

$\text{Fe}_3\text{GeTe}_2/\text{h-BN}/\text{石墨烯}$ 二维异质结器件中的高效率自旋注入

杨维 韩江朝 曹元 林晓阳 赵巍胜

Efficient spin injection in $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2/\text{h-BN}/\text{graphene}$ heterostructure

Yang Wei Han Jiang-Chao Cao Yuan Lin Xiao-Yang Zhao Wei-Sheng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 129101 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20202136

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202136>

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

石墨烯纳米片大自旋特性第一性原理研究

First-principles study of graphene nanoflakes with large spin property

物理学报. 2018, 67(18): 187102 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180867>

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>

5d过渡金属原子掺杂六方氮化铝单层的磁性及自旋轨道耦合效应:可能存在的二维长程磁有序

Electronic structures, magnetic properties and spin-orbital coupling effects of aluminum nitride monolayers doped by 5d transition metal atoms: possible two-dimensional long-range magnetic orders

物理学报. 2017, 66(6): 063102 <https://doi.org/10.7498/aps.66.063102>

空位及氮掺杂二维ZnO单层材料性质:第一性原理计算与分子轨道分析

Properties of vacancies and N-doping in monolayer g-ZnO: First-principles calculation and molecular orbital theory analysis

物理学报. 2019, 68(24): 246301 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191258>

Fe_3GeTe_2 纳米带的结构稳定性、磁电子性质及调控效应

Structure stability, magneto-electronic properties, and modulation effects of Fe_3GeTe_2 nanoribbons

物理学报. 2019, 68(20): 208502 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191103>

二维本征铁电体及其多铁耦合的研究进展

Recent research progress of two-dimensional intrinsic ferroelectrics and their multiferroic coupling

物理学报. 2020, 69(21): 217710 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20201433>

专题: 二维磁性材料

Fe₃GeTe₂/h-BN/石墨烯二维异质结器件中的高效率自旋注入*

杨维# 韩江朝# 曹元 林晓阳† 赵巍胜

(北京航空航天大学集成电路科学与工程学院, 北京 100191)

(2020 年 12 月 15 日收到; 2021 年 1 月 3 日收到修改稿)

最近, 二维铁磁材料的发现加速了自旋电子学在超低功耗电子器件方面的应用. 其中, Fe₃GeTe₂ 通过实验调控, 比如界面层间耦合和离子液体调控, 可以使其居里温度达到室温, 具有广泛的应用前景. 本文基于密度泛函理论与非平衡格林函数方法, 研究了 Fe₃GeTe₂/石墨烯二维异质结在有无氮化硼作隧穿层情况下的输运性质. 结果表明: 当 Fe₃GeTe₂/石墨烯之间为透明接触时, 由于电子轨道杂化, 在 ± 0.1 V 偏压下可以实现有效的自旋注入. 通过加入氮化硼作为隧穿层, 则可以在更宽偏压范围 $[-0.3$ V, 0.3 V] 内实现高效自旋隧穿注入; 并且, 由于 Fe₃GeTe₂ 与石墨烯电子态在布里渊区的空间匹配程度取决于电子自旋方向, 相应出现的自旋过滤效应导致了接近 100% 的自旋极化率. 这些研究结果有望推动二维全自旋逻辑以及相关超低功耗自旋电子器件的发展.

关键词: 二维铁磁, 自旋隧穿注入, 自旋过滤效应, 第一性原理计算**PACS:** 91.60.Pn, 73.22.-f, 73.40.Gk, 73.20.At**DOI:** 10.7498/aps.70.20202136

1 引言

自从第一种二维材料石墨烯被剥离出来并用于自旋电子学, 二维材料在自旋电子器件方面的巨大潜力引起了人们的广泛关注^[1]. 与块体材料相比, 二维材料的原子厚度、超净的界面和灵活的堆叠方式为物理效应和超低功耗器件的探索提供了巨大的机遇^[2,3]. 其中, 在二维材料中的铁磁性一直是人们探索的一个方向. 早期工作是利用掺杂或缺陷和邻近效应向石墨烯中引入磁性^[4]. 二维 Cr₂Ge₂Te₆ 是实验上第一个被发现的二维铁磁材料, 其铁磁性可以保留直到层数降低到两层, 其居里温度 (Curie temperature, T_C) 从体材料中的 68 K 降低到了双

层中的 30 K^[5]. CrI₃ 是被发现的第一种单层二维铁磁材料, 其 T_C 仅有 45 K, 磁序随着层数的奇偶变化呈现出铁磁性和反磁性^[6]. 随后, Fe₃GeTe₂ 和 VSe₂ 等单层二维材料中均发现了固有铁磁性^[7–10]. 基于二维铁磁材料的范德瓦耳斯异质结具有许多超越传统体材料的优势, 比如磁性可控^[11–13]、磁阻巨大^[14]和高效翻转^[15,16]等. 这些优势使得二维铁磁材料在自旋电子学的逻辑和存储应用方面具有极大的潜力^[17–19].

在自旋电子学逻辑应用方面, 一个关键问题就是高效自旋注入. 即把铁磁材料中的自旋极化电流有效地注入到自旋传输的沟道中去. 石墨烯具有低自旋轨道耦合的特性和优异的电学性能, 其自旋扩散长度在实验上已经达到几十微米, 是自旋传输的

* 国家自然科学基金 (批准号: 51602013, 12004021)、中国科学技术协会青年人才托举工程 (批准号: 2018QNRC001)、高等学校学科创新引智计划 (批准号: B16001)、中央高校基本科研业务费和北京大数据科学与脑机智能高精尖创新中心资助的课题.

同等贡献作者.

† 通信作者. E-mail: XYLin@buaa.edu.cn

理想沟道^[20]. 而在二维铁磁材料中, Fe_3GeTe_2 与石墨烯晶格匹配度高, 实验上已经证明 $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2/\text{石墨烯}/\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$ 的范德瓦耳斯异质结构具有 160% 的磁阻率^[21]. 因此 Fe_3GeTe_2 是石墨烯合适的二维铁磁金属电极^[22]. 而且, Fe_3GeTe_2 的 T_C 可以通过多种调控方式, 如: 近似耦合^[23]、界面交换耦合^[24]、原子比控制^[25] 和离子液体调控^[7], 使其达到室温. 基于以上考虑, 本文利用密度泛函理论结合非平衡态格林函数, 揭示了 $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2/\text{石墨烯}$ 异质结构存在的高效自旋注入现象. 相比于 $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2/\text{石墨烯}$ 直接接触, 由于 Fe_3GeTe_2 自旋电子态在布里渊区的独特分布, 使用氮化硼实现隧穿接触时可以在更大偏压下保持高效自旋注入. 这些结果将有利于推动二维铁磁材料在自旋逻辑实际应用方面的发展.

2 计算模型与理论方法

本文采用经典的两端口器件模型来进行计算, 如图 1 所示, 包括由 Fe_3GeTe_2 构成的左电极, 石墨烯构成的右电极和 $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2/\text{氮化硼}/\text{石墨烯}$ 层状异质结构构成的中心透射区. 其中, 以氮化硼的层数为 0 层或者 3 层来模拟实验上的透明接触和隧穿接触两种接触情况. 其中, Fe_3GeTe_2 选取 1×1 晶胞 ($a = b = 3.991 \text{ \AA}$), 而石墨烯和氮化硼选取 $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 超胞来使晶格与 Fe_3GeTe_2 匹配^[22], 其晶格失配度分别为 6.5% 和 7.8%. 本文基于 VASP (Vienna *ab initio* simulation package) 中的密度泛函分析方法对器件结构进行了优化^[26], 截断能取值为 400 eV, 布里渊区是由以 Γ 点为中心 $21 \times 21 \times 1$ 的 Monkhorst 网格采样, 设定力的收敛准则为 0.01 eV/Å. 在此基础上本文利用 Nanocal 软件包基于密度泛函理论结合非平衡态格林函数来进行输运计算^[27–29]. 输运计算过程中, 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. 交互关联能采用考虑线性自旋极化的局域密度近似 (local density approximation, LDA), 截止能取值为 160 Ry. 在输运计算过程中, 左右电极的自洽计算采用 $100 \times 9 \times 100$ 的 k 点网络抽样, 中心区采用 $1 \times 9 \times 100$ 的 k 点网络抽样, 对应器件的输运方向沿着 x 和 z 轴, 如图 1 所示. 为了防止 z 轴上周期性重复带

来的影响, 在器件 z 轴上加入了 15 Å 真空层. 在进行平衡态输运计算时, 通过对布里渊区的透射系数取平均得到对应能量下的透射系数:

