

单晶二维材料势垒层磁性隧道结温度效应的理论研究

方贺男,孙星宇,吕涛涛,吕杰

(南京邮电大学 电子与光学工程学院,南京 210023)

摘要:基于传统光学衍射理论构建了适用于单晶势垒层磁性隧道结的理论模型.该理论模型将单晶势垒层视作周期性的衍射光栅,所以可以计入单晶势垒层对隧穿电子散射产生的相干性.利用此理论,研究了单晶二维材料势垒层磁性隧道结的温度效应.理论结果表明,由于隧穿电子波为势垒层散射而具有强相干性,所以隧穿电阻和 TMR 会随温度非单调变化.这解释了已有的实验结果,并阐明了其物理机制.此外,还研究了晶格畸变对单晶二维材料势垒层磁性隧道结温度特性的影响.这些研究结果为优化单晶二维材料势垒层磁性隧道结的温度特性奠定了坚实的理论基础.

关键词:磁性隧道结;隧穿磁阻效应;二维材料;温度效应;自旋电子学

中图分类号:O484.3

文献标志码:A

在自旋电子学领域中,磁性隧道结由于有潜力成为下一代磁性随机存储器的基本元件^[1-5],因此是人们研究的热点问题.磁性隧道结具有一个类似于三明治的结构,即两铁磁电极中间夹着绝缘势垒层.当两铁磁电极磁化强度平行时,磁性隧道结的隧穿电阻较小;当两铁电极磁化强度反平行时,磁性隧道结的隧穿电阻较大.像上述隧穿电阻随两个铁磁电极磁化强度方向的相对变化而改变的特性被称为隧穿磁阻效应.通常,人们定义隧穿磁阻效应的大小(tunneling magnetoresistance, TMR)为 $(G_P - G_{AP})/G_{AP}$,其中, G_P 和 G_{AP} 分别是两铁磁电极磁化强度平行与反平行时的隧穿电导.在物理上,TMR 的大小可以表征隧穿磁阻效应的强弱.

在早期的磁性隧道结研究中,势垒层大多是由 Al_2O_3 ^[6-7], MgO ^[8-10]制备的.但是,基于上述材料作为势垒层的磁性隧道结的制备工艺比较复杂,因而成本较高.随着单层石墨烯的成功剥离^[11],二维材料因其具有优异的物理性能而受到人们的密切关注^[12-14].由于单晶二维材料可通过简单易操作的机械剥离法来制备,所以有潜力作为低成本磁性隧道结的势垒层材料.于是,近年来人们对基于单晶二维材料势垒层的磁性隧道结进行了广泛研究^[15-23],并发现了很多新奇的物理特性.特别地,文献[18]发现在 $NiFe/MoS_2/NiFe$ 磁性隧道结中 TMR 并不是随温度单调变化的.这与传统 MgO 基磁性隧道结的温度特性不同.在理论上,文献[18]并未对该实验现象进行解释.因此,亟须一个适用于单晶二维材料势垒层磁性隧道结的理论来对上述现象的物理机制进行阐明.

之前,本课题组提出了一个适用于单晶势垒层磁性隧道结的理论^[24-25].该理论基于传统的光学衍射理论,将单晶势垒层视作周期性的衍射光栅.因此,它可以很好地计入单晶势垒层对隧穿电子散射产生的相干性.此理论模型已经较好地解释了单晶 MgO 基磁性隧道结的厚度振荡效应、半金属铁磁电极效应、偏压效应以及温度效应.本文将该理论模型应用于单晶二维材料势垒层磁性隧道结中,并在理论上计算了 TMR 的温度特性曲线.该理论可以较好地解释文献[18]的实验结果并阐明其物理机制.

1 模型简介

首先,假设单晶势垒层的每个格点处原子势为 $\nu(r)$,势垒层的原子层数为 n ,则势垒层的周期势

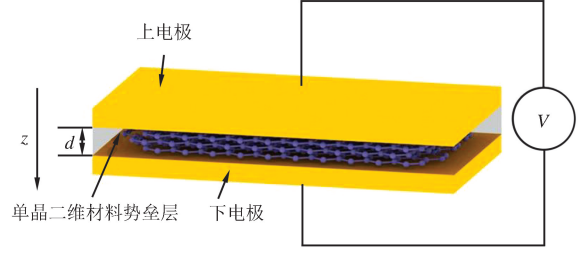
收稿日期:2020-11-11;修回日期:2021-02-08.

基金项目:国家自然科学基金(11704197)

作者简介(通信作者):方贺男(1984—),男,黑龙江哈尔滨人,南京邮电大学副教授,研究方向为凝聚态物理学,E-mail:fanghn@njupt.edu.cn.

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{l_3=0}^{n-1} \sum_{\mathbf{R}_h} \nu(\mathbf{r} - \mathbf{R}_h - l_3 \mathbf{a}_3), \quad (1)$$

其中, \mathbf{R}_h 是势垒层内的晶格矢量: $\mathbf{R}_h = l_1 \mathbf{a}_1 + l_2 \mathbf{a}_2$, 其中 \mathbf{a}_1 和 \mathbf{a}_2 是势垒层内的两个初基平移矢量, l_1 和 l_2 为其相应的整数, \mathbf{a}_3 是层间的初基平移矢量, l_3 为相应的整数. 这里, 如图 1 所示, 定义 z 轴的正方向是由上电极指向下电极的, 即 $\mathbf{e}_z = \mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2 / |\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2|$, 易知隧穿电流方向是沿着 z 轴的负方向的.



d 和 V 分别为势垒层的厚度和施加的偏压.

图1 单晶二维材料势垒层磁性隧道结示意图

Fig. 1 An illustration of the magnetic tunnel junctions with single crystal 2D-material barrier

根据文献[24]所述, 温度对单晶势垒层磁性隧道结隧穿磁阻效应的影响来源于其对单晶势垒层周期势场的修正. 具体来说, 温度影响势垒层的晶格畸变, 进而改变了势垒层的周期势场. 根据 Bethe 理论、双束近似方法、帕特森函数方法以及文献[24], 晶格畸变对原子势 $\nu(\mathbf{r})$ 的傅里叶变换 $\nu(\mathbf{K}_h)$ 的修正如下:

$$\nu(\mathbf{K}_h) = \left(1 + 2 \frac{\sigma}{1-\sigma} \cos(\mathbf{K}_h \cdot \alpha) \right) (1-\sigma) \nu_0(\mathbf{K}_h), \quad (2)$$

其中 \mathbf{K}_h 是面内晶格矢量 \mathbf{R}_h 的倒格矢, σ 为缺陷浓度, α 为应变, $\nu_0(\mathbf{K}_h)$ 是理想单晶势垒层原子势的傅里叶变换

$$\nu_0(\mathbf{K}_h) = \Omega^{-1} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{K}_h \cdot \mathbf{r}}, \quad (3)$$

其中原胞的体积 $\Omega = (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) \cdot \mathbf{a}_3$.

根据文献[26]可知, 应变 α 随温度 T 的关系如下

$$\alpha = \alpha_0 \left(1 - \frac{T}{T_c} \right), T < T_c, \quad (4)$$

其中 α_0 是绝对零温下的应变, T_c 为回复温度.

由(2)式和(4)式可得

$$\nu(\mathbf{K}_h) = \left[1 + 2 \frac{\sigma}{1-\sigma} \cos\left(\mathbf{K}_h \cdot \alpha_0 \left(1 - \frac{T}{T_c} \right)\right) \right] (1-\sigma) \nu_0(\mathbf{K}_h), \quad (5)$$

根据 Bethe 理论、双束近似方法及文献[24], 自旋向上的隧穿电子进入自旋向上通道的透射系数为

$$T_{\uparrow\uparrow}(\mathbf{k}) = \frac{1}{8k_z} \left\{ p_{\uparrow}^z e^{i[p_{\uparrow}^z - (p_{\uparrow}^z)^*]d} + p_{\downarrow}^z e^{i[p_{\downarrow}^z - (p_{\downarrow}^z)^*]d} + q_{\uparrow}^z e^{i[q_{\uparrow}^z - (q_{\uparrow}^z)^*]d} + q_{\downarrow}^z e^{i[q_{\downarrow}^z - (q_{\downarrow}^z)^*]d} + [p_{\uparrow}^z e^{i[p_{\uparrow}^z - (p_{\downarrow}^z)^*]d} + p_{\downarrow}^z e^{i[p_{\downarrow}^z - (p_{\uparrow}^z)^*]d} - q_{\uparrow}^z e^{i[q_{\uparrow}^z - (q_{\downarrow}^z)^*]d} - q_{\downarrow}^z e^{i[q_{\downarrow}^z - (q_{\uparrow}^z)^*]d}] + c.c. \right\}, \quad (6)$$

式中 \mathbf{k} 是隧穿电子的入射波矢, k_z 是其在 z 方向上的分量, d 是单晶二维材料势垒层的厚度, 其中

$$p_{\pm}^z = [\mathbf{k}^2 - \mathbf{k}_h^2 \pm 2m\hbar^{-2}\nu(\mathbf{K}_h)]^{1/2}, \quad (7a)$$

$$q_{\pm}^z = [\mathbf{k}^2 - (\mathbf{k}_h + \mathbf{K}_h)^2 \pm 2m\hbar^{-2}\nu(\mathbf{K}_h)]^{1/2}, \quad (7b)$$

这里 \mathbf{k}_h 是 \mathbf{k} 的面内分量.

由 $T_{\uparrow\uparrow}$ 可以得到自旋向上的隧穿电子进入自旋向上通道的电导

$$G_{\uparrow\uparrow} = \frac{e^2}{16\pi^3 \hbar} \int_0^{\pi/2} d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi k_{F\uparrow}^2 \sin(2\theta) T_{\uparrow\uparrow}(k_{F\uparrow}, \theta, \varphi), \quad (8)$$

(8)式中 e 表示电子电荷, θ 表示 \mathbf{k} 和 \mathbf{e}_z 之间的角度, φ 表示 \mathbf{k}_h 和 \mathbf{a}_1 之间的角度, $k_{F\uparrow}$ 是自旋向上电子的费米波矢.

同理, $G_{\downarrow\downarrow}$, $G_{\uparrow\downarrow}$ 和 $G_{\downarrow\uparrow}$ 也可以通过类似的方法获得, 由此可以得到 $G_P = G_{\uparrow\uparrow} + G_{\downarrow\downarrow}$, $G_{AP} = G_{\uparrow\downarrow} + G_{\downarrow\uparrow}$, $R_P = G_P^{-1}$, $R_{AP} = G_{AP}^{-1}$, 最后得到 $\text{TMR} = G_P/G_{AP} - 1 = R_{AP}/R_P - 1$.

