
物理所第一性原理计算筛选本征二维磁性材料研究取得进展

作者：writer 来源：中国科学院

本文原地址：<https://www.iikx.com/news/progress/3342.html>

本文仅供学习交流之用，版权归原作者所有，请勿用于商业用途！

物理所第一性原理计算筛选本征二维磁性材料研究取得进展。在二维层状材料中实现磁性是研究人员的重要目标，因为二维磁性材料既是构造自旋电子学器件的基础，又是研究新奇物理现象的平台。通常，人们通过掺杂磁性原子或利用界面近邻效应在非磁性材料中引入磁性，但是这些非本征的磁性易受到载流子浓度、杂质类型、界面原子结构等因素的影响。因此，人们希望实现具有本征磁性的二维层状材料。先前人们根据Mermin – Wagner定理，各向同性的单原子层二维材料由于长程热涨落并不能表现出宏观磁性，本征二维磁性材料被认为不能存在。最近的实验工作发现，范德瓦尔斯结合的层状材料CrI₃和Cr₂Ge₂Te₆具有低维长程磁序[Nature 546, 270 (2017), Nature 546, 265 (2017)]，这些工作开创了本征二维磁性材料研究的新时代。目前已知的二维本征磁性材料很少，其较低的居里温度(<50 K)很难满足电子学器件的实用要求。比如量子反常霍尔效应只在极低温下的复杂磁性体系中实现，将这类拓扑态应用到实际体系的途径之一就是寻找新型二维磁性材料。而且，新材料体系的发现将可能揭示出新的拓扑电子态。

近年来，基于第一性原理的高通量筛选方法逐渐成为发现新材料的途径，为寻找本征二维磁性材料及研究新奇电子性质提供了新手段。最近，中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家研究中心表面物理国家重点实验室SF10组博士研究生刘行在副研究员孙家涛和研究员孟胜的指导下，搭建了高通量筛选二维磁性材料的第一性原理计算流程及相关数据库，从材料数据库中发现了数十种新型层状磁性材料。一些具有高居里温度的铁磁材料还呈现出新颖拓扑电子态。

他们把基于Materials Project数据库得到的627种二维材料作为筛选起点，首先对其磁性进行了研究，发现33种反铁磁二维材料和56种铁磁二维材料(图1)。重要的是，24种铁磁材料的居里温度均高于实验证实的铁磁体CrI₃(图2)。对这些材料的拓扑性质进行计算后发现：(1)单层VCl₃和RuCl₃呈现出本征的量子反常霍尔态，同时具有时间反演对称性破缺导致的K和K'能谷极化，此共存态被称为“谷极化的量子反常霍尔态”(图3);(2)单层ScCl₃具有一种新型费米子，被称为“第二类外尔节点环费米子”(图4)。这既为实现高温低维磁体及构造自旋电子学器件奠定了材料基础，也为研究新拓扑物态提供了平台。该项研究作者还包括副研究员刘淼，主要结果于11月7日发表在Journal of Physical Chemistry Letters上[H. Liu et al, J. Phys. Chem. Lett. 9, 6709 (2018)]。

该研究工作得到科技部(项目批准号2016YFA0202300, 2016YFA0300902, 2015CB921001, 和2013CBA01600)、国家自然科学基金委(项目批准号11774396和61306114)和中科院(项目批准号XDB30000000和XDB07030100)的资助。

文章链接

图1. 高通量筛选磁性二维材料流程。

图2. 89种磁性单层材料及其居里温度。

图3. 铁磁性的单层RuCl₃具有本征的谷极化量子反常霍尔态。

图4. 铁磁性的单层ScCl₃中存在第二类外尔节点环费米子。

更多 科学进展 请访问 <https://www.iikx.com/news/progress/>

本文版权归原作者所有，请勿用于商业用途，[爱科学iikx.com](http://www.iikx.com)转发