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

其中, A_{BZ} 是布里渊区面积, $T_\sigma(E, k_{\parallel})$ 是依赖横向布洛赫波矢 k_{\parallel} 、能量 E 和自旋 σ 的透射系数. 使用朗道尔-巴蒂克 (Landauer-Buttiker) 公式计算非平衡态下的自旋流:

$$I_\sigma = \frac{e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} T_\sigma(E) [f_L(E, \mu_L) - f_R(E, \mu_R)] dE, \quad (2)$$

其中 e 是单位电荷, h 是普朗克常数, $f_{L/R}(E, \mu_{L/R})$ 是左右电极的费米狄拉克分布. $\mu_{L/R} = E_F \pm eV_b/2$ 分别代表左电极和右电极在偏置电压 V_b 下的化学势. 根据自旋流的大小, 可以定义非平衡态下自旋注入效率:

$$P_J = \frac{I_\uparrow - I_\downarrow}{I_\uparrow + I_\downarrow} \times 100\%. \quad (3)$$

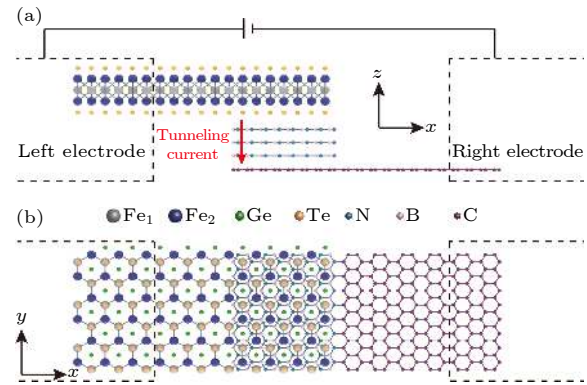


图 1 $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2/\text{氮化硼}_{(3)}/\text{石墨烯}$ 器件的 (a) 侧视图和 (b) 俯视图, 其中器件的电极区域由虚线框标出; 在器件的中心透射区 Fe_3GeTe_2 和石墨烯之间有 0 层或者 3 层氮化硼, 这里所示的模型是具有 3 层氮化硼的器件结构

Fig. 1. (a) The side view and (b) top view of $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2/\text{h-BN}_{(3)}/\text{graphene}$ devices. The electrode regions of the device are indicated by a dashed frame. The number of h-BN layers between graphene and Fe_3GeTe_2 in the center region is 0 or 3. The model shown here is the device structure with 3 layers h-BN.

3 计算结果与分析

利用单层 Fe_3GeTe_2 向石墨烯注入自旋的结果如图 2 所示. 图 2(a) 和图 2(b) 分别是在没有氮化硼作隧穿层的器件中的 I - V 特性曲线和对应的自旋极化率. 从图 2(a) 可以看到自旋向上的电流明

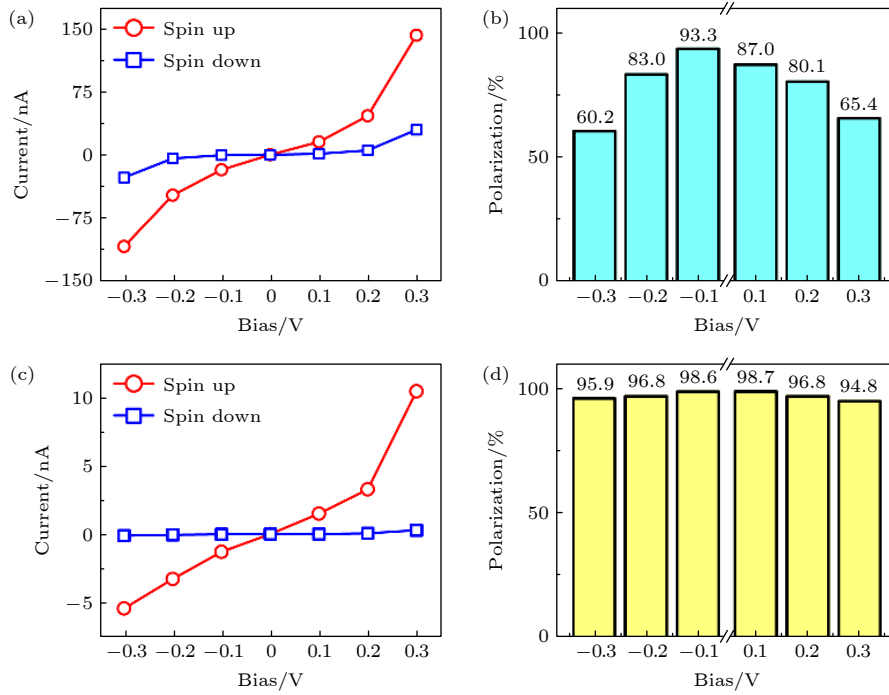


图 2 (a) 透明接触器件的 I - V 曲线; (b) 透明接触器件石墨烯沟道中的自旋极化率; (c) 隧穿接触器件的 I - V 曲线; (d) 隧穿接触器件石墨烯沟道中的自旋极化率