接下来, 将该理论应用于单晶二维材料势垒层磁性隧道结中, 势垒层材料选取为石墨和 MoS_2 这两种具

有代表性的单晶二维材料,它们的物理参数如下设定:根据文献[27-28],石墨的倒格矢 $\mathbf{K}_h = 2.95 \times 10^{10} \text{ m}^{-1}$, MoS_2 的倒格矢 $\mathbf{K}_h = 2.296 \times 10^{10} \text{ m}^{-1}$. 因为 $\nu(\mathbf{K}_h)$ 与能隙近似成正比,而石墨和 MoS_2 的能隙分别约为 1 eV 和 1.9 eV^[22-23],所以本文设定石墨和 MoS_2 的 $\nu_0(\mathbf{K}_h)$ 为 2 eV 和 4 eV. 依据常用铁磁电极材料的参数^[24],本文中化学势 μ 设定为 11 eV,半交换劈裂能 Δ 设定为 10 eV.

2 数值结果

因为温度对隧穿磁阻效应的影响体现在对势垒层周期势傅里叶变换 $\nu(\mathbf{K}_h)$ 的修正上,所以我们首先计算了在不同势垒层厚度下, R_P 和 R_{AP} 随 $\nu(\mathbf{K}_h)$ 变化的曲线,结果如图 2 所示. 其中,图 2(a) 和图 2(b) 分别为石墨势垒层磁性隧道结和 MoS_2 势垒层磁性隧道结的结果. 从图 2 中可以看出,两种磁性隧道结的 R_P 和 R_{AP} 均随 $\nu(\mathbf{K}_h)$ 振荡. 这是因为,根据(6)式可知,隧穿电子波被周期性势垒散射后,会使不同分波间产生干涉,进而导致透射系数的振荡. 另外,由图 2(a) 可以看出,石墨势垒层磁性隧道结 R_{AP} 的曲线呈峰状,与正弦型曲线差别较大. 该现象可作如下解释:由于石墨势垒层的 $\nu(\mathbf{K}_h)$ 较小,根据(6)~(7)式可知,此时 G_{AP} 的直流分量较小,进而导致 R_{AP} 的振荡曲线呈峰状. 同时,从图 2(a) 还可以看出, R_{AP} 的峰高随势垒厚度 d 的增大而增大. 这是因为,当势垒厚度 d 增大时,由(6)式可知,透射系数中的衰减项的衰减系数越大,进而导致 R_{AP} 的峰高增大. 最后,从图 2(b) 中可以看出, MoS_2 势垒层厚度越大,其振荡的周期会越小. 这是因为,根据(6)式可知,势垒厚度 d 越大,振荡的相位变化 2π 所需 $p_+^z - p_-^z$ 和 $q_+^z - q_-^z$ 的变化越小,进而所需 $\nu(\mathbf{K}_h)$ 的变化越小.

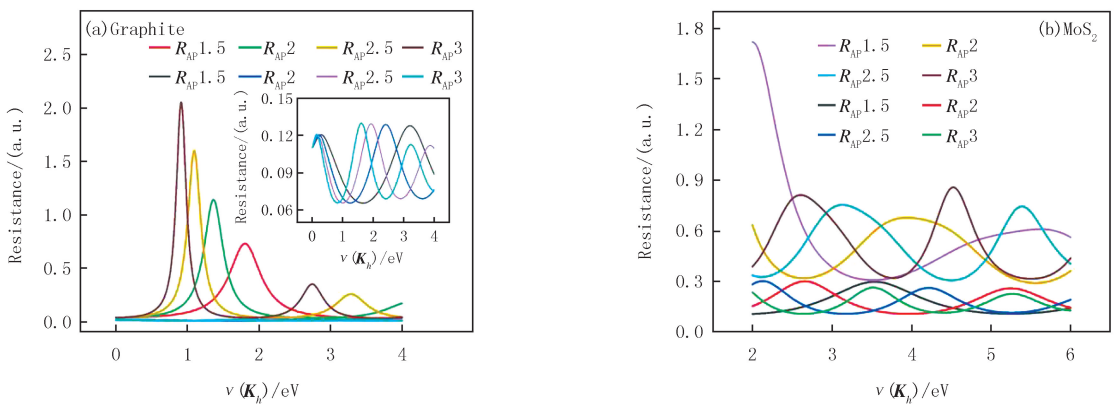


图2 不同势垒层厚度下势垒层磁性隧道结的隧穿电阻随 $\nu(\mathbf{K}_h)$ 的变化曲线

Fig. 2 Tunneling resistance of magnetic tunnel junctions as functions of $\nu(\mathbf{K}_h)$ under different barrier thickness

基于上述分析可知, R_P 和 R_{AP} 会随 $\nu(\mathbf{K}_h)$ 振荡,同时,通过(5)式可知, $\nu(\mathbf{K}_h)$ 在 $0 \text{ K} \sim T_c$ 区间内随温度升高单调递增,因此, R_P 和 R_{AP} 也会随温度振荡,这可以解释文献[18]中 TMR 随温度非单调变化的实验结果,并阐明了该现象的物理机制为势垒层晶格畸变对隧穿周期势的修正.

