低维自旋电子材料的理论设计与调控

吕海峰, 武晓君*

中国科学技术大学化学与材料科学学院, 合肥微尺度物质科学国家研究中心, 中国科学院能量转换材料重点实验室, 合肥 230026

* 联系人, E-mail: xjwu@ustc.edu.cn

2018-09-04 收稿, 2018-10-26 修回, 2018-10-30 接受, 2018-11-08 网络版发表

国家重点基础研究发展计划(2011CB921404, 2012CB922001)、国家自然科学基金(51172223, 21421063)、中国科学院先导科技专项(XDB01020300)和中央高校基础研究基金(WK2060190025, WK2060140014)资助

摘要 自旋电子器件利用电子的自旋进行信息的传递、处理与存储, 是未来信息技术的重要载体. 低维体系具有显著的量子耦合效应, 是研究电荷/自旋相互作用机制、发展纳米自旋电子器件的重要载体. 由于缺陷、杂质、界面以及边界效应等提供的冗余自由度, 使得长程有序磁性体系的制备、维护和调控远无法达到器件化的基本条件, 寻找具有高居里温度、高自旋极化率等特性的低维材料是目前面临的挑战. 基于密度泛函理论、热动力学模拟等第一性原理方法的计算结果, 应用合适的物理统计模型, 可以加深对低维材料结构-机制-性能的认识, 为自旋电子学材料的发展提供理论支持, 并通过应力和电荷掺杂, 对低维材料的磁性进行调控.

关键词 低维材料, 自旋电子学, 第一性原理计算, 磁晶各向异性

自旋是电子所具有的内禀性质, 材料中电子自旋角动量的共同行为影响材料的磁学与电学性质. 利用电子的自旋自由度进行信息的传递、处理与存储, 开发新型的自旋电子学器件, 是发展未来信息技术发展的关键^[1]. 与传统利用电荷自由度的电子学器件相比, 自旋电子学器件具有以下优势: (1) 响应速度更快. 传统半导体器件中电子的速度会受到能量色散的限制, 而自旋电子器件基于电子自旋方向的改变以及自旋电子之间的耦合, 可以实现更快的逻辑状态变化速度; (2) 集成度更高. 自旋电子器件的特征尺度在原子尺度, 且输运中只有自旋电流, 发热量小, 可以提高集成密度.

巨磁阻效应的发现标志着自旋电子学的开端^[2-4], 在由两层铁磁性金属夹住一层非磁性金属构成的自旋阀装置中, 通过施加外部磁场, 两个铁磁金属中的磁化方向可形成彼此平行或反平行的状态, 在这两种状态下器件的电导率相差1个数量级. 如果

用非磁性绝缘体替换非磁性金属^[5], 组成的磁性隧穿结电导率差值更大. 利用这种自旋极化行为, 可以制造双态存储单元和开关, 并且已经在硬盘的读写磁头得到了广泛的应用. 其中, 自旋的注入、输运、弛豫与控制是关键的科学问题^[1,6], 如通过光^[7]、电^[8]、铁磁共振^[9]等方式注入自旋. 而巨磁阻效应的研究主要集中在寻找高的自旋极化率的材料^[10]、寻找新的具有自旋过滤效应的材料^[11]、寻找具有垂直各向异性的材料^[12]等方面, 同时要能够长程传输以及高效地调控与探测. 这些问题的解决一方面依赖于器件制造技术的优化和发展, 另一方面依赖于设计新型的具有特定性能的自旋电子学材料.

随着电子器件尺寸逐渐减少, 寻找低维自旋材料成为自旋电子学材料研究的焦点. 低维体系具有显著的量子耦合效应, 是研究电荷、自旋与轨道相互作用与自旋电子器件的优秀载体. 例如, 对类石墨烯低维体系进行自旋极化电子的注入^[13], 由于共轭大 π

引用格式: 吕海峰, 武晓君. 低维自旋电子材料的理论设计与调控. 科学通报, 2018, 63: 3442-3452

Lü H F, Wu X J. Theoretical design and regulation of low-dimensional spintronics (in Chinese). Chin Sci Bull, 2018, 63: 3442-3452, doi: 10.1360/N972018-00915

键的存在,可以实现极化自旋电子的长程输运,自旋弛豫时间达到微秒.最近,实验上成功制备得到 CrI_3 纳米片^[14],其单层磁基态为铁磁,Cr-Cr之间通过碘(I)的p轨道进行超交换作用保持铁磁耦合.易磁化轴垂直于二维延展方向,可以用二维Ising模型来描述.铁磁态和顺磁态转变的居里温度为45 K,与体相结构的61 K接近.这表明该体系内存在的层间范德华相互作用(vdW)对磁性耦合的影响较为微弱. CrI_3 层间为反铁磁耦合,以石墨烯基材料作为隧穿电极在纳米片中得到的隧穿磁电阻最高达到 10^4 量级^[15,16].随后研究发现除了磁场,还可以通过门电路对单、双层 CrI_3 的磁性进行有效地调节^[17-19].同期,另一个vdW层状结构材料 $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ 也被证实为铁磁材料^[20],易磁化轴位于面内,可以用二维XY模型来模拟,在 $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ 少数层本征铁磁二维半导体中利用固态门电压可以实现电荷与自旋的双重双极全电操控^[19].最新研究表明单层 VSe_2 基态为铁磁,且其居里温度达到室温^[21].

二维 CrI_3 , $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ 等纳米片的合成及隧穿磁电阻的研究表明了自旋电子学材料发展进入纳米尺寸,但低维材料在其实际的应用上仍面临巨大挑战.如, $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ 样品的制备需要在惰性气体中进行保护,常温常压条件下厚度在6 nm以下的 $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ 基本不再有电学导通性.因此,寻找新的低维材料,具备长程磁有序、高极化率、高临界温度以及高稳定性是发展纳米尺度自旋电子器件的关键.

半金属材料的一个自旋通道呈金属性,另一个自旋通道呈半导体或绝缘体特性^[22],可以提供100%自旋极化的载流子,是一种理想的自旋电子材料,目前发现的半金属材料主要有Heusler合金^[23]、双钙钛矿材料^[24]以及过渡族金属化合物^[25,26]等,可室温工作的低维半金属材料还相对较少^[27-31].除了提高自旋极化率,如何有效地抵抗热涨落对自旋极化的影响也是重要的问题,这里需要了解自旋和自旋、电荷、轨道等周围环境的耦合机制,居里温度、奈尔温度以及磁晶各向异性性能可以反应耦合作用强弱,是判断能否维持长程磁有序的特征手段之一.所以,为构筑可在不低于室温下工作的纳米尺度自旋电子器件,需要寻找具有高居里温度(T_C ,表征铁磁体系)或奈尔温度(T_N ,表征反铁磁体系)以及高磁各向异性的低维自旋电子材料.

近年来,基于密度泛函理论的第一性原理计算

可以精确地预测材料的电子学结构,尤其是低维体系.这大大缩短了材料的研发周期,设计和优化自旋电子学材的.本文概述了最近在低维自旋电子学材料的理论设计与磁性调控方面的一些进展,主要介绍基于分子组装和自上而下寻找具有高磁各向异性能和居里温度的低维磁性材料,并探讨通过应力和载流子掺杂调控材料中的磁性.

随着量子力学的发展,第一性原理计算被广泛用于描述自旋电子关联体系中的多体相互作用^[32].最早,伊辛模型和海森堡模型被用于解释自旋体系中的相变^[33,34],它们都考虑自旋电子和近邻自旋电子之间的耦合,可以反应自旋的动力学行为.但上述两种模型都不能用于描述复杂电子-电子耦合作用下的体系,所以需要新的物理模型.Stoner^[35]提出在电子之间交换作用大于动能损失下,会引起自发自旋劈裂,产生净磁矩.Hubbard^[36]根据紧束缚模型,强调了强关联体系中同壳层电子之间的排斥作用等.除此之外,双交换机制^[37]、超交换^[38]、RKKY^[39]等耦合机制也用来描述体系中的长程磁有序.在处理自旋体系时,密度泛函理论将复杂的多体相互作用包含在交换关联泛函中.常用的处理交换关联项包括局域密度近似和广义梯度近似,但这两种泛函都不考虑体系中的局域d, f电子之间的库伦排斥作用,会低估体系的带隙^[40].所以,在计算包含d或f电子的强关联体系时,需要添加一个类Hubbard形式的库伦排斥作用修正项 U ^[41],但其数值的确定和体系中d或f电子的占据情况相关.除此之外,混合部分精确交换的杂化泛函(HSE06)通常用来计算自旋体系的电学性质^[42].自旋-轨道耦合效应在大部分的平面波赝势中也都有所修正^[43].对自旋极化电子的输运,通常由非平衡格林函数描述^[44],密度泛函用来计算稳态的电子结构,半无限长电极的影响用自能函数来描述.

本文综述了近几年在低维自旋电子材料的理论设计与调控方面的进展,面对发展实验可行,具有高稳定性、高自旋极化率、可室温工作等挑战,寻找新的低维自旋电子材料,主要包括具有晶体构型的一维分子纳米线和二维合金材料,并探讨通过应力和电荷调控材料中的磁性.

1 高磁晶各向异性性能的一维分子纳米线

一维纳米线,径向在纳米尺度,可沿轴向延伸,一般具有高长径比,在场效应晶体管、燃料电池催化

剂等许多领域具有重要的应用前景^[45,46]. 纳米线的形式多种多样, 包括金属原子链^[47]、离子晶体链^[48]、金属-有机配体纳米线^[49-51]等. 分子纳米线是指以分子作为单元结构, 通过单元重复而形成有序排列的晶体结构, 分子单元可以是无机的原子, 也可以是有机的分子团簇, 也可以是无机-有机相结合的金属-有机结构. 按照一定的顺序与规律, 通过弱相互作用或者共价键, 可以构建具有复合结构与性能的新结构. 这种自下而上构造新材料的方式提供了一种非常有效的材料设计思路, 结合、借助衬底的效应, 在实验上也具有可操作性^[52,53].

一维磁性体系, 如一维链结构具有极细的直径与径向饱和成键带来的化学稳定性, 可以使纳米器件尺寸达到亚纳米级别, 提高集成密度. 同时, 由于维度的降低, 可以通过配体对晶体场进行调控, 有望获得高磁晶各向异性性能, 实现室温工作. 将金属原子与其他结构单元组装起成一维纳米线是构造一维磁性体系的典型做法. 如通过钒原子和苯环交替组成的一维 $V_n(C_6H_6)_{n+1}$ 结构^[49], 计算表明纳米线基态为半金属, 自旋极化率达到100%, 而且可以在轴向拉伸12%下保持其半金属行为, 自旋输运计算发现有限尺寸的钒-苯环团簇结合铁磁Ni, Co电极可以作为自旋过滤器. 进一步的计算发现, 其他金属原子(Sc, Ti, V, Cr, Mn)和苯环形成的一维 $[TM(Bz)]_\infty$ 结构中^[54], $[Cr(Bz)]_\infty$ 是金属, $[Ti(Bz)]_\infty$ 是顺磁态, $[V(Bz)]_\infty$ 是准半金属的铁

磁, $[Mn(Bz)]_\infty$ 是半金属铁磁. 金属和茂基交替组合也形成一类一维纳米线结构, 如钒原子和茂基形成的一维 $[V(Cp)]_\infty$, 钒原子同时和茂基、苯环形成的 $[V(Bz)V(Cp)]_\infty$, 钒原子和蒽基形成的 $[V_2(Ant)]_\infty$ 基态都是一维铁磁半金属, $[V(Cp)Fe(Cp)]_\infty$ 为铁磁半导体. 进一步研究表明, 一维金属(V, Cr, Mn, Co, Ni)-并茂基 $[TM_2(Pn)]_\infty$ ^[55] 中 $[Mn_2(Pn)]_\infty$ 为铁磁, 其他为反铁磁或无磁性. 除此之外, 其他的一维金属-有机结构还包括一维金属-萘基 $[TM_2(Np)]_\infty$ ^[56], 双金属-萘基 $[(Np)_2V_2TM_2]_\infty$ ^[57], 双金属-茂基 $[(Cp)TM_1(Cp)TM_2]$ ($TM_1=Ti, Cr, Fe$; $TM_2=Sc-Co$)^[58], 变式钒原子-萘基 $V_{n-1}(Np)_n$ ^[59], 镧系元素-环辛四烯 Ln_nCOT_{n+1} ($Ln=Eu, Ho$)^[60,61] 等. 综上, 计算表明一维链中的未配对电子可以形成铁磁耦合, 同时有半金属或者负微分电阻等新颖的输运性质^[50,51], 并可以通过不同功能化基团得到同时具备铁磁和铁电的多铁性质^[62]. 此外, 选取合适的磁性分子单元进行直接组装也是一种实验上可行的合成方式.

通过在一维受限空间内组装 MH_3 ($M=Sc, Cr, Mn, Co$) 分子^[63], 可以获得一类稳定的过渡金属氢化物分子纳米线, 如图1所示. 第一性原理分子动力学模拟显示, 在15 ps的模拟过程中, CoH_3 , CrH_3 与 MnH_3 分子纳米线可以分别在500与600 K的温度下保持其基本结构, 而 ScH_3 分子纳米线则可以在1200 K的高温下保持分子纳米线的基本结构. 这一结构稳定性的

图1 (网络版彩色)一维 MH_3 晶体结构与态密度图. (a) 一维 MH_3 晶体结构, 一维链中心原子和周围配位原子分别为 3d 过渡金属原子 M 与氢原子 H; 一维 MnH_3 (b) 与 CoH_3 (c) 的态密度^[63]

Figure 1 (Color online) The crystal and electronic structures of one-dimensional MH_3 crystal. (a) The one-dimensional structure of MH_3 crystals, orange and white spheres represent the 3d transition metal (M) and hydrogen (H), respectively. The electronic density of states of one-dimensional MnH_3 (b) and CoH_3 (c)^[63]

相对差异主要来源于金属与桥联配体氢的成键强度. 热力学计算证实由分子形成纳米线的反应为放热过程, 同时纳米线中的过渡族金属原子的d轨道在桥联氢原子配体形成的晶体场中发生分裂, 形成特殊性质, 如 CoH_3 具有半金属磁性. 值得关注的是, 一维磁性体系的磁晶各向异性能显著高于二维与三维体系, 如 CoH_3 纳米线在沿轴方向与其正交方向的磁晶各向异性能差大约为1 meV, 因此可以有效地稳定其长程铁磁序.

此外, 金属和多种有机单元通过配位键自组装成低维金属有机框架材料(MOFs)结构, 也是潜在的自旋电子材料. 根据所选择的金属种类, 配体的尺寸和结构或者空间位阻等特点将产生丰富的电磁性质^[64]. 例如, 选取1,2,4,5-苯四胺(BTA)作为配合物单元, 通过把磁性原子与平面有机分子近共面成键连接的方式, 可以获得一系列一维双极磁性半导体(图2)^[65]. 其中含有Mn, Fe的一维纳米线具有铁磁双极磁性半导体性质, 磁矩主要分布在过渡金属原子上. 不同于连接单元为O或者F原子时体系经常形成反铁磁序的情况, 此处的磁性原子间通过配合物有机分子的大 π 键进行长程超交换, 实现铁磁耦合. 非线性计算表明其易磁化轴方向是沿着链的方向, Fe-BTA体系磁晶各向异性能差最高为1.361 meV/Fe原子. 对于一维体系, 其长程的磁序可以通过链间的相互作用来增强, 这里计算得到的Fe-BTA体系链间耦合为铁磁, 且铁磁和反铁磁之间较大的能量差可以很好

地稳定其长程的铁磁序. 除此之外, 热力学计算证实由分子单元构建一维链的反应过程是放热的, 同时声子谱没有虚频, 证实了晶格的稳定性. 第一性原理分子动力学模拟显示, TM-BTA一维链体系具有较好的热稳定性, 可以在800 K的高温下保持基本构型.

这种基于包含过渡金属的分子一维组装, 一方面可以形成金属中心的长程有序, 另一方面通过改变金属间配体元素的种类, 调控金属与金属之间的磁耦合, 为发展实验可行的一维磁性分子线提供了一种思路.

2 高居里温度的二维合金纳米片

从已知体相材料出发, 自上而下构建低维纳米结构是另外一种设计思路, 如从范德华(vdW)相互作用的层状结构中机械剥离出单层^[66]、溶剂法剥离出二维薄层结构^[67]、化学腐蚀方法剥离出骨架结构^[68], 甚至直接截取体相结构中特定二维区域并形成低维结构^[69]. 最早实现的石墨烯制备方法即为机械剥离法. 可以通过层状材料的剥离能或者表面能计算来衡量材料是否可以通过这个方法来获得^[70,71].

在本征二维半金属或半导体上构建场效应器件, 可以用来做传感器或逻辑运算器件. 近年来, 随着二维范德华材料家族的扩展, 磁性二维材料已在各领域得到广泛研究. 通过理论预测, 已经有多种类型的低维磁性化合物被报道, 包括氧化物^[26,72]、硫族化合

图2 (网络版彩色)一维TM-BTA晶体结构与电子结构. (a) 一维TM-BTA体系示意图; (b) 配位体最低未占据轨道: 0.03 a.u.; (c) Mn^{2+} , Fe^{2+} 和 Co^{2+} 的d电子态; (d) 在Mn-BTA体系中, 近邻 Mn^{2+} 通过 π^* 轨道的远程超交换作用^[65]

Figure 2 (Color online) The crystal and electronic structures of one-dimensional TM-BTA crystal. (a) Schematic representation of TM-BTA. (b) Lowest unoccupied orbital of ligand (isovalue 0.03 a.u.). (c) d-Electron configuration of Mn^{2+} , Fe^{2+} , and Co^{2+} . (d) Schematic diagram for long-range super-exchange interaction of Mn^{2+} via conjugated π^* orbital in Mn-BTA^[65]

物^[73,74]、氮化物^[75,76]、碳化物^[29,77]、卤化物^[78,79]、硼化物^[80]、氢化物^[81]与其他多元化合物^[82,83]. 其中, 二维H-MoN₂可以实现铁磁、反铁磁两种不同磁基态的转换, 这种现象来源于体系中氮氮键长对于交换作用强度的影响^[84]. 对T-MoS₂中金属原子进行替换得到MnS₂, 其基态为带隙极小的铁磁态, 居里温度可达到286 K^[74]. 首次将全局结构搜索应用于二维磁性过渡金属化合物得到具有平面四方结构的CrN, 结构中Cr³⁺离子之间具有强耦合作用, 其居里温度可达到675 K^[85]. 另外, 在类MXene结构中, 二维Mn₂C基态为反铁磁, 其中金属离子具有面内和垂直于面的多种相互作用, 奈尔温度可达到720 K^[77]. 在过渡族金属卤化物中, FeX₂(X=Cl, Br, I)为铁磁性半导体, 其易磁化轴位于面内, 用二维XY模型得到其转变温度为FeI₂(122 K), FeBr₂(210 K), FeCl₂(>100 K)^[78]. 除此之外, 还可以通过有机-金属框架构造一系列的二维磁性材料^[86]并通过改变化学修饰对磁性进行调控^[86,87]. 比如, 过渡族金属与卟啉分子组成的二维纳米结构, 其中含Cr体系居里温度为187 K^[88]. 基于实

验中合成的Ni₃C₁₂S₁₂二维结构, 通过具有较小半径的-NH-基团替换其中的S单元, 得到二维Mn₃C₁₂N₁₂H₁₂, 可以增强磁性原子之间的相互作用, 居里温度可达到450 K^[89]. 一类M₃C₁₂O₁₂(M=Zn, Cd, Hg, Mg)体系除具备铁磁序外, 在费米面处具有自旋极化的Dirac点, 其中Zn₃C₁₂O₁₂居里温度为209 K^[90]. 通过降低常见磁性材料的维度, 应用量子限制效应增强材料的磁性也是寻找实验可行的低维自旋电子器件材料的一种有效的方式.

针对传统的Fe-Si合金磁性体系^[91~93], 可以通过在体相Fe₂Si中截取特定的区域, 形成六方密堆、具有准单原子层厚度的特殊二维结构, 如图3所示^[69]. 在该结构中, Fe原子之间形成Fe-Fe金属键, 并组成蜂窝状的二维金属Fe骨架; 而Si原子则嵌于蜂窝孔洞中心处, 电荷密度分析表明Fe为+1价, Si为-2价, 每个Fe原子和周围3个Fe原子和3个硅原子成键, 每个Si原子和周围6个Fe原子成键, 每个原子都是六配位.

计算表明二维Fe₂Si纳米片是具有铁磁性的半金属, 在费米能级具有100%的自旋极化率; 而声子谱

图3 (网络版彩色)体相六方Fe₂Si晶体结构、电子结构以及优化得到的二维Fe₂Si晶体结构. 六方Fe₂Si体相的俯视(a)和侧视图(b); (c) HSE06计算得到的Fe₂Si体相能带和态密度; (d) 二维Fe₂Si优化结构的俯视和侧视图^[69]

Figure 3 (Color online) The crystal and electronic structures of hexagonal Fe₂Si crystal and optimized structure of two-dimensional Fe₂Si. The top (a) and side (b) views of the optimized structure of hexagonal Fe₂Si bulk, respectively. (c) The spin-polarized band structures and density of states of hexagonal Fe₂Si bulk calculated with HSE06 functional. (d) The top and side views of the optimized structure of two-dimensional Fe₂Si crystal^[69]

和从头计算分子动力学(AIMD)模拟显示其具有高的热力学稳定性,二维晶体结构可保持到1200 K以上.基于Ising模型的蒙特卡洛模拟预测二维 Fe_2Si 晶体的居里温度可超过780 K,而且可以通过双轴应变调控.优异的磁学性能使得二维 Fe_2Si 纳米片在纳米电子自旋器件领域非常具有应用前景.

最近,理论研究表明也可以从本征反铁磁的体相结构剥离得到二维铁磁材料,如层状卤氧化物^[95],其体相是反铁磁,但剥离得到的单层结构为铁磁,其中二维 CrOCl 的居里温度为160 K,第一性原理动力学计算和声子谱可以验证其单层的稳定性.另外,基于双轨道模型,轨道劈裂大小可以影响超交换作用形成的铁磁耦合的强度,在已经合成的 CrI_3 和 $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ 纳米片的基础上,通过等价金属有序替换的方式得到 CrWI_6 和 $\text{CrWGe}_2\text{Te}_6$ 合金纳米片,可以有效地将居里温度提高到180和300 K^[83].综上,通过降低维度、元素替换以及改变配体单元的方式,一方面可以得到新型的二维体系,另一方面可以调控体系中磁性单元之间的距离和作用方式,从而影响耦合强度,设计出符合实际需求的自旋电子器件.近来,数据库筛选也成为寻找二维磁性体系的研究热点,基于密度泛函理论的高通量计算,可以在无机晶体数据库中筛选出56个可通过剥离合成的二维铁磁或反铁磁体系,其中包括磁性半金属和磁性半导体等^[70].

3 应力以及电荷掺杂调控

传统上对自旋电子学材料输运进行调控一般通过施加外部磁场的方法,但随着材料尺寸的下降,宏

观磁场无法在纳米尺度上对电子器件进行调控,所以需要自旋电子学材料可以通过更加容易实现的方法进行调控,常见的手段包括应力调控和电荷掺杂.理论预测的双极磁性半导体是一类可以通过电场调控电子的自旋极化方向^[95,96],如图4所示.双极磁性半导体(BMS)可以通过电子或空穴注入转变为半金属材料^[82],其自旋极化方向是可控.这种特性来源于其独特的电子结构,即其导带底(CBM)与价带顶(VBM)属于不同的自旋通道,BMS能带结构具有3个能隙,包括2个自旋分裂能隙 Δ_2 , Δ_3 以及1个自旋翻转能隙 Δ_1 .在半导体电子学中,施加门电压可以对体系产生载流子掺杂效应,从而改变体系费米能级位置.负向的门电压从体系注入电子,从而实现电子掺杂;而正向的门电压则向体系抽出电子,以形成空穴掺杂.不施加门电压时,双极磁性半导体保持本征的半导体性质.在一定大小的正向门电压下,体系费米能级向下移动至自旋分裂带隙 Δ_2 中,使得体系表现为自旋上极化的半金属导通状态.而在一定大小的负向门电压下,体系费米能级向上移动至自旋分裂带隙 Δ_3 中,使得体系表现为自旋下极化的半金属导通状态.为实现由半导体至磁性半金属的快速转变,自旋翻转带隙 Δ_1 大小要适宜(~ 1 eV).同时为保持半金属状态,自旋劈裂带隙 Δ_2 与 Δ_3 则需要足够大($>> k_B T$),而且越大越好.

由上可知,电荷掺杂可以有效地调控自旋取向和输运性质.如在一维 MH_3 纳米线中, CoH_3 具有铁磁半金属性质,而 MnH_3 为铁磁金属,通过0.0625空穴/ Mn 原子的空穴注入可以诱发金属到半金属的转变.

图4 (网络版彩色)门电压调控自旋极化方向以及双极磁性半导体(BMS)与磁性半金属(HM)间相互转变的示意图^[96]

Figure 4 (Color online) Schematic illustration of manipulation of spin polarization, and the transition between bipolar magnetic semiconductor (BMS) and magnetic half metals (HM) by gate voltage^[96]

同样,在TM-BTA一维MOF体系中,Mn-BTA和Co-BTA体系属于双极磁性半导体,可以通过电子或者空穴的注入实现不同自旋方向的导通.在二维Fe₂Si纳米片中,双轴应变从-3%~3%不会改变体系的半金属性质,但会对铁磁反铁磁材料能量差造成影响,从而影响到材料铁磁态和顺磁态之间转变的临界温度,即居里温度,压缩下体系的居里温度升高,拉伸时下降,这主要是由于Fe₂Si磁耦合中的直接交换作用.

目前,实验上已经证实可以通过门电压对磁性进行调控,如Cr₂Ge₂Te₆等^[19],提供了基于二维铁磁半导体的自旋场效应器件的可行性.另外,计算还表明通过注入电荷下可以实现轨道序和电荷序的结合^[97],在本征铁磁材料中引入面内的铁电极化,形成具备铁电和铁磁的多铁材料.这些都为自旋材料的发展提供了一定的指导意义.

4 结论与展望

对新型自旋电子学材料以及机制的研究,不仅具有重大基础科学价值,而且对于其在信息存储,输运等领域的应用也有促进作用.为了解决目前自旋

电子学器件中磁有序的临界转变温度较低的问题,通过研究维度、结构、交换机制对耦合强弱的影响,从分子单元出发,构建了一维分子纳米线,或者降低已知磁性材料的维度,可以获得一些实验可行、可以室温工作的低温磁性材料候选.进一步,通过电场或应力对材料的磁性进行有效的调控.这些可以为未来发展纳米尺度低维自旋电子材料提供一些借鉴.虽然,近年来,应用计算模拟可以提出许多新材料设计,但仍然可以清楚地看到,低维自旋电子材料的理论设计与模拟方面仍然存在着挑战.一方面目前理论描述上还是基于相对简单的模型,对于实际体系和理论预测尚存在一些差距.针对复杂磁性体系,计算精度仍然有较大的提升空间.另一方面,在材料设计方面,目前更多的是理想环境中材料的基本性质,而在实际的工作环境中如何保持稳定,不受温度、磁场、光等外界因素的干扰,同时能够克服缺陷,边界、界面、杂质等内部因素对电子自旋的散射作用,是发展实际可行的低维自旋电子材料需要考虑的问题,需要针对这些特性寻找新的表征因子,在理论设计与模拟中考虑材料的综合性质.

参考文献

- 1 Bader S D. Colloquium: Opportunities in nanomagnetism. *Rev Mod Phys*, 2006, 78: 1–15
- 2 Baibich M N, Broto J M, Fert A, et al. Giant magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr magnetic superlattices. *Phys Rev Lett*, 1988, 61: 2472–2475
- 3 Binasch G, Grünberg P, Saurenbach F, et al. Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic inter-layer exchange. *Phys Rev B*, 1989, 39: 4828–4830
- 4 Dieny B, Speriosu V S, Parkin S S P, et al. Giant magnetoresistive in soft ferromagnetic multilayers. *Phys Rev B*, 1991, 43: 1297–1300
- 5 Julliere M. Tunneling between ferromagnetic films. *Phys Lett A*, 1975, 54: 225–226
- 6 Žutić I, Fabian J, Das Sarma S. Spintronics: Fundamentals and applications. *Rev Mod Phys*, 2004, 76: 323–410
- 7 Oiwa A, Mitsumori Y, Moriya R, et al. Effect of optical spin injection on ferromagnetically coupled Mn spins in the III-V magnetic alloy semiconductor (Ga,Mn)As. *Phys Rev Lett*, 2002, 88: 137202
- 8 Jedema F J, Filip A T, van Wees B J. Electrical spin injection and accumulation at room temperature in an all-metal mesoscopic spin valve. *Nature*, 2001, 410: 345
- 9 Brataas A, Tserkovnyak Y, Bauer G E W, et al. Spin battery operated by ferromagnetic resonance. *Phys Rev B*, 2002, 66: 060404
- 10 Xiu F H, Tadaomi D, Makoto K, et al. High-magnetoresistance tunnel junctions using Co₇₅Fe₂₅ ferromagnetic electrodes. *Jpn J Appl Phys*, 2000, 39: L439
- 11 Sukegawa H, Miura Y, Muramoto S, et al. Enhanced tunnel magnetoresistance in a spinel oxide barrier with cation-site disorder. *Phys Rev B*, 2012, 86: 184401
- 12 Kim G, Sakuraba Y, Oogane M, et al. Tunneling magnetoresistance of magnetic tunnel junctions using perpendicular magnetization L10-CoPt electrodes. *Appl Phys Lett*, 2008, 92: 172502
- 13 Han W, Pi K, McCreary K M, et al. Tunneling spin injection into single layer graphene. *Phys Rev Lett*, 2010, 105: 167202
- 14 Huang B, Clark G, Navarro-Moratalla E, et al. Layer-dependent ferromagnetism in a van der Waals crystal down to the monolayer limit. *Nature*, 2017, 546: 270–273
- 15 Klein DR, MacNeill D, Lado J L, et al. Probing magnetism in 2D van der Waals crystalline insulators via electron tunneling. *Science*,

- 2018, 360: 1218–1222
- 16 Song T, Cai X, Tu M W Y, et al. Giant tunneling magnetoresistance in spin-filter van der Waals heterostructures. *Science*, 2018, 360: 1214–1218
 - 17 Jiang S, Li L, Wang Z, et al. Controlling magnetism in 2D CrI₃ by electrostatic doping. *Nat Nanotechnol*, 2018, 13: 549–553
 - 18 Huang B, Clark G, Klein D R, et al. Electrical control of 2D magnetism in bilayer CrI₃. *Nat Nanotechnol*, 2018, 13: 544–548
 - 19 Wang Z, Zhang T, Ding M, et al. Electric-field control of magnetism in a few-layered van der Waals ferromagnetic semiconductor. *Nat Nanotechnol*, 2018, 13: 554–559
 - 20 Gong C, Li L, Li Z, et al. Discovery of intrinsic ferromagnetism in two-dimensional van der Waals crystals. *Nature*, 2017, 546: 265
 - 21 Bonilla M, Kolekar S, Ma Y, et al. Strong room-temperature ferromagnetism in VSe₂ monolayers on van der Waals substrates. *Nat Nanotechnol*, 2018, 13: 289–293
 - 22 de Groot R A, Mueller F M, Engen P G, et al. New class of materials: Half-metallic ferromagnets. *Phys Rev Lett*, 1983, 50: 2024–2027
 - 23 Brown P J, Neumann K U, Webster P J, et al. The magnetization distributions in some Heusler alloys proposed as half-metallic ferromagnets. *J Phys Condens Matter*, 2000, 12: 1827
 - 24 Kobayashi K I, Kimura T, Sawada H, et al. Room-temperature magnetoresistance in an oxide material with an ordered double-perovskite structure. *Nature*, 1998, 395: 677
 - 25 Schwarz K. CrO₂ predicted as a half-metallic ferromagnet. *J Phys F Met Phys*, 1986, 16: L211
 - 26 Kan M, Zhou J, Sun Q, et al. The intrinsic ferromagnetism in a MnO₂ monolayer. *J Phys Chem Lett*, 2013, 4: 3382–3386
 - 27 Kan EJ, Wu X, Li Z, et al. Half-metallicity in hybrid BCN nanoribbons. *J Chem Phys*, 2008, 129: 084712
 - 28 Li X, Yang J. CrXTe₃ (X=Si, Ge) nanosheets: Two dimensional intrinsic ferromagnetic semiconductors. *J Mater Chem C*, 2014, 2: 7071
 - 29 Si C, Zhou J, Sun Z. Half-metallic ferromagnetism and surface functionalization-induced metal-insulator transition in graphene-like two-dimensional Cr₂C Crystals. *ACS Appl Mater Interfaces*, 2015, 7: 17510–17515
 - 30 Zhou P, Sun C Q, Sun L Z. Two dimensional antiferromagnetic chern insulator: NiRuC₁₆. *Nano Lett*, 2016, 16: 6325–6330
 - 31 Li Y, Zhou Z, Shen P, et al. Spin gapless semiconductor-metal-half-metal properties in nitrogen-doped zigzag graphene nanoribbons. *ACS Nano*, 2009, 3: 1952–1958
 - 32 Li X, Wu X. Two-dimensional monolayer designs for spintronics applications. *WIREs Comput Mol Sci*, 2016, 6: 441–455
 - 33 Brush SG. History of the Lenz-Ising model. *Rev Mod Phys*, 1967, 39: 883–893
 - 34 Manousakis E. The spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet on a square lattice and its application to the cuprous oxides. *Rev Mod Phys*, 1991, 63: 1–62
 - 35 Stoner E C. Collective electron ferromagnetism. *Proc Math Phys Eng Sci*, 1938, 165: 372–414
 - 36 Hubbard J. Electron correlations in narrow energy bands. *Proc R Soc Lon Ser A*, 1963, 276: 238–257
 - 37 Zener C. Interaction between the *d*-shells in the transition metals. II. Ferromagnetic compounds of manganese with perovskite structure. *Phys Rev*, 1951, 82: 403–405
 - 38 Matthias B T, Bozorth R M, Van Vleck J H. Ferromagnetic interaction in EuO. *Phys Rev Lett*, 1961, 7: 160–161
 - 39 Ruderman M A, Kittel C. Indirect exchange coupling of nuclear magnetic moments by conduction electrons. *Phys Rev*, 1954, 96: 99–102
 - 40 Terakura K, Williams A R, Oguchi T, et al. Transition-metal monoxides: Band or mott insulators. *Phys Rev Lett*, 1984, 52: 1830–1833
 - 41 Anisimov V I, Zaanen J, Andersen O K. Band theory and Mott insulators: Hubbard U instead of Stoner I. *Phys Rev B*, 1991, 44: 943–954
 - 42 Heyd J, Scuseria G E, Ernzerhof M. Hybrid functionals based on a screened Coulomb potential. *J Chem Phys*, 2003, 118: 8207–8215
 - 43 Hobbs D, Kresse G, Hafner J. Fully unconstrained noncollinear magnetism within the projector augmented-wave method. *Phys Rev B*, 2000, 62: 11556–11570
 - 44 Datta S. Nanoscale device modeling: The Green's function method. *Superlattice Microst*, 2000, 28: 253–278
 - 45 Fan Z, Wang D, Chang P C, et al. ZnO nanowire field-effect transistor and oxygen sensing property. *Appl Phys Lett*, 2004, 85: 5923–5925
 - 46 Jiang K, Zhao D, Guo S, et al. Efficient oxygen reduction catalysis by subnanometer Pt alloy nanowires. *Sci Adv*, 2017, 3: e1601705
 - 47 Gambardella P, Dallmeyer A, Maiti K, et al. Ferromagnetism in one-dimensional monatomic metal chains. *Nature*, 2002, 416: 301
 - 48 Yu J, Zhang J, Liu S. Ion-exchange synthesis and enhanced visible-light photoactivity of CuS/ZnS nanocomposite hollow spheres. *J Phys Chem C*, 2010, 114: 13642–13649
 - 49 Maslyuk V V, Bagrets A, Meded V, et al. Organometallic benzene-vanadium wire: A one-dimensional half-metallic ferromagnet. *Phys Rev Lett*, 2006, 97: 097201
 - 50 Zhou L, Yang S W, Ng M F, et al. One-dimensional iron-cyclopentadienyl sandwich molecular wire with half metallic, negative differential resistance and high-spin filter efficiency properties. *J Am Chem Soc*, 2008, 130: 4023–4027
 - 51 Wang L, Gao X, Yan X, et al. Half-metallic sandwich molecular wires with negative differential resistance and sign-reversible high spin-filter efficiency. *J Phys Chem C*, 2010, 114: 21893–21899

- 52 Cai J, Ruffieux P, Jaafar R, et al. Atomically precise bottom-up fabrication of graphene nanoribbons. *Nature*, 2010, 466: 470–473
- 53 Feng B, Ding Z, Meng S, et al. Evidence of silicene in honeycomb structures of silicon on Ag (111). *Nano Lett*, 2012, 12: 3507–3511
- 54 Xiang H, Yang J, Hou J G, et al. One-dimensional transition metal-benzene sandwich polymers: Possible ideal conductors for spin transport. *J Am Chem Soc*, 2006, 128: 2310–2314
- 55 Wu X, Zeng X C. Double metallocene nanowires. *J Am Chem Soc*, 2009, 131: 14246–14248
- 56 Zhang Z, Wu X, Guo W, et al. Carrier-tunable magnetic ordering in vanadium-naphthalene sandwich nanowires. *J Am Chem Soc*, 2010, 132: 10215–10217
- 57 Zhang X, Han J, Liu Y, et al. Structural, electronic, and magnetic properties of one-dimensional organic bimetal-naphthalene sandwich nanowires. *J Phys Chem C*, 2012, 116: 5414–5419
- 58 Zhang X, Tian Z, Yang S W, et al. Magnetic manipulation and half-metal prediction of one-dimensional bimetallic organic sandwich molecular wires $[\text{CpTM}_1\text{CpTM}_2]_\infty$ ($\text{TM}_1=\text{Ti, Cr, Fe}$; $\text{TM}_2=\text{Sc-Co}$). *J Phys Chem C*, 2011, 115: 2948–2953
- 59 Li Y, Zhou Z, Chen Z. From vanadium naphthalene ($\text{V}_{n-1}\text{Np}_n$) sandwich clusters to VNp sandwich nanowire: Structural, energetic, electronic, and magnetic properties. *J Phys Chem A*, 2012, 116: 1648–1654
- 60 Atodiresei N, Dederichs P H, Mokrousov Y, et al. Controlling the magnetization direction in molecules via their oxidation state. *Phys Rev Lett*, 2008, 100: 117207
- 61 Zhang X, Ng M F, Wang Y, et al. Theoretical studies on structural, magnetic, and spintronic characteristics of sandwiched $\text{Eu}_n\text{COT}_{n+1}$ ($n=1-4$) clusters. *ACS Nano*, 2009, 3: 2515–2522
- 62 Wu M, Burton J D, Tsybmal E Y, et al. Multiferroic materials based on organic transition-metal molecular nanowires. *J Am Chem Soc*, 2012, 134: 14423–14429
- 63 Li X, Lv H, Dai J, et al. Half-metallicity in one-dimensional metal trihydride molecular nanowires. *J Am Chem Soc*, 2017, 139: 6290–6293
- 64 Czaja A U, Trukhan N, Muller U. Industrial applications of metal-organic frameworks. *Chem Soc Rev*, 2009, 38: 1284–1293
- 65 Wan Y, Sun Y, Wu X, et al. Ambipolar half-metallicity in one-dimensional metal-(1,2,4,5-benzenetetramine) coordination polymers via carrier doping. *J Phys Chem C*, 2018, 122: 989–994
- 66 Novoselov K S, Geim A K, Morozov S V, et al. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*, 2004, 306: 666–669
- 67 Sun Y, Sun Z, Gao S, et al. Fabrication of flexible and freestanding zinc chalcogenide single layers. *Nat Commun*, 2012, 3: 1057
- 68 Naguib M, Kurtoglu M, Presser V, et al. Two-dimensional nanocrystals produced by exfoliation of Ti_3AlC_2 . *Adv Mater*, 2011, 23: 4248–4253
- 69 Sun Y, Zhuo Z, Wu X, et al. Room-temperature ferromagnetism in two-dimensional Fe_2Si nanosheet with enhanced spin-polarization ratio. *Nano Lett*, 2017, 17: 2771–2777
- 70 Mounet N, Gibertini M, Schwaller P, et al. Two-dimensional materials from high-throughput computational exfoliation of experimentally known compounds. *Nat Nanotechnol*, 2018, 13: 246–252
- 71 Jung J H, Park C H, Ihm J. A rigorous method of calculating exfoliation energies from first principles. *Nano Lett*, 2018, 18: 2759–2765
- 72 Kan E, Li M, Hu S, et al. Two-dimensional hexagonal transition-metal oxide for spintronics. *J Phys Chem Lett*, 2013, 4: 1120–1125
- 73 Ma Y, Dai Y, Guo M, et al. Evidence of the existence of magnetism in pristine VX_2 monolayers ($\text{X}=\text{S, Se}$) and their strain-induced tunable magnetic properties. *ACS Nano*, 2012, 6: 1695–1701
- 74 Kan M, Adhikari S, Sun Q. Ferromagnetism in MnX_2 ($\text{X}=\text{S, Se}$) monolayers. *Phys Chem Chem Phys*, 2014, 16: 4990–4994
- 75 Wu F, Huang C, Wu H, et al. Atomically thin transition-metal dinitrides: High-temperature ferromagnetism and half-metallicity. *Nano Lett*, 2015, 15: 8277–8281
- 76 Liu Z, Liu J, Zhao J. YN_2 monolayer: Novel p-state Dirac half metal for high-speed spintronics. *Nano Res*, 2017, 10: 1972–1979
- 77 Hu L, Wu X, Yang J. Mn_2C monolayer: A 2D antiferromagnetic metal with high Neel temperature and large spin-orbit coupling. *Nanoscale*, 2016, 8: 12939–12945
- 78 Ashton M, Gluhovic D, Sinnott S B, et al. Two-dimensional intrinsic half-metals with large spin gaps. *Nano Lett*, 2017, 17: 5251–5257
- 79 Kulish V V, Huang W. Single-layer metal halides MX_2 ($\text{X}=\text{Cl, Br, I}$): Stability and tunable magnetism from first principles and Monte Carlo simulations. *J Mater Chem C*, 2017, 5: 8734–8741
- 80 Jiang Z, Wang P, Jiang X, et al. MBene (MnB): A new type of 2D metallic ferromagnet with high Curie temperature. *Nanoscale Horiz*, 2018, 3: 335–341
- 81 Wu Q, Zhang Y, Zhou Q, et al. Transition-metal dihydride monolayers: A new family of two-dimensional ferromagnetic materials with intrinsic room-temperature half-metallicity. *J Phys Chem Lett*, 2018, 9: 4260–4266
- 82 Li X, Wu X, Yang J. Half-metallicity in MnPSe_3 exfoliated nanosheet with carrier doping. *J Am Chem Soc*, 2014, 136: 11065–11069

- 83 Huang C, Feng J, Wu F, et al. Toward intrinsic room-temperature ferromagnetism in two-dimensional semiconductors. *J Am Chem Soc*, 2018, 140: 11519–11525
- 84 Wang Y, Wang S S, Lu Y, et al. Strain-induced isostructural and magnetic phase transitions in monolayer MoN_2 . *Nano Lett*, 2016, 16: 4576–4582
- 85 Zhang S, Li Y, Zhao T, et al. Robust ferromagnetism in monolayer chromium nitride. *Sci Rep*, 2014, 4: 5241
- 86 Zhou J, Sun Q. Magnetism of phthalocyanine-based organometallic single porