$  的界面处, 由于弱的层间 vdW 相互作用引起的净电荷转移在双层  $\text{VTe}_2$  结构的自发垂直极化产生中起着关键作用. 因此, 为了分析双层  $\text{VTe}_2$  在两种堆叠情况下净电荷转移如何诱导自发垂直铁电极化, 对上述两种堆叠情况下的双层  $\text{VTe}_2$  的电荷密度差和平面平均电荷密度差进行了进一步研究, 结果如图 2 所示. 可以观察到, 对于上述两种堆叠结构, 电荷密度差在上下两层上的分布是不同的, 并且这种电荷在积累区和耗尽区中的不等效性来自两层之间的净电荷转移, 这会引发垂直极化. 具体而言, 在  $P_{\uparrow}$  态下, 从图 2(a) 的左侧可以看出, 下层中积累的电子电荷比上层中积累的电子电荷多, 因此可以推断电荷转移是从上层到下层 (主要是从上层中的 V 原子到下层中的 Te 原子). 从上层到下层的电荷转移也可从图 2(a) 的右侧, 沿  $z$  轴方向的平面平均电荷密度差中明显获得. 因此, 在  $P_{\uparrow}$  态中获得了沿  $+z$  方向的自发铁电极化. 相反, 当堆叠结构改变时, 如图 2(b) 所示, 在  $P_{\downarrow}$  态下, 发生从下层到上层的净电荷转移, 导致沿  $-z$  方向的自发铁电极化. 这些特征表明, 双层  $\text{VTe}_2$  材料中的电荷转移将响应于堆叠结构的变化, 并基于其特定的排列诱导出两个不同方向的垂直极化  $P_{\uparrow}$  和  $P_{\downarrow}$ .

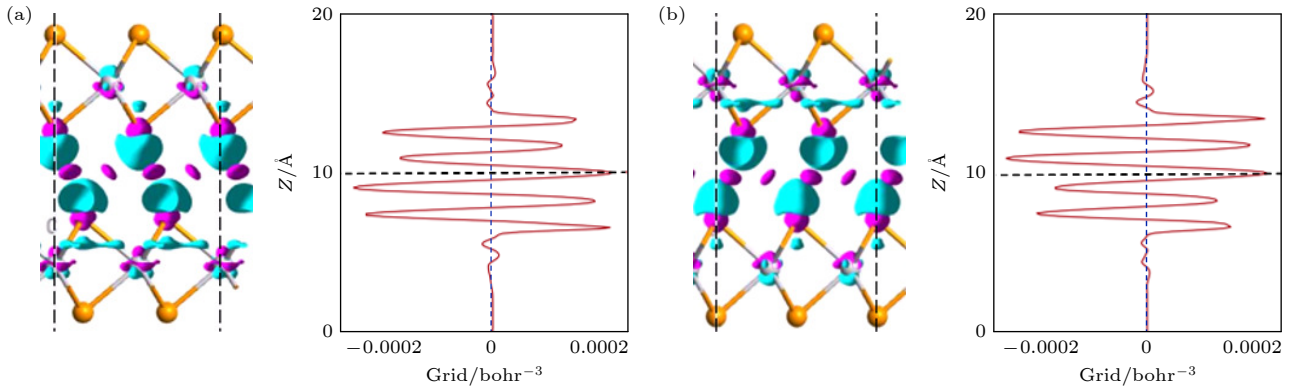


图 2 (a) 极化为  $P_{\uparrow}$  和 (b)  $P_{\downarrow}$  的双层  $\text{VTe}_2$  结构沿  $z$  方向的电荷密度差 (左) 和平面平均电荷密度差 (右). 紫色和蓝色分别代表电子耗尽和积累. 等值面值设定为  $0.00024e/\text{\AA}^3$

Fig. 2. The charge density difference along the  $z$  direction (left panels) and plane-averaged charge density difference (right panels) for the bilayer  $\text{VTe}_2$  structure with (a) polarization  $P_{\uparrow}$  and (b) polarization  $P_{\downarrow}$ . Purple and blue colors represent electron depletion and accumulation, respectively. The isosurface value is set to  $0.00024e/\text{\AA}^3$ .

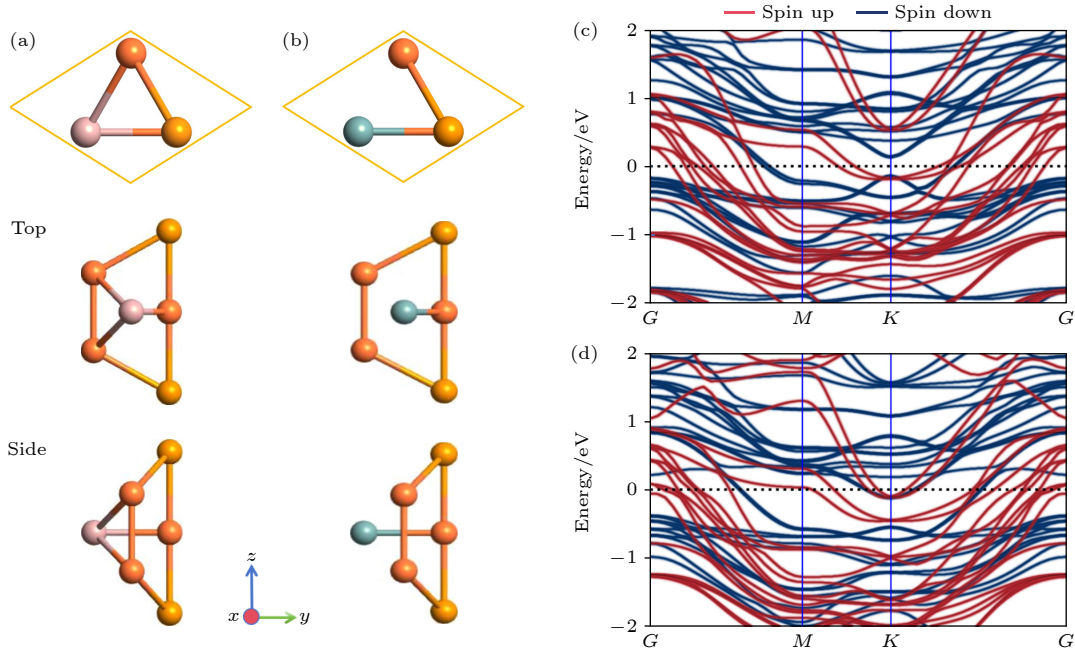


图 3  $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2$  (a) 和  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$  (b) 的结构示意图. (c), (d) 为 (a), (b) 对应的能带图, 自旋向上 (spin up) 和自旋向下 (spin down) 分别用红线和蓝线表示. 图中橙色、粉色、绿色、黄色球体分别代表 Fe, Ga, Ge, Te 原子

Fig. 3. Structural diagrams of  $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2$  (a) and  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$  (b). (c) and (d) show the corresponding band structures for (a) and (b), with spin up and spin down represented by red and blue lines, respectively. Orange, pink, green, and yellow spheres correspond to Fe, Ga, Ge, and Te atoms, respectively.

在证实了双层  $\text{VTe}_2$  的铁电极化后, 需要考虑合适的电极材料与之搭配构建 MFTJs, 从而实现更优异的输运性能. 为此, 考虑了具有 220 K 居里温度和强垂直磁各向异性的铁磁材料  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$ , 以及与  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$  具有相似的层状结构和磁性的  $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2$  作为候选电极. 这是因为  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$  与  $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2$  作为典型的金属铁磁性二维材料, 高的居里温度意味着电极更耐高温, 而且导电性能优

异. 正如图 3 中  $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2$  和  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$  能带结构所示, 费米能级与多个能带相交, 表明这两种材料均具有金属特性. 同时, 自旋向上和自旋向下态的不对称性还暗示着系统的高自旋极化. 然后对铁电材料和磁性电极进行优化, 优化后的面内晶格常数  $\text{VTe}_2$  为  $3.598 \text{\AA}$ ,  $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2$  为  $4.076 \text{\AA}$ ,  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$  为  $4.056 \text{\AA}$ . 为了使 MFTJs 达到更好的晶格匹配, 对铁电层  $\text{VTe}_2$  与铁磁层  $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2$  和  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$

分别进行了  $2 \times 2$ ,  $2 \times 2$  和  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  扩胞处理, 从而使晶格失配率降到更低. 最终采用扩胞后的  $\text{VTe}_2$  晶格常数作为整体的面内晶格参数, 用  $\text{VTe}_2$  控制与  $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2$  和  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$  之间的最小面内单元匹配, 最终将 MFTJs 的最大面内晶格失配率限制在 1.26% 以内. 由此说明  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$  与  $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2$  两种磁性电极在与  $\text{VTe}_2$  构建 MFTJs 时晶格十分匹配. 因此本文构建的 MFTJs 拥有低的晶格失配率, 保护了中心铁电层的极化. 然后, 如图 4(a) 和图 4(b) 侧视图所示, 通过考虑铁电层  $\text{VTe}_2$  与左右

两边磁性电极的对齐方式, 来确定最稳定的堆叠结构.

在中心散射区与左右电极的界面处, 均考虑了拥有不同高对称点的三种对齐方式: V-Te, V-Fe 和 V-Ga/Ge. 通过计算结合能, 发现在两种界面处, V-Fe 堆叠配置在能量上都是最有利的. 基于此, 本文采用中间铁电层 V 原子与左右两侧磁性电极 Fe 原子对齐的方式构建了图 4(c) 所示的  $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2/\text{VTe}_2/\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$  的 MFTJs 器件模型. 该器件中, 计算的磁矩显示, 系统磁矩主要由  $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2$

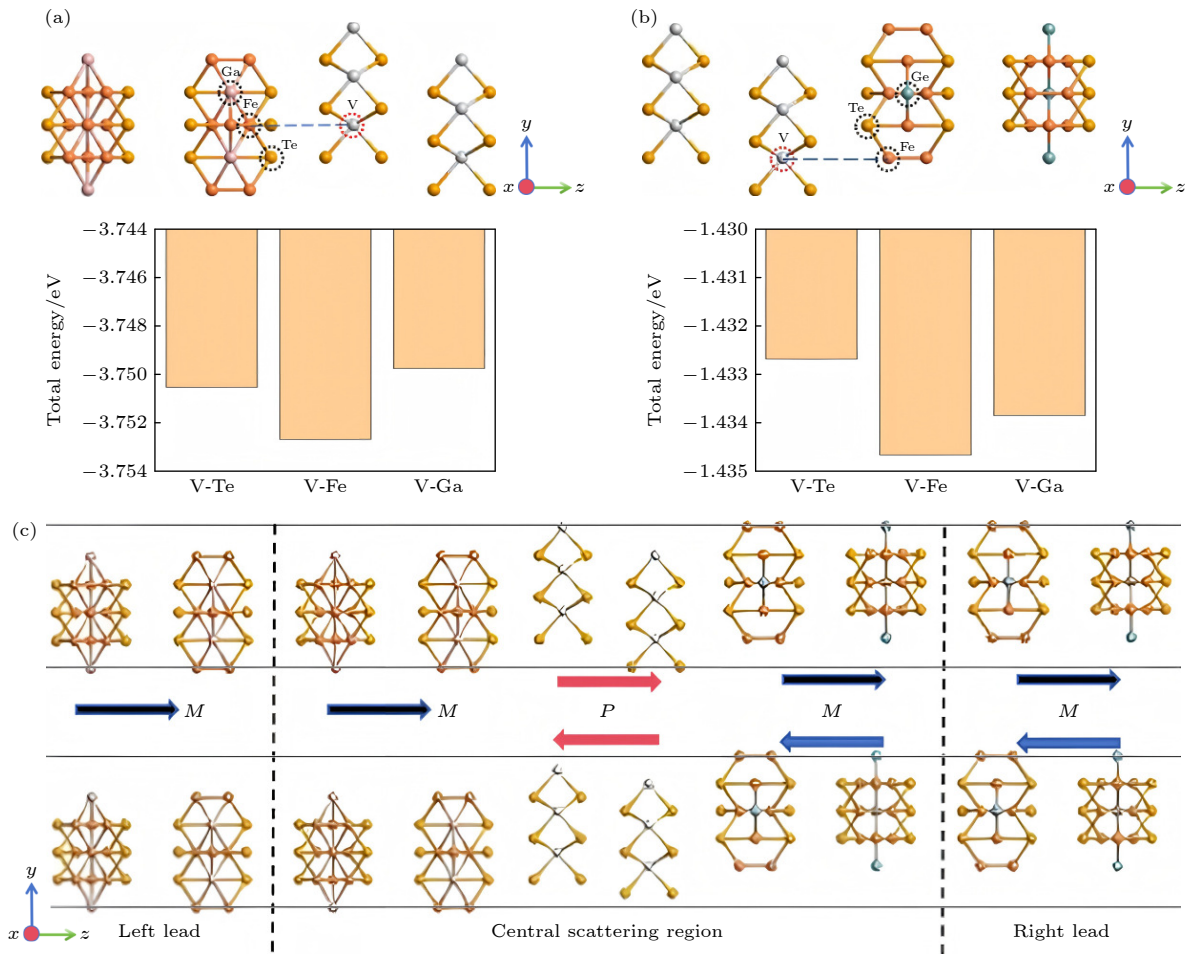


图 4 (a), (b) 考虑了中间铁电层 ( $\text{VTe}_2$ ) 与左右两边铁磁层 ( $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2$ ,  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$ ) 的三种高对齐方式 (左 V-Te, V-Fe 和 V-Ga; 右 V-Te, V-Fe 和 V-Ge) 以及计算的相应不同对齐情况下的总能量. 虚线表示原子对齐, 这里仅给出所考虑的三种对齐中的一种作为示例. (c) 堆叠出的最稳定的器件示意图, 中间红色箭头  $\mathbf{P}$  的方向表示  $\text{VTe}_2$  对应极化方向, 磁化强度  $\mathbf{M}$  定义为磁矩矢量, 其中向右 (+ $z$ ) 和向左 (- $z$ ) 的取向分别用黑色和蓝色箭头表示. 左右电极延伸至无穷远, 器件在  $xy$  平面内具有周期性, 且电流沿  $z$  方向流动

Fig. 4. (a), (b) Three high alignments of the intermediate ferroelectric layer ( $\text{VTe}_2$ ) and the left and right ferromagnetic layers ( $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2$ ,  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$ ) are considered (left V-Te, V-Fe, and V-Ga; right, V-Te, V-Fe, and V-Ge) and the calculated total energy for the corresponding different alignments. The dotted line represents the atomic alignment, and only one of the three alignments considered is given here as an example. (c) Schematic diagram of the most stable device stacked, the direction of red arrow  $\mathbf{P}$  denotes polarization of  $\text{VTe}_2$ . Magnetization  $\mathbf{M}$  is defined as magnetic moment vector, with right (+ $z$ ) and left (- $z$ ) orientations shown by black/blue arrows. Electrodes extend to infinity, device is periodic in  $xy$ -plane, and current flows along  $z$ -direction.

和  $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2$  中的 Fe 原子贡献. 为此将  $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2$  层的磁化方向固定, 通过调控  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$  层的磁化方向, 使其与  $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2$  层的磁化方向呈平行或反平行排列, 从而实现器件的平行磁构型 ( $M_{\uparrow\uparrow}$ ) 和反平行磁构型 ( $M_{\uparrow\downarrow}$ ). 同时, 通过  $\text{VTe}_2$  双层膜的面内相对滑移, 可分别实现自发极化向右 ( $P_{\rightarrow}$ ) 和向左 ( $P_{\leftarrow}$ ) 的两种铁电极化状态.

### 3.2 完美的自旋过滤效应及显著的 TMR 和 TER

基于上述构建的 MFTJs, 继续探索了在零偏置电压条件下  $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2/\text{双层 VTe}_2/\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$  的 TMR, TER 以及自旋过滤效应. 首先研究了  $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2/\text{双层 VTe}_2/\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$  MFTJs 在右极化 ( $P_{\rightarrow}$ ) 条件下  $M_{\uparrow\uparrow}$  (磁序平行排列) 和  $M_{\uparrow\downarrow}$  (磁序反平行排列) 态的运输性质. 在  $M_{\uparrow\uparrow}$  状态下, 如图 5(a) 所示, 自旋向上透射相当高, 而自旋向下透射几乎为零, 因此获得了将近 100% 的完美自旋过滤效果, 其中自旋向上电子主导了传输路径, 如

表 1 所列 (实际上, MFTJs 的四种状态中均存在接近 100% 的自旋过滤效果. 这是因为  $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2$  和  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$  作为器件电极, 其能带在费米能级处是高度自旋极化的, 且传输路径主要由自旋向上电子主导). 相较于  $M_{\uparrow\uparrow}$  状态, 在  $M_{\uparrow\downarrow}$  状态下, 自旋向上和自旋向下电子的传输都显著降低, 如图 5(b) 所示. 这表明当电极的磁化从磁序平行排列变为磁序反平行排列时, 器件的总透射系数显著降低, 器件实现了高 TMR 比. 此外在  $M_{\uparrow\downarrow}$  状态, 费米能级处也存在将近 100% 的完美自旋过滤效果, 正如图 5(b) 中插图所示.

为了分析上述现象, 本文计算了如图 6 所示  $P_{\rightarrow}$  条件下  $M_{\uparrow\uparrow}$  和  $M_{\uparrow\downarrow}$  构型在零偏压下系统的自旋分辨投影局域态密度 (PLDOS). 对于  $M_{\uparrow\uparrow}$  构型, 自旋向上通道在整个费米能级处都是有透射值的 (参见图 6(a) 中的上部图像). 这意味着自旋向上电子可以轻易地经由中间铁电阻挡层从左电极隧穿到右电极, 这也印证了如图 5(a) 所示的相当高的上自旋传输. 与此相反,  $M_{\uparrow\uparrow}$  的下自旋通道在整个费米能级上的透射值特别小 (几乎为零值), 这

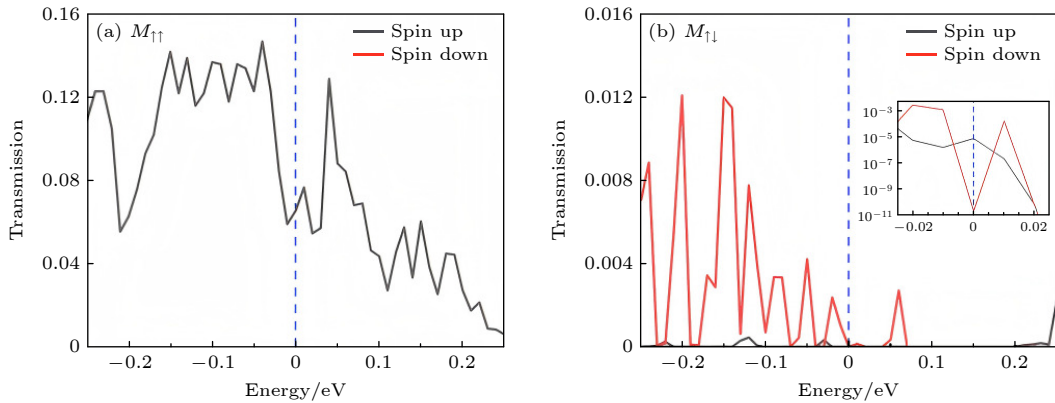


图 5 (a) 和 (b) 分别为  $M_{\uparrow\uparrow}$  和  $M_{\uparrow\downarrow}$  的  $P_{\rightarrow}$  状态下 MFTJs 电子透射光谱. 黑线和红线分别表示自旋向上和自旋向下

Fig. 5. (a) and (b) The electron transmission spectrum for the MFTJs in the  $P_{\rightarrow}$  state with  $M_{\uparrow\uparrow}$  and  $M_{\uparrow\downarrow}$ , respectively. Black and red lines represent spin-up and spin-down, respectively.

表 1  $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2/\text{VTe}_2$  双层膜/ $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$  的自旋相关电子透射  $T_{\uparrow}$ 、 $T_{\downarrow}$  和  $T_{\text{tot}}$ 、自旋过滤效率  $\eta\%$ 、TMR 和 TER. 这里  $T_{\text{tot}} = T_{\uparrow} + T_{\downarrow}$

Table 1. The spin-dependent electron transmission parameters of the  $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2/\text{VTe}_2$  bilayer/ $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$  system include  $T_{\uparrow}$ ,  $T_{\downarrow}$ ,  $T_{\text{tot}}$  (where  $T_{\text{tot}} = T_{\uparrow} + T_{\downarrow}$ ), spin filtering efficiency  $\eta\%$ , TMR, and TER.

	$M_{\uparrow\uparrow}$				$M_{\uparrow\downarrow}$				TMR/%
	$T_{\uparrow}$	$T_{\downarrow}$	$T_{\text{tot}}$	$\eta/\%$	$T_{\uparrow}$	$T_{\downarrow}$	$T_{\text{tot}}$	$\eta/\%$	
$P_{\leftarrow}$	0.058	0	0.058	100	$8.05 \times 10^{-6}$	0	$8.05 \times 10^{-6}$	100	$7.27 \times 10^5$
$P_{\rightarrow}$	0.065	0	0.065	100	$6.51 \times 10^{-6}$	0	$6.51 \times 10^{-6}$	100	$1.01 \times 10^6$
TER	12.07%				23.66%				

说明自旋向下的电子很难经由中间铁电阻挡层从左电极隧穿到右电极,从而导致几乎为零自旋向下传输.因此,在 $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2$ /双层 $\text{VTe}_2$ / $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$ 多铁隧道结的 $M_{\uparrow\uparrow}$ 态中,自旋向上电子的透射率远高于自旋向下的透射率,从而观察到了理想的自旋过滤效应.此外, $M_{\uparrow\uparrow}$ 态下的总透射系数大小主要由自旋通道贡献,仍维持一个比较大的总透射系数.相反,在 $M_{\uparrow\downarrow}$ 的情况下,见图6(b),自旋向上的PLDOS在右电极上,处于较低的水平;自旋向下的PLDOS在左电极区域也很低,因此自旋向上和自旋向下的电子都被阻碍传输,这导致 $M_{\uparrow\downarrow}$ 自旋向上和自旋向下的总传输几乎为零.因此,在宽电子能量窗口处, $M_{\uparrow\uparrow}$ 与 $M_{\uparrow\downarrow}$ 的总透射系数相差悬殊,从而导致构建的MFTJs在中间铁电层 $\text{VTe}_2$ 处于 $P_{\leftarrow}$ 情况下获得了显著的TMR效应.为了更好地分析MFTJs产生的TMR和TER效应,计算了由极化方向( $P_{\leftarrow}$ ,  $P_{\rightarrow}$ )和磁序排列( $M_{\uparrow\uparrow}$ ,

$M_{\uparrow\downarrow}$ )四种组合下的透射系数.如图7(a)所示,无论铁电层 $\text{VTe}_2$ 处于 $P_{\leftarrow}$ 还是 $P_{\rightarrow}$ ,器件 $M_{\uparrow\uparrow}$ 的透射系数均远大于 $M_{\uparrow\downarrow}$ 的透射系数.因此,构建的MFTJs在这两种组合状态下均产生了特别大的TMR值,费米能级处TMR值分别高达127000%和1010000%,正如图7(c)TMR曲线和表1所示.此外,如图7(b)所示,当电极磁序排列处于 $M_{\uparrow\uparrow}$ 或 $M_{\uparrow\downarrow}$ 状态时,器件 $P_{\leftarrow}$ 与 $P_{\rightarrow}$ 状态下费米能级处的透射系数比较相近.从而导致这两种状态下的TER的值分别为12.07%与23.66%,正如图7(d)TER曲线所示.有趣的是,TMR与 $M_{\uparrow\downarrow}$ 的TER曲线在除费米能级外的其他能量点存在许多高TMR与TER值,预期通过对MFTJs施加偏压或者双轴应变,器件可能实现更大的TMR与TER值.基于上述研究,本文构建的MFTJs在非易失性电阻器件、自旋过滤器件、逻辑电路器件中具有很大的应用潜力.

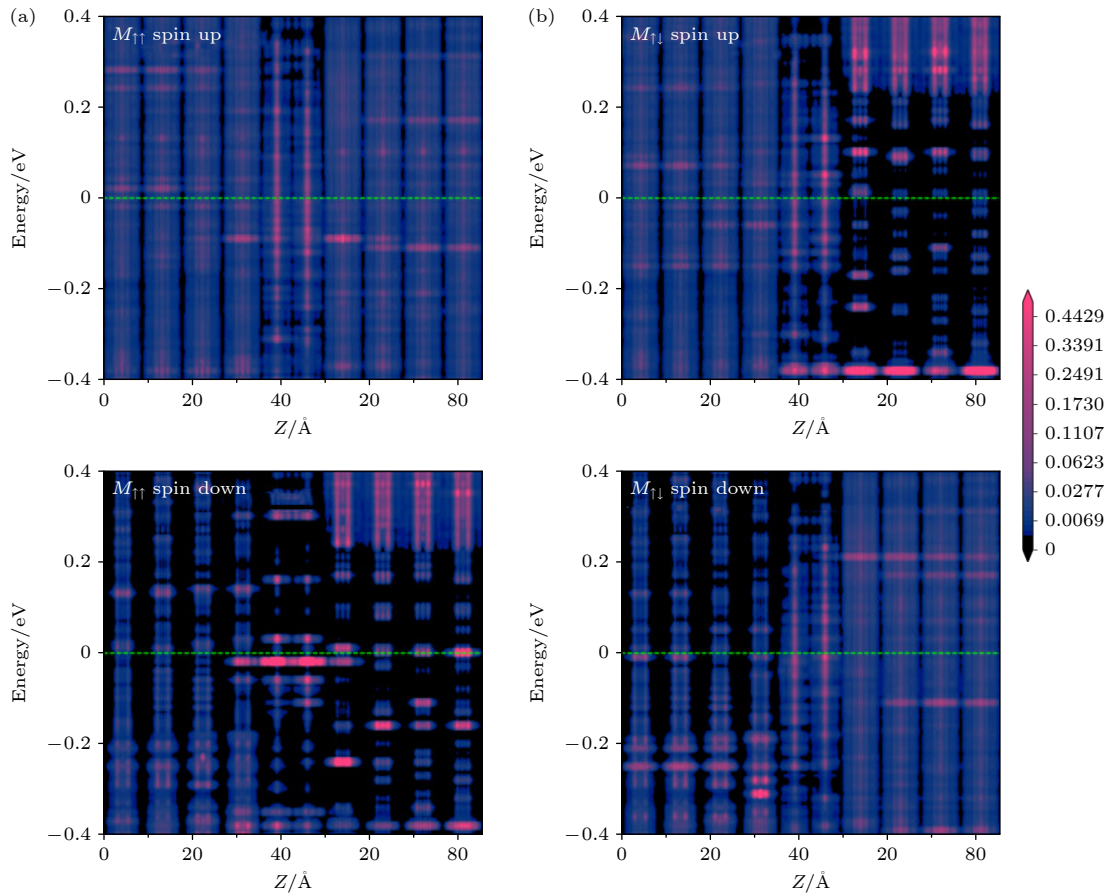


图6 (a)和(b)分别为 $M_{\uparrow\uparrow}$ 和 $M_{\uparrow\downarrow}$ 的 $P_{\leftarrow}$ 态中MFTJs的自旋相关投影局域态密度.绿色虚线代表费米能级

Fig. 6. (a) and (b) are the spin-dependent projected local density of states of MFTJs in the  $P_{\leftarrow}$  states of  $M_{\uparrow\uparrow}$  and  $M_{\uparrow\downarrow}$ , respectively. The green dotted line represents the Fermi level.

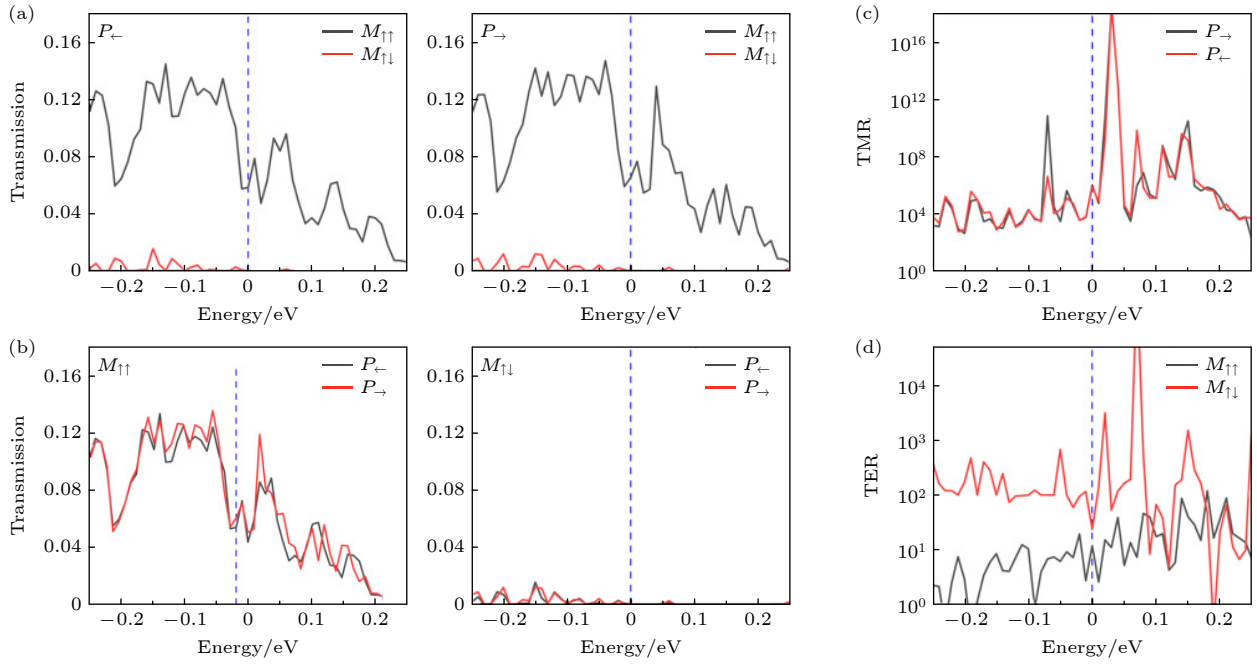


图 7 (a) 处于  $P_-$  (左) 和  $P_-$  (右) 状态的 MFTJs 的透射谱 (自旋向上和自旋向下透射的总和), 黑线和红线分别代表  $M_{\uparrow\uparrow}$  和  $M_{\uparrow\downarrow}$  态的透射光谱; (b) MFTJs 在  $M_{\uparrow\uparrow}$  (左) 和  $M_{\uparrow\downarrow}$  (右) 状态下的电子透射谱, 黑线和红线分别代表  $P_-$  和  $P_-$  的电子透射光谱; (c)  $P_-$  和  $P_-$  状态下 MFTJs 的 TMR, 黑线和红线分别代表  $P_-$  和  $P_-$  的 TMR; (d) MFTJs 在  $M_{\uparrow\uparrow}$  和  $M_{\uparrow\downarrow}$  状态下的 TER, 黑线和红线分别代表  $M_{\uparrow\uparrow}$  和  $M_{\uparrow\downarrow}$  的 TER

Fig. 7. (a) Transmission spectra of MFTJs in the  $P_-$  (left) and  $P_-$  (right) states (sum of spin-up and spin-down transmissions). The black and red lines represent the transmission spectra of the  $M_{\uparrow\uparrow}$  and  $M_{\uparrow\downarrow}$  states, respectively. (b) Electron transmission spectra of MFTJs in  $M_{\uparrow\uparrow}$  (left) and  $M_{\uparrow\downarrow}$  (right). The black and red lines represent the electron transmission spectra of  $P_-$  and  $P_-$ , respectively. (c) TMR of MFTJs in  $P_-$  and  $P_-$  states. The black and red lines represent the TMRs of  $P_-$  and  $P_-$ , respectively. (d) MFTJs in  $M_{\uparrow\uparrow}$  and  $M_{\uparrow\downarrow}$  TER. The black and red lines represent  $M_{\uparrow\uparrow}$  and  $M_{\uparrow\downarrow}$ , respectively.

## 4 结 论

综上所述, 本文采用基于密度泛函理论的第一性原理方法, 以双层  $VTe_2$  为铁电材料, 设计并研究了  $Fe_3GaTe_2$ /双层  $VTe_2$ / $Fe_3GeTe_2$  多功能 MFTJs 相关输运特性. 研究表明, 通过调节磁性电极的磁化排列和铁电势垒的极化方向, MFTJs 能够轻易实现多个非易失性电阻态, 这为多态存储技术的发展带来了新的机遇. 在平衡状态下, 当铁电极化由  $P_-$  变为  $P_-$  时, 费米能级处的 TMR 比由  $7.27 \times 10^5\%$  增加到  $1.01 \times 10^6\%$ . 同时, 随着两个电极的磁化方向从  $M_{\uparrow\uparrow}$  变为  $M_{\uparrow\downarrow}$ , TER 值从 12.07% 增加到 23.66%. 此外, 构建的 MFTJs 在四种不同的组合状态下均表现出完美的自旋过滤性能. 本文的工作为多功能 MFTJs 器件的创新设计提供了新的思路, 为实现多态存储功能, 完美自旋过滤器件开辟了新的可能性. 这一机制具有广泛的适用性, 可以推广到其他滑移铁电材料, 为多功能电子器件的发展提供了广阔的前景和无限的机遇.

## 参考文献

- [1] Theis T N, Wong H S P 2017 *Comput. Sci. Eng.* **19** 41
- [2] Lundstrom M S, Alam M A 2022 *Science* **378** 722
- [3] Wong H S P, Salahuddin S 2015 *Nat. Nanotechnol.* **10** 191
- [4] Lanigan-Atkins T, He X, Krogstad M, et al. 2021 *Nat. Mater.* **20** 977
- [5] Behin-Aein B, Datta D, Salahuddin S, Datta S 2010 *Nat. Nanotechnol.* **5** 266
- [6] Apalkov D, Khvalkovskiy A, Watts S, et al. 2013 *JETC* **9** 1
- [7] Wadley P, Howells B, Železný J, et al. 2016 *Science* **351** 587
- [8] Manchon A, Železný J, Miron I M, Jungwirth T, Sinova J, Thiaville A, Garello K, Gambardella P 2019 *Rev. Mod. Phys.* **91** 035004
- [9] Dieny B, Prejbeanu I L, Garello K, et al. 2020 *Nat. Electron.* **3** 446
- [10] Zhang M M, Guo Y T, Fu X R, Li M L, Ren B C, Jun Z, Yuan R Y 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 157202 (in Chinese) [张明媚, 郭亚涛, 付旭日, 李梦蕾, 任宝藏, 郑军, 袁瑞琦 2023 *物理学报* **72** 157202]
- [11] Velev J P, Duan C G, Burton J, Smogunov A, Niranjan M K, Tosatti E, Jaswal S, Tsymbal E Y 2009 *Nano Lett.* **9** 427
- [12] Barrionuevo D, Zhang L, Ortega N, Sokolov A, Kumar A, Misra P, Scott J, Katiyar R 2014 *Nano Nanotechnol.* **25** 495203
- [13] Merodio P, Kalitsov A, Chshiev M, Velev J 2016 *Phys. Rev. Appl.* **5** 064006
- [14] Manipatruni S, Nikonov D E, Lin C C, Gosavi T A, Liu H,

- Prasad B, Huang Y L, Bonturim E, Ramesh R, Young I A 2019 *Nature* **565** 35
- [15] Guo X H, Zhu L, Cao Z L, Yao K L 2024 *PCCP* **26** 3531
- [16] Ruixia Y, Xujin Z, Jianhua X, Zhi Y, Fang W, Xiaohong X 2025 *Chin. Phys. Lett.* **42** 070705
- [17] Zhang J, Yu P 2013 *J. Chin. Ceram. Soc.* **41** 905
- [18] Yin Y, Li Q 2017 *J. Materomics* **3** 245
- [19] Zhang Y, Li X, Sheng J, Yu S, Zhang J, Su Y 2023 *Appl. Phys. Lett.* **123** 192402
- [20] Lei Y, Xu Y, Wang M, Zhu G, Jin Z 2021 *Small* **17** 2005495
- [21] Wu Y F, Zhu M Y, Zhao R J, Liu X J, Zhao Y C, Wei H X, Zhang J Y, Zheng X Q, Shen J X, Huang H, Wang S G 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 048502 (in Chinese) [吴燕飞, 朱梦媛, 赵瑞杰, 刘心洁, 赵云驰, 魏红祥, 张静言, 郑新奇, 申见昕, 黄河, 王守国 2022 物理学报 **71** 048502]
- [22] Zheng C, Yu L, Zhu L, et al. 2018 *Sci. Adv* **4** eaar7720
- [23] Liu F, You L, Seyler K L, et al. 2016 *Nat. Commun.* **7** 1
- [24] Feng Y, Han J, Zhang K, Lin X, Gao G, Yang Q, Meng S 2024 *Phys. Rev. B* **109** 085433
- [25] Deng Y, Yu Y, Song Y, et al. 2018 *Nature* **563** 94
- [26] Ke J, Yang M, Xia W, et al. 2020 *JPCM* **32** 405805
- [27] Huang M, Ma Z, Wang S, et al. 2021 *2D Mater.* **8** 031003
- [28] Jiang P, Wang C, Chen D, Zhong Z, Yuan Z, Lu Z Y, Ji W 2019 *Phys. Rev. B* **99** 144401
- [29] Su Y, Li X, Zhu M, Zhang J, You L, Tsymbal E Y 2020 *Nano Lett.* **21** 175
- [30] Yan Z, Li Z, Han Y, Qiao Z, Xu X 2022 *Phys. Rev. B* **105** 075423
- [31] Chen Y, Tang Z, Dai M, Luo X, Zheng Y 2022 *Nanoscale* **14** 8849
- [32] Wu M 2021 *Nat. Rev. Phys.* **3** 726
- [33] Zhong T T, Wu M H 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 217707 (in Chinese) [钟婷婷, 吴梦昊 2020 物理学报 **69** 217707]
- [34] Liu Y, Liu G, Xi X 2025 *Chin. Phys. B* **34** 017701
- [35] Wan Y, Hu T, Mao X, et al. 2022 *Phys. Rev. Lett.* **128** 067601
- [36] Yasuda K, Wang X, Watanabe K, Taniguchi T, Jarillo-Herrero P 2021 *Science* **372** 1458
- [37] Wang C, An Y 2021 *Appl. Surf. Sci.* **538** 148098
- [38] Fuh H R, Chang C R, Wang Y K, Evans R F, Chantrell R W, Jeng H T 2016 *Sci. Rep.* **6** 32625
- [39] Garcia V, Bibes M 2014 *Nat. Commun.* **5** 4289
- [40] Zhang R, Jiao R, Fu Z, Yuan H, He J, Shen L, Liao X, Zhou Y, Yuan J 2025 *Phys. Rev. B* **111** 155414
- [41] Yan Z, Yang R, Fang C, Lu W, Xu X 2024 *Phys. Rev. B* **109** 205409
- [42] Fei Z, Huang B, Malinowski P, et al. 2018 *Nat. Mater.* **17** 778
- [43] Taylor J, Guo H, Wang J 2001 *Phys. Rev. B* **63** 245407
- [44] Blöchl P E 1994 *Phys. Rev. B* **50** 17953
- [45] Perdew J P, Chevary J A, Vosko S H, Jackson K A, Pederson M R, Singh D J, Fiolhais C 1992 *Phys. Rev. B* **46** 6671
- [46] Johnson E R, Becke A D 2005 *J. Chem. Phys.* **123** 024101
- [47] Monkhorst H J, Pack J D 1976 *Phys. Rev. B* **13** 5188
- [48] Yuasa S, Nagahama T, Fukushima A, Suzuki Y, Ando K 2004 *Nat. Mater.* **3** 868
- [49] Tao L, Wang J 2016 *Appl. Phys. Lett.* **108** 062903
- [50] Ma J, Luo X, Zheng Y 2024 *Npj Comput. Mater.* **10** 102

# Transport properties of multiferroic tunnel junctions based on sliding ferroelectric $VTe_2$

ZHU Xiaolong<sup>†</sup> LIU Yulin*(Institute of Physics, East China Jiaotong University, Nanchang 330013, China)*

( Received 6 June 2025; revised manuscript received 21 August 2025 )

## Abstract

Multiferroic tunnel junctions (MFTJs), characterized by a ferroelectric barrier encapsulated between two ferromagnetic electrodes, represent a highly promising platform for next-generation nonvolatile memory applications. The recent discovery of intrinsic ferromagnetism and ferroelectricity in van der Waals (vdW) materials further provides a compelling material foundation for constructing multifunctional MFTJs based on vdW heterostructures. In this paper, aiming at high-performance and multifunctional van der Waals multiferroic tunnel junctions (vdW-MFTJs) devices, we investigate the spin-dependent transport properties of vdW-MFTJs with a bilayer  $VTe_2$  sliding ferroelectric barrier and  $Fe_3GaTe_2/Fe_3GeTe_2$  magnetic electrodes by using first-principles calculations based on density functional theory (DFT). Our results reveal that multiple non-volatile resistance states can be achieved by controlling the polarization direction of the ferroelectric barrier and the magnetization configuration of the ferromagnetic electrodes in the  $Fe_3GaTe_2$ /bilayer  $VTe_2/Fe_3GeTe_2$  MFTJs. Specifically, when the double-layer ferroelectric material  $VTe_2$  undergoes relative interlayer slippage, the polarization of the ferroelectric barrier switches from a left-oriented state ( $P_-$ ) to a right-oriented state ( $P_+$ ). Consequently, the tunneling magnetoresistance (TMR) ratio at the Fermi level increases from  $7.27 \times 10^5\%$  to  $1.01 \times 10^6\%$ . Moreover, switching the magnetization configuration of the ferromagnetic electrodes from parallel alignment ( $M_{\uparrow\uparrow}$ ) to antiparallel alignment ( $M_{\uparrow\downarrow}$ ) leads to an almost twofold increase in the tunneling electroresistance (TER) ratio. Furthermore, nearly 100% spin filtering efficiency is observed in all four non-volatile resistance states of the MFTJs. These findings demonstrate that the engineered  $Fe_3GaTe_2$ /bilayer  $VTe_2/Fe_3GeTe_2$  MFTJs hold promising potential applications in multi-state non-volatile memory and spin filters, providing a versatile platform for developing multifunctional electronic devices.

**Keywords:** multi-ferroion tunnel junctions, quantum transport, spin filtration, non-volatile resistors

**PACS:** 75.85.+t, 73.23.-b, 72.25.-b, 85.30.Mn

**DOI:** [10.7498/aps.74.20250734](https://doi.org/10.7498/aps.74.20250734)

**CSTR:** [32037.14.aps.74.20250734](https://cstr.cn/32037.14.aps.74.20250734)

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [zxlongwy@126.com](mailto:zxlongwy@126.com)

## 基于滑移铁电 $\text{VTe}_2$ 多铁隧道结的输运性质

朱小龙 刘雨林

### Transport properties of multiferroic tunnel junctions based on sliding ferroelectric $\text{VTe}_2$

ZHU Xiaolong LIU Yulin

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 207501 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20250734

CSTR: 32037.14.aps.74.20250734

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250734>

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

#### 石墨烯p-n结在磁场中的电输运热耗散

Thermal dissipation of electric transport in graphene p-n junctions in magnetic field

物理学报. 2022, 71(12): 127203 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220029>

#### 双层硼烯纳米带的量子输运研究

Quantum transport properties of bilayer borophene nanoribbons

物理学报. 2022, 71(22): 227301 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221304>

#### 基于一维电子体系的超导复合器件和量子输运研究

Research on hybrid superconducting devices and quantum transport based on one-dimensional electronic systems

物理学报. 2025, 74(7): 077401 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241672>

#### 线缺陷石墨烯纳米带的电输运研究

Electron transport in graphene nanoribbons with line defects

物理学报. 2023, 72(15): 157301 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230502>

#### 石墨烯中的拓扑安德森绝缘体相

Topological Anderson insulator phase in graphene

物理学报. 2025, 74(4): 047301 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241031>

#### 基于磁性隧道结和双组分多铁纳米磁体的超低功耗磁弹模数转换器

Ultra-low power magneto-elastic analog-to-digital converter based on magnetic tunnel junctions and bicomponent multiferroic nanomagnet

物理学报. 2024, 73(13): 137502 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240129>