接下来,将进一步研究晶格畸变的物理参数对隧穿磁阻效应的影响. 首先,计算 $T = 10 \text{ K}$ 时石墨势垒层磁性隧道结和 MoS_2 势垒层磁性隧道结隧穿电阻随应变的变化曲线,结果分别如图 3(a) 和图 3(b) 所示. 其中, $\mathbf{K}_h \cdot \alpha_0$ 的变化区间为 $(\pi/6) \sim (\pi/2)$, $\sigma = 0.1$, $T_c = 1000 \text{ K}$, $d = 1.5 \text{ nm}$. 从图 3(a) 和 3(b) 中可以看出,石墨势垒层磁性隧道结的 R_P 随应变几乎不变,而 R_{AP} 随应变单调上升; MoS_2 势垒层磁性隧道结的 R_P 随应变单调上升,而 R_{AP} 随应变单调下降. 这是因为应变会改变 $\nu(\mathbf{K}_h)$,而 $\nu(\mathbf{K}_h)$ 的变化会改变隧穿电阻. 具体地,计算石墨势垒层磁性隧道结和 MoS_2 势垒层磁性隧道结的 $\nu(\mathbf{K}_h)$ 随应变的变化曲线,分别如图 4(a) 和图 4(b) 所示,可以看出,当 $\mathbf{K}_h \cdot \alpha_0$ 从 $\pi/6$ 增加到 $\pi/2$ 时,石墨的 $\nu(\mathbf{K}_h)$ 从 2.15 eV 单调减小到 1.81 eV, MoS_2 的 $\nu(\mathbf{K}_h)$ 从 4.29 eV 单调减小到 3.62 eV. 在数学上,由图 4 和图 2 就可以得到图 3(a) 和图 3(b). 图 3(c) 和图 3(d) 分别是石墨势垒层磁性隧道结和 MoS_2 势垒层磁性隧道结在不同应变下, R_P 和 R_{AP} 随温度的变化曲线. 从图 3(c) 和图 3(d) 中可以看出,石墨势垒层磁性隧道结的 R_P 随温度几乎不变,而 R_{AP} 显著依赖于温度,这

是因为相比于 R_P , R_{AP} 对 $\nu(\mathbf{K}_h)$ 更敏感. 与石墨势垒层磁性隧道结不同, MoS_2 势垒层磁性隧道结隧的 R_P 和 R_{AP} 均显著依赖于温度, 这是因为此时 R_P 和 R_{AP} 均对 $\nu(\mathbf{K}_h)$ 较敏感. 此外, 从图 3(c) 和图 3(d) 中还可以看出, 当应变增大时, R_P 和 R_{AP} 对温度更敏感. 这是因为, 由(5)式可知, 应变越大, $\nu(\mathbf{K}_h)$ 对温度越敏感.

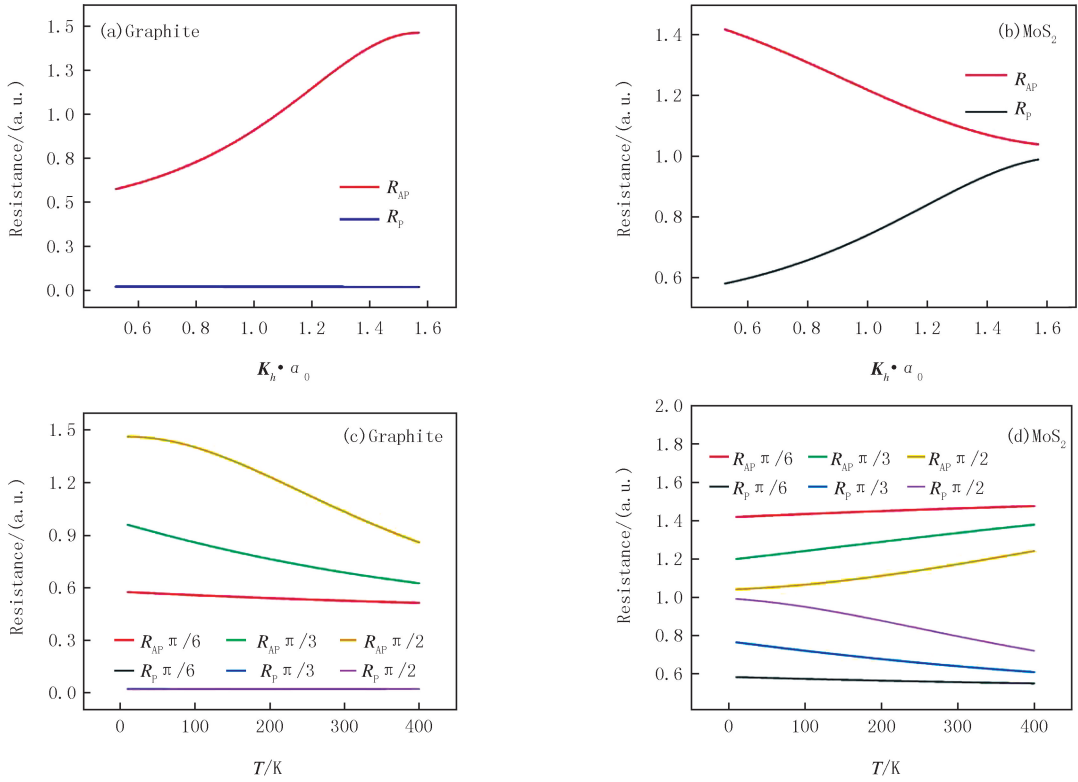


图3 势垒层磁性隧道结的隧穿电阻随 $K_h \cdot a_0$ 及温度(不同 $K_h \cdot a_0$) 的变化曲线

Fig.3 Tunneling resistance of magnetic tunnel junctions as function of $K_h \cdot a_0$ and as functions of temperature under different $K_h \cdot a_0$

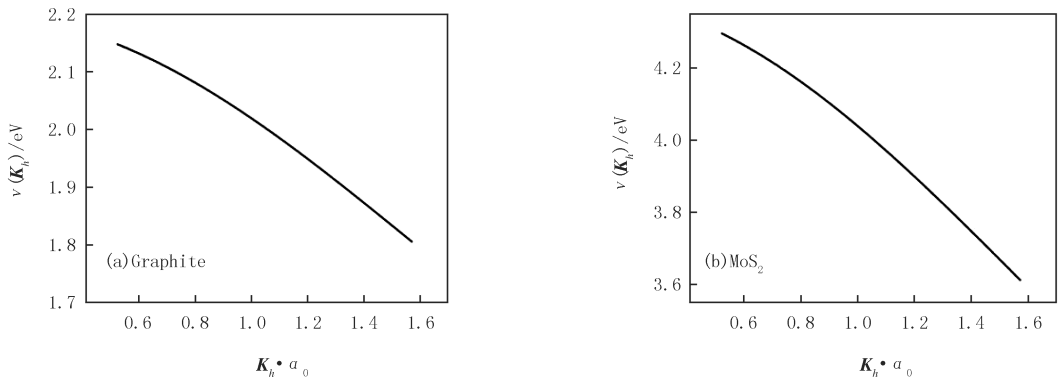


图4 势垒层磁性隧道结的 $\nu(\mathbf{K}_h)$ 随 $K_h \cdot a_0$ 的变化曲线

Fig.4 $\nu(\mathbf{K}_h)$ of magnetic tunnel junctions barrier as functions of $K_h \cdot a_0$

其次, 计算 $T=10$ K 石墨势垒层磁性隧道结和 MoS_2 势垒层磁性隧道结隧穿电阻随 σ 变化的曲线, 结果如图 5(a) 和图 5(b) 所示. 其中, σ 的变化区间为 $0.05 \sim 0.15$, $K_h \cdot a_0 = \pi/3$, $T_c = 1000$ K, $d = 1.5$ nm. 从图 5(a) 和 5(b) 中可以看出, 两种磁性隧道结的 R_P 和 R_{AP} 几乎均不随 σ 改变. 为了说明该现象, 计算了石墨势垒层磁性隧道结和 MoS_2 势垒层磁性隧道结的 $\nu(\mathbf{K}_h)$ 随缺陷浓度 σ 变化的曲线, 分别如图 6(a) 和图 6(b) 所示, 从图 6 中可以看出, $\nu(\mathbf{K}_h)$ 几乎不随 σ 改变. 这可以如下解释. 根据(5)式可得

$$\nu(\mathbf{K}_h) = \nu_0(\mathbf{K}) + \nu_0(\mathbf{K}) \left[2\cos\left(\mathbf{K} \cdot \alpha_0 \left(1 - \frac{T}{T_c}\right)\right) - 1 \right] \sigma. \quad (9)$$

(9)式表明 $\nu(\mathbf{K})$ 和 σ 之间存在线性关系.在当前的参数下,斜率很小,因此当 σ 变化时, $\nu(\mathbf{K})$ 几乎不变,隧穿电阻也随之几乎不变.图 5(c)和图 5(d)分别对应于石墨势垒层磁性隧道结和 MoS_2 势垒层磁性隧道结在不同的 σ 下隧穿电阻随温度变化的曲线.从图 5(c)和图 5(d)中可以看出,缺陷浓度 σ 对温度特性的影响与应变类似,这里不再赘述.

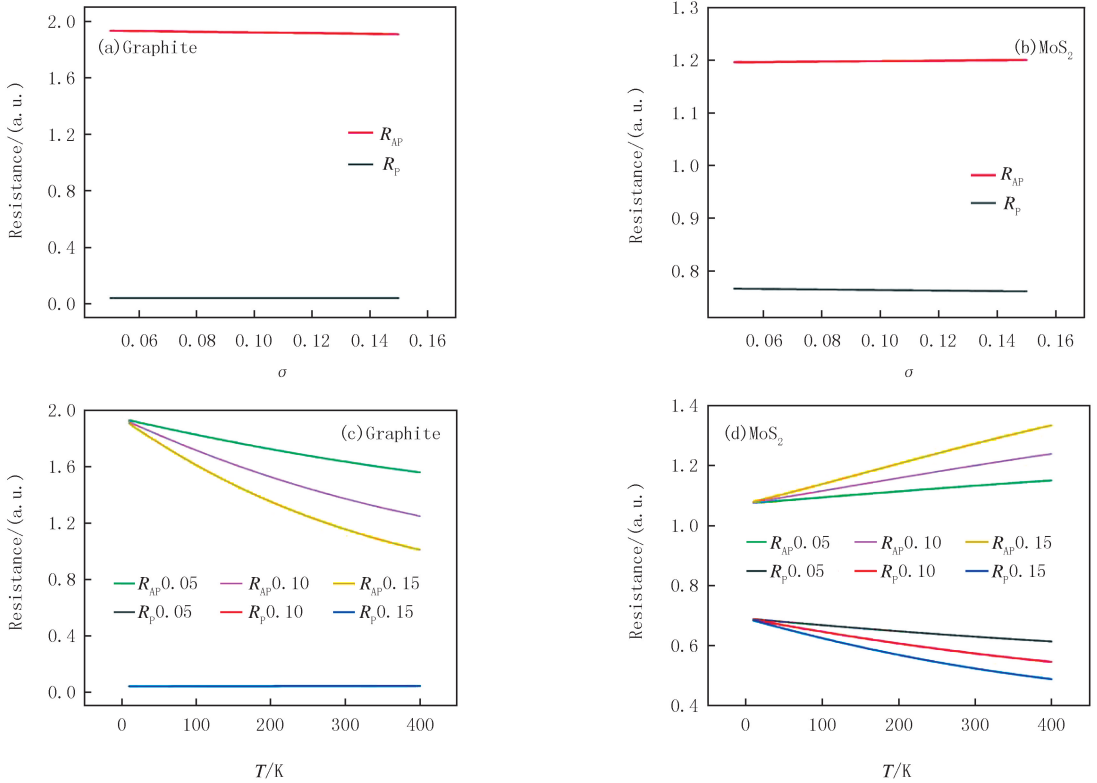


图5 势垒层磁性隧道结的隧穿电阻随 σ 及不同 σ 下随温度的变化曲线

Fig.5 Tunneling resistance of magnetic tunnel junctions as functions of σ and as functions of temperature under different σ

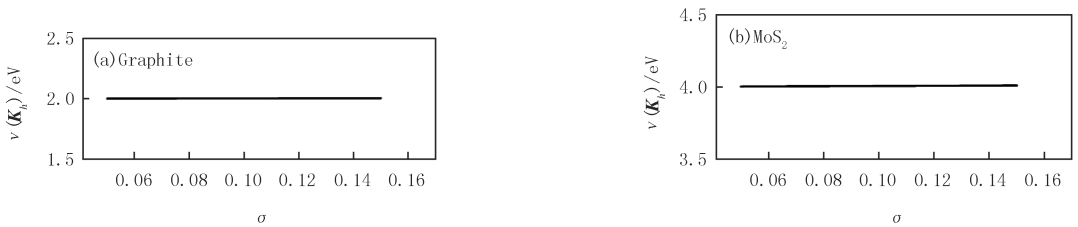


图6 势垒层磁性隧道结的 $\nu(\mathbf{K}_h)$ 随 σ 的变化曲线

Fig.6 $\nu(\mathbf{K}_h)$ of magnetic tunnel junctions as functions of σ

然后,计算 $T=10\text{ K}$ 时石墨势垒层磁性隧道结和 MoS_2 势垒层磁性隧道结隧穿电阻随 T_c 的变化曲线,结果如图 7(a)和图 7(b)所示.其中, T_c 的变化区间为 $500\text{ K}\sim 1\,500\text{ K}$, $\mathbf{K} \cdot \alpha_0 = \pi/3$, $\sigma = 0.1$, $d = 1.5\text{ nm}$.从图 7(a)和图 7(b)中可以看出,两种磁性隧道结的 R_P 和 R_{AP} 均几乎不随 T_c 改变.为了说明该现象,计算石墨势垒层磁性隧道结和 MoS_2 势垒层磁性隧道结随 T_c 变化的曲线,分别如图 8(a)和图 8(b)所示.从图 8(a)和图 8(b)中可看出,当 T_c 从 500 K 增加到 $1\,500\text{ K}$ 时, $\nu(\mathbf{K})$ 随 T 变化很缓慢.这是因为,此时 T/T_c 远小于 1,所以由(5)式可知,当 T_c 处于 $500\text{ K}\sim 1\,500\text{ K}$ 区间时, $\nu(\mathbf{K})$ 几乎不随 T_c 改变.从图 7(c)和图 7(d)中可以看出与应变和缺陷浓度不同, T_c 越大, R_P 和 R_{AP} 对温度越不敏感.这是因为,由(5)式可知, T_c 越大, $\nu(\mathbf{K})$ 对

温度越不敏感.

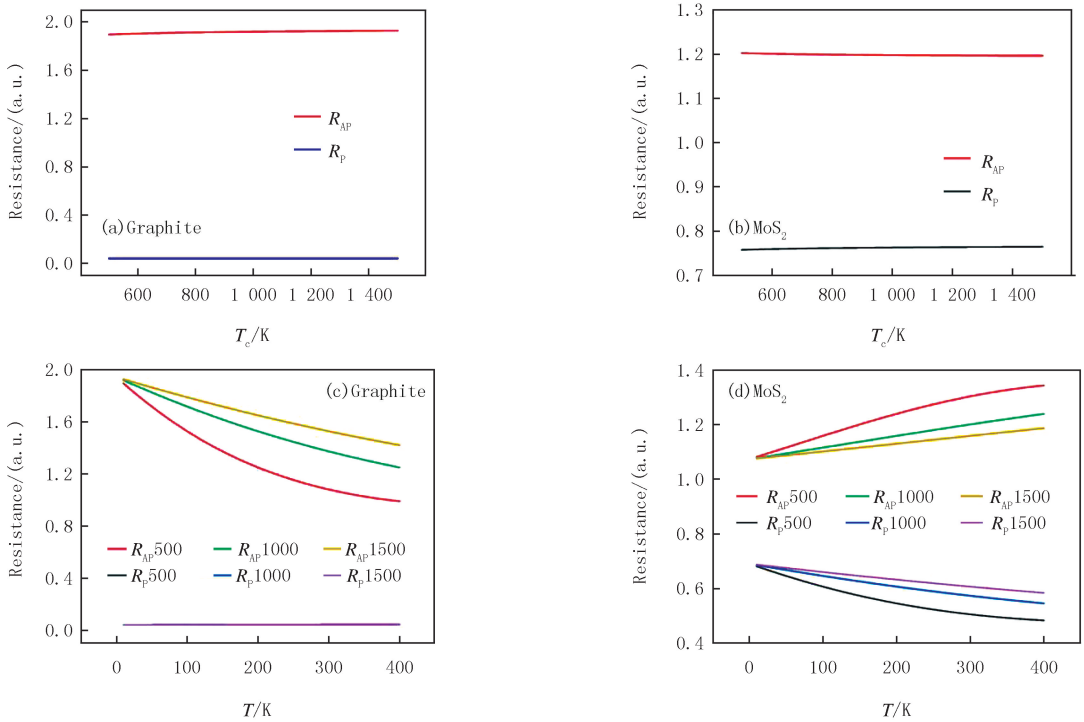


图7 势垒层磁性隧道结的隧穿电阻随 T_c 及不同 T_c 下随温度的变化曲线

Fig. 7 Tunneling resistance of magnetic tunnel junctions as functions of T_c and as functions of temperature under different T_c

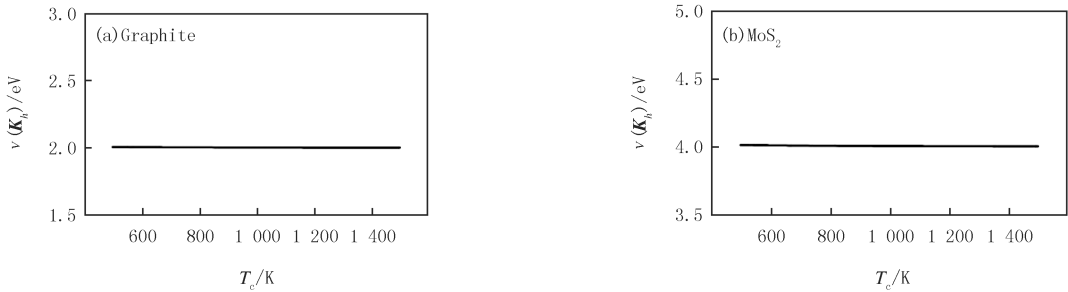


图8 势垒层磁性隧道结的 $v(\mathbf{K}_h)$ 随 T_c 的变化曲线

Fig. 8 $v(\mathbf{K}_h)$ of magnetic tunnel junctions as functions of T_c

最后,为了与文献[18]中的实验结果进行对比,计算 MoS_2 势垒层磁性隧道结隧穿电阻和 TMR 随温度 T 的变化曲线,结果如图 9 所示.其中, $T_c=1\ 000\ \text{K}$, $\mathbf{K}_h \cdot \alpha_0 = \pi/2$, $\sigma=0.15$, $d=3\ \text{nm}$,从图 9 中可以看出, R_P , R_{AP} 和 TMR 均随温度非单调变化.这与文献[18]的实验结果定性符合.

3 结 论

本文构建了适用于单晶势垒层磁性隧道结的理论模型.在该理论中,可以通过考虑单晶周期性势垒层晶格畸变的影响来计入温度对隧穿磁阻效应的修正.因此,本文利用上述理论研究了单晶二维材料势垒层磁性隧道结的温度效应.研究结果发现,由于单晶周期性势垒层对隧穿电子的散射带来的相干性会引起隧穿电阻和 TMR 随周期势 $v(\mathbf{K}_h)$ 振荡,而晶格畸变会导致 $v(\mathbf{K}_h)$ 在 $0\ \text{K} \sim T_c$ 区间内随温度单调递增,所以隧穿电阻和 TMR 也会随温度非单调变化.这解释了已有的实验结果,并阐明了其物理机制.另外,本文还研究了应变、

缺陷浓度和回复温度对单晶二维材料势垒层磁性隧道结的隧穿磁阻效应的影响.结果表明,隧穿电阻显著依赖于应变的程度,而对缺陷浓度和回复温度均不敏感.上述研究结果为单晶二维材料势垒层磁性隧道结温度特性的优化提供了重要的理论支撑.

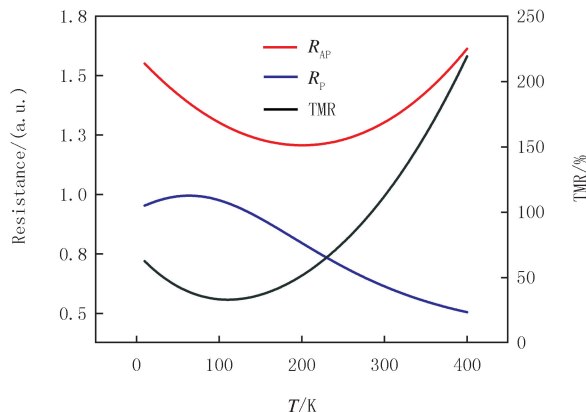


图9 MoS_2 势垒层磁性隧道结的隧穿电阻和TMR随 T 的变化曲线
Fig. 9 Tunneling resistance and TMR of magnetic tunnel junction of MoS_2 barrier as function of T

参 考 文 献

- [1] CHOI M S, LEE G H, YU Y J, et al. Controlled Charge Trapping by Molybdenum Disulphide and Graphene in Ultrathin Heterostructured Memory Devices[J]. Nature Communications, 2013, 4: 1624.
- [2] CHEN E, APALKOV D, DIAO Z, et al. Advances and Future Prospects of Spin-Transfer Torque Random Access Memory[J]. IEEE Transactions on Magnetics, 2010, 46(6): 1873-1878.
- [3] CHAPPERT C, FERT A, VAN D, et al. The Emergence of Spin Electronics in Data Storage[J]. Nature Materials, 2007, 6(11): 813-823.
- [4] JEFFREY R, ROBERT E, FONTANA J R. Magnetic Recording Read Head Sensor Technology[J]. Comptes Rendus Physique, 2005, 6(9): 997-1012.
- [5] ZHU J G, PARK C. Magnetic Tunnel Junctions[J]. Materials Today, 2006, 9(11): 36-45.
- [6] JAGADEESH S, MOODERA, GEORGE M. Spin Polarized Tunneling in Ferromagnetic Junctions[J]. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 1999, 200(1/2/3): 248-273.
- [7] SUEZAWA Y, GONDO Y. Spin-Polarized Electrons and Magnetoresistance in Ferromagnetic Tunnel Junctions and Multilayers[J]. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 1993, 126: 524-526.
- [8] BUTLER W H, ZHANG X G, SCHULTHESS T C, et al. Spin-Dependent Tunneling Conductance of Fe/MgO/Fe Sandwiches[J]. Physical Review B, 2001, 63(5): 054416.
- [9] PARKIN S S P, KAISER C, PANCHULA A, et al. Giant Tunneling Magnetoresistance at Room Temperature with MgO(100) Tunnel Barriers[J]. Nature Materials, 2004, 3(12): 862-867.
- [10] YUASA S, NAGAHAMA T, FUKUSHIMA A, et al. Giant Room-Temperature Magnetoresistance in Single-Crystal Fe/MgO/Fe Magnetic Tunnel Junctions[J]. Nature Materials, 2004, 3(12): 868-871.
- [11] NOVOSELOV K S, GEIM A K, MOROZOV S V, et al. Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films[J]. Science, 2004, 306: 666-669.
- [12] GEIM A K, NOVOSELOV K S. The Rise of Graphene[J]. Nature Materials, 2007, 6(3): 183-191.
- [13] CASTRO NETO A H, GUINEA F, PERES N M R, et al. The Electronic Properties of Graphene[J]. Reviews of Modern Physics, 2009, 81(1): 109-162.
- [14] DAS SARMA S, ADAM S, HWANG E H, et al. Electronic Transport in Two-Dimensional Graphene[J]. Reviews of Modern Physics, 2011, 83(2): 407-470.
- [15] KARPAN V M, GIOVANNETTI G, KHOMYAKOV P A, et al. Graphite and Graphene as Perfect Spin Filters[J]. Physical Review Letters, 2007, 99: 176602.
- [16] PIQUEMAL M, GALCERANA R, CANEVA S, et al. Magnetic Tunnel Junctions with Monolayer Hexagonal Boron Nitride Tunnel Barriers[J]. Applied Physics Letters, 2016, 108: 102404.
- [17] DOLUI K, NARAYAN A, RUNGGER I, et al. Efficient Spin Injection and Giant Magnetoresistance in Fe/MoS₂/Fe Junctions[J]. Physical Review B, 2014, 90: 041401.

- [18] WANG W, NARAYAN A, TANG L, et al. Spin-Valve Effect in NiFe/MoS₂/NiFe junctions[J]. Nano Letters, 2015, 15: 5261-5267.
- [19] KHAN M F, REHMAN S, REHMAN M A, et al. Multi-Heterostructured Spin-Value Junction of Vertical FLG/MoSe₂/FLG[J]. APL Materials, 2020, 8(7): 71104.
- [20] KHAN M F, KIM H, NAZIR G, et al. Layer Dependent Magnetoresistance of Vertical MoS₂ Magnetic Tunnel Junctions[J]. Nanoscale, 2018, 10(35): 16703-16710.
- [21] PIQUEMAL-BANCI M, GALCERAN R, GODEL F, et al. Insulator-to-Metallic Spin-Filtering in 2D-Magnetic Tunnel Junctions Based on Hexagonal Boron Nitride[J]. ACS Nano, 2018, 12(5): 4712-4718.
- [22] PAN L, WEN H, HUANG L, et al. Two-Dimensional XSe₂ (X = Mn, V) based Magnetic Tunneling Junctions with High Curie Temperature[J]. Chinese Physics B, 2019, 28(10): 107504.
- [23] PAUDEL T R, TSYMBAL E Y. Spin Filtering in CrI₃ Tunnel Junctions[J]. ACS Applied Materials & Interfaces, 2019, 11(17): 15781-15787.
- [24] FANG H N, XIAO M W, RUI W B, et al. Magnetic Coherent Tunnel Junctions with Periodic Grating Barrier[J]. Scientific Reports, 2016, 6: 24300.
- [25] FANG H N, XIAO M W, RUI W B, et al. Effects of Temperature on The Magnetic Tunnel Junctions with Periodic Grating Barrier[J]. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 2018, 465(4): 333-338.
- [26] KWAK B S, ERBIL A, BUDAI J D, et al. Domain Formation and Strain Relaxation in Epitaxial Ferroelectric Heterostructures[J]. Physical Review B, 1994, 49(21): 14865-14879.
- [27] CHUNG D D L. Review Graphite[J]. Journal of Materials Science, 2002, 37(8): 1475-1489.
- [28] ATACA C, TOPSAKAL M, AKTURK E, et al. A Comparative Study of Lattice Dynamics of Three-and Two-Dimensional MoS₂[J]. The Journal of Physical Chemistry C, 2011, 115(33): 16354-16361.

Theoretical study on the effect of temperature in the magnetic tunnel junctions with single crystal 2D-material barrier

Fang Henan, Sun Xingyu, Lü Taotao, Lü Jie

(College of Electronic and Optical Engineering, Nanjing University of Posts and Telecommunication, Nanjing 210023, China)

Abstract: This paper develops a tunneling theory based on the traditional optical diffraction theory for magnetic tunnel junctions with single crystal barrier. By the theory, the single crystal barrier is treated as a diffraction grating, so it can well account for the coherence of the tunneling electrons. Furthermore, the effect of temperature of the magnetic tunnel junctions with single crystal 2D-material barrier is studied. The theoretical result shows that, owing to the strong coherence of the tunneling electrons, the tunneling resistances and TMR will both vary with temperature non-monotonously. It can explain the experimental results in the previous literature, and clarify the physical mechanism. In addition, this paper has investigated the effects of lattice distortion on the temperature characteristics of the magnetic tunnel junctions with single crystal 2D-material barrier. The present work provides a solid theoretical foundation for optimizing the temperature characteristics of the magnetic tunnel junctions with single crystal 2D-material barrier.

Keywords: magnetic tunnel junction; tunneling magnetoresistance; two-dimension materials; effect of temperature; spintronics

[责任编辑 杨浦 刘洋]