Fig. 2. (a) I - V curves of the transparent contact device; (b) spin polarization in graphene channel of the transparent contact device; (c) I - V curves of the tunneling contact device; (d) spin polarization in graphene channel of the tunneling contact device.

显高于自旋向下的电流, 这表明有很好的自旋注入效果. 实际上, 在低偏压 ± 0.1 V 下, 石墨烯中的自旋极化率高达 93.3% (图 2(b)). 不过, 随着偏压的增大, 自旋向下电流也逐渐增大, 使得自旋极化率逐渐下降, 在 ± 0.3 V 偏压下只有 60% 左右.

图 2(c) 所示为隧穿接触器件分辨自旋的 I - V 特性曲线. 在隧穿接触器件中, 即使偏压增加到 0.3 V, 自旋向下的电流依然十分微弱. 而自旋向上的电流正常地随着偏压增大而增大. 因此, 如图 2(d) 所示, 在 $[-0.3$ V, $+0.3$ V] 的偏压范围内, 石墨烯中的自旋极化率都保持在很高的数值 (94.8%—98.7%). 除了自旋极化率的变化外, 相比于透明接触器件, 隧穿接触器件电流小了一个数量级, 这是由于隧穿电流随着势垒厚度呈现指数衰减造成的. 电流的减小意味着在同样工作电压下隧穿接触器件的功耗更低, 但是对信号测量的灵敏度要求会增加.

为了深入理解两种器件输运机制, 本文计算了两种器件分辨自旋的透射谱, 如图 3 所示. 图 3(a) 是透明接触器件的透射谱, 图 3(b) 是隧穿接触器件的自旋分辨透射谱. 左边一列对应两种器件的自旋向上通道, 右边一列对应自旋向下通道. 当左边

的 Fe_3GeTe_2 电极注入一个具有横向动量 k_x 的电子, 在不考虑散射的情况下, 只有当右边石墨烯电极在同样的横向动量 k_x 具有可用的电子态时, 来自左电极的电子才能有效透射过中心区^[30]. 而石墨烯在费米面附近只有在狄拉克锥上才具有可用电子态, 所以只有在狄拉克锥附近区域的电子才能对输运起贡献. 在本文的器件中, 由于选取了 $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ 的石墨烯超胞, 狄拉克锥附近对应布里渊区的 Γ 点附近. 而正如图 3 所示, 两种器件的自旋向下和自旋向上通道的透射系数在 Γ 点 ($k_x = 0$) 附近都具有明显的石墨烯能带的狄拉克锥特征. 而且, 在透明接触器件中除了狄拉克锥型区域外, 还具有呈现带状的高透射区域. 而在隧穿接触器件中, 除了狄拉克锥区域以外, 其他区域的贡献都小到可以忽略.

为了对这些特征有一个深入了解, 本文研究了 Fe_3GeTe_2 /石墨烯异质结和 Fe_3GeTe_2 /氮化硼/石墨烯异质结的能带特征, 如图 4 所示. 在两种异质结中, 费米面和石墨烯狄拉克锥的相对位置都有一些偏移, 这是由于金属和半导体层状材料的接触形成肖特基势垒造成的影响. 结合图 4(a) 和图 3(a) 分析可知, 在透明接触器件中的带状的高透射区域

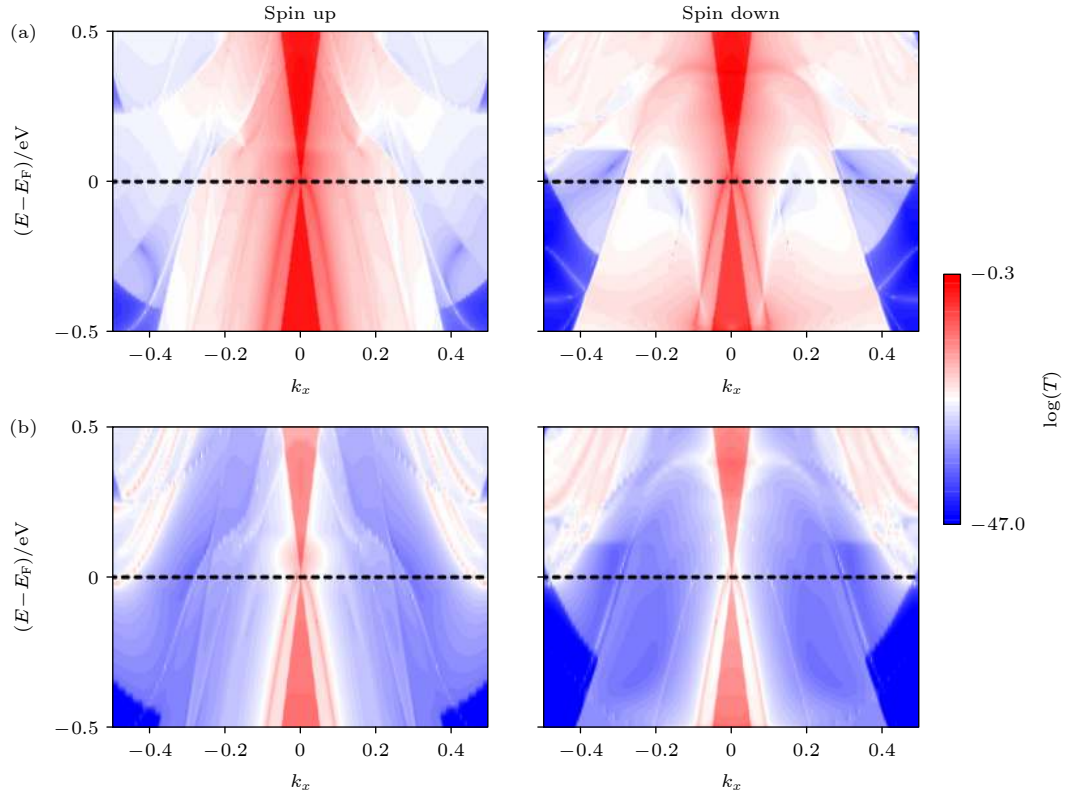


图 3 (a) 透明接触器件和 (b) 隧穿接触器件的透射谱, 其中左边一列是自旋向上通道的透射谱, 右边一列是自旋向下通道的透射谱
Fig. 3. Transmission spectra of (a) the transparent contact devices and (b) the tunneling contact devices. The left column is the transmission spectra of the spin up channel and the right column is the transmission spectra of the spin down channel.

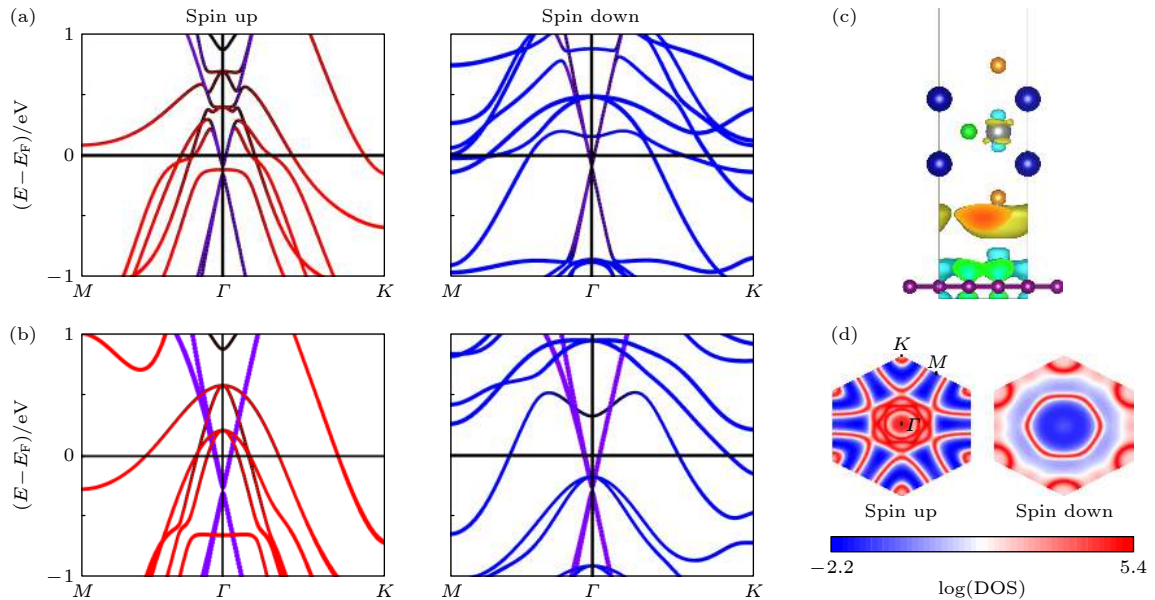


图 4 (a) Fe_3GeTe_2 /石墨烯异质结能带; (b) Fe_3GeTe_2 /氮化硼/石墨烯异质结能带; (c) Fe_3GeTe_2 /石墨烯异质结差分电荷密度, 其中绿色代表电子损耗, 黄色代表电子积聚; (d) 费米能级上 k 点依赖的 Fe_3GeTe_2 态密度分布; 图 4(a) 和图 4(b) 中左边一列为自旋向上能带, 右边一列为自旋向下能带

Fig. 4. (a) Band structure of Fe_3GeTe_2 /graphene heterojunction; (b) band structure of Fe_3GeTe_2 /boron nitride/graphene heterojunction; (c) the differential charge density of Fe_3GeTe_2 /graphene heterojunction, where the green and yellow represent electron depletion and accumulation respectively; (d) the k dependent density of states distribution at the Fermi level in Fe_3GeTe_2 . In Fig. 4(a) and Fig. 4(b), the left column represents the spin up bands, and the right column represents the spin down bands.

其实源自 Fe_3GeTe_2 分辨自旋的能带特征. 因此, 可以得出结论透明接触器件的输运特性主要受 Fe_3GeTe_2 和石墨烯在费米面附近能带排布的影响. 如图 4(a) 的 Fe_3GeTe_2 /石墨烯异质结能带结构所示, 在费米面附近 Fe_3GeTe_2 自旋向上能带与石墨烯的狄拉克锥发生了明显的杂化, 形成了导电通道 (图 4(a)). 而 Fe_3GeTe_2 自旋向下能带和石墨烯的狄拉克锥则没有明显的杂化, 只有在更高能量处 (0.15 eV) 才发生了能带的交缠. 这些特征可以很好地解释在低偏压下 Fe_3GeTe_2 中的自旋向下电流很小, 而 ± 0.3 V 偏压下增长迅速, 降低了自旋注入效率. 而 Fe_3GeTe_2 与石墨烯之间的轨道杂化是由于异质结界面电荷转移造成的. 如图 4(c) 差分电荷密度所示, 石墨烯的 p_z 轨道损耗电子而 Fe_3GeTe_2 的 d_{z^2} 轨道积聚电子, 在界面上电荷重分配, 造成石墨烯狄拉克锥和 Fe_3GeTe_2 自旋向上能带的杂化. 此外, 在隧穿接触器件中, 输运特性仅受石墨烯狄拉克锥区域内的 Fe_3GeTe_2 能带影响. 在 Fe_3GeTe_2 /氮化硼/石墨烯异质结中, 情况和透明接触不一样. 由于隧穿层氮化硼的存在, Fe_3GeTe_2 与石墨烯之间不会发生直接的轨道杂化. 因此, Fe_3GeTe_2 中自旋极化的电子需要隧穿注入到石墨烯中. 然而, 正如图 4(b) 所示, Fe_3GeTe_2 在狄拉克锥附近只有自旋向上的能带穿过了费米能级. 这种特征意味着 Fe_3GeTe_2 只会隧穿注入自旋向上的电子到石墨烯中. 而且, 这种特征在费米面附近的一定能量范围内都能保持. 因此, 隧穿器件能够在更大的偏压范围内实现高效地注入自旋到石墨烯中. 为了证实这个推断, 本文计算了费米能级上 k 点依赖的 Fe_3GeTe_2 态密度分布, 如图 4(d) 所示. 可以看到, 在费米面上的 Γ 点附近, 只有自旋向上的电子态分布, 没有自旋向下可用的电子态. 这证明了在隧穿器件中, 只有自旋向上电子能隧穿注入到石墨烯中.

4 结 论

本文基于密度泛函理论结合非平衡态格林函数研究了单层二维铁磁材料 Fe_3GeTe_2 对石墨烯自旋注入的结果. 结果表明在没有氮化硼作为隧穿层的情况下, 由于 Fe_3GeTe_2 自旋向上的能带与石墨烯的狄拉克锥能带在费米面附近发生了轨道杂化, 导致透明接触器件在低偏压下可以有效注入自旋

极电流到石墨烯中. 在使用氮化硼作为隧穿层的情况下, 由于 Fe_3GeTe_2 在石墨烯狄拉克锥区域只有自旋向上的能带位于费米能级附近, 使得只有自旋向上的电子隧穿注入到石墨烯中, 这让隧穿接触器件能在 $[-0.3$ V, 0.3 V] 偏压范围内都能实现高效自旋注入. 本文的这些结果, 将有助于理解 Fe_3GeTe_2 /石墨烯异质结的输运特性, 推动全二维自旋逻辑器件的发展.

参考文献

- [1] Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, Jiang D, Zhang Y, Dubonos S V, Grigorieva I V, Firsov A A 2004 *Science* **306** 666
- [2] Li M, Su S, Wong H, Li L J 2019 *Nature* **567** 169
- [3] Geim A K, Grigorieva I V 2013 *Nature* **499** 419
- [4] Žutić I, Matos-Abiad A, Scharf B, Dery H, Belashchenko K 2019 *Mater. Today* **22** 85
- [5] Gong C, Li L, Li Z, Ji H, Stern A, Xia Y, Cao T, Bao W, Wang C, Wang Y, Qiu Z Q, Cava R J, Louie S G, Xia J, Zhang X 2017 *Nature* **546** 265
- [6] Huang B, Clark G, Navarro-Moratalla E, Klein D R, Cheng R, Seyler K L, Zhong D, Schmidgall E, McGuire M A, Cobden D H, Yao W, Xiao D, Jarillo-Herrero P, Xu X 2017 *Nature* **546** 270
- [7] Deng Y J, Yu Y, Song Y C, Zhang J Z, Wang N Z, Sun Z Y, Yi Y F, Wu Y Z, Wu S W, Zhu J Y, Wang J, Chen X H, Zhang Y B 2018 *Nature* **563** 94
- [8] Bonilla M, Kolekar S, Ma Y, Diaz H C, Kalappattil V, Das R, Eggers T, Gutierrez H R, Phan M, Batzill M 2018 *Nat. Nanotechnol.* **13** 289
- [9] Yu W, Li J, Heng T S, Wang Z, Zhao X, Chi X, Fu W, Abdelwahab I, Zhou J, Dan J, Chen Z, Chen Z, Li Z, Lu J, Pennycook S J, Feng Y P, Ding J, Loh K P 2019 *Adv. Mater.* **31** 1903779
- [10] Fei Z, Huang B, Malinowski P, Wang W, Song T, Sanchez J, Yao W, Xiao D, Zhu X, May A F, Wu W, Cobden D H, Chu J, Xu X 2018 *Nat. Mater.* **17** 778
- [11] Jiang S, Li L, Wang Z, Mak K F, Shan J 2018 *Nat. Nanotechnol.* **13** 549
- [12] Jiang S, Shan J, Mak K F 2018 *Nat. Mater.* **17** 406
- [13] Huang B, Clark G, Klein D R, MacNeill D, Navarro-Moratalla E, Seyler K L, Wilson N, McGuire M A, Cobden D H, Xiao D, Yao W, Jarillo-Herrero P, Xu X 2018 *Nat. Nanotechnol.* **13** 544
- [14] Song T C, Cai X H, Tu M W Y, Zhang X O, Huang B V, Wilson N P, Seyler K L, Zhu L, Taniguchi T, Watanabe K, McGuire M A, Cobden D H, Xiao D, Yao W, Xu X D 2018 *Science* **360** 1214
- [15] Wang X, Tang J, Xia X, He C, Zhang J, Liu Y, Wan C, Fang C, Guo C, Yang W, Guang Y, Zhang X, Xu H, Wei J, Liao M, Lu X, Feng J, Li X, Peng Y, Wei H, Yang R, Shi D, Zhang X, Han Z, Zhang Z, Zhang G, Yu G, Han X 2019 *Sci. Adv.* **5** w8904
- [16] Alghamdi M, Lohmann M, Li J, Jothi P R, Shao Q, Aldosary M, Su T, Fokwa B P T, Shi J 2019 *Nano Lett.* **19** 4400
- [17] Burch K S, Mandrus D, Park J 2018 *Nature* **563** 47
- [18] Lin X, Yang W, Wang K, Zhao W 2019 *Nat. Electron.* **2** 274

- [19] Gong C, Zhang X 2019 *Science* **363** v4450
- [20] Dlubak B, Martin M, Deranlot C, Servet B, Xavier S, Mattana R, Sprinkle M, Berger C, De Heer W A, Petroff F, Anane A, Seneor P, Fert A 2012 *Nat. Phys.* **8** 557
- [21] Wang Z, Sapkota D, Taniguchi T, Watanabe K, Mandrus D, Morpurgo A F 2018 *Nano Lett.* **18** 4303
- [22] Li X, Lü J, Zhang J, You L, Su Y, Tsymbal E Y 2019 *Nano Lett.* **19** 5133
- [23] Zhang L, Huang X, Dai H, Wang M, Cheng H, Tong L, Li Z, Han X, Wang X, Ye L, Han J 2020 *Adv. Mater.* **32** 2002032
- [24] Wang H, Liu Y, Wu P, Hou W, Jiang Y, Li X, Pandey C, Chen D, Yang Q, Wang H, Wei D, Lei N, Kang W, Wen L, Nie T, Zhao W, Wang K L 2020 *ACS Nano* **14** 10045
- [25] May A F, Ovchinnikov D, Zheng Q, Hermann R, Calder S, Huang B, Fei Z, Liu Y, Xu X, McGuire M A 2019 *ACS Nano* **13** 4436
- [26] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [27] Taylor J, Guo H, Wang J 2001 *Phys. Rev. B* **63** 245407
- [28] Brandbyge M, Mozos J, Ordejon P, Taylor J, Stokbro K 2002 *Phys. Rev. B* **65** 165401
- [29] Yang W, Cao Y, Han J, Lin X, Wang X, Wei G, Lv C, Bournel A, Zhao W 2021 *Nanoscale* **13** 862
- [30] Maassen J, Ji W, Guo H 2011 *Nano Lett.* **11** 151

SPECIAL TOPIC—Two-dimensional magnetic materials

Efficient spin injection in Fe₃GeTe₂/h-BN/graphene heterostructure^{*}

Yang Wei[#] Han Jiang-Chao[#] Cao Yuan Lin Xiao-Yang[†] Zhao Wei-Sheng

(School of Integrated Circuit Science and Engineering, Beihang University, Beijing 100191, China)

(Received 15 December 2020; revised manuscript received 3 January 2021)

Abstract

Recently, the discovery of intrinsic two-dimensional (2D) ferromagnetism has accelerated the application of spintronics in ultra-low power electronic device. Particularly, the Curie temperature of Fe₃GeTe₂ can be improved to room-temperature in several ways, such as interfacial exchange coupling and ionic liquid gating, which makes Fe₃GeTe₂ desirable for the practical application. In this work, we investigate the transport properties of Fe₃GeTe₂/graphene heterostructures with or without h-BN layers by utilizing the density functional theory combined with nonequilibrium Green's function method. The results show that due to electronic orbital hybridization, the spin can be effectively injected into graphene with ± 0.1 V bias at the transparent contact interface of Fe₃GeTe₂/graphene. What is more, the efficient spin tunneling injection can be achieved in a wider bias range $[-0.3$ V, 0.3 V] by adding h-BN as a tunneling layer, where the spin filter effect that is induced by mismatched distribution of spin-dependent electronic states in the Brillouin zone, leads a spin polarizability to approach 100%. These results are helpful in the applications of 2D all-spin logic and the development of ultra-low power spintronic devices.

Keywords: two-dimensional magnet, spin injection, spin filter effect, first principles calculation

PACS: 91.60.Pn, 73.22.-f, 73.40.Gk, 73.20.At

DOI: 10.7498/aps.70.20202136

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51602013, 12004021), the Young Elite Scientists Sponsorship Program by China Association for Science and Technology (CAST) (Grant No. 2018QNRC001), the International Collaboration 111 Project, China (Grant No. B16001), the Fundamental Research Funds for the Central Universities of China, and the Beijing Advanced Innovation Centre for Big Data and Brain Computing (BDBC).

[#] These authors contributed equally.

[†] Corresponding author. E-mail: XYLin@buaa.edu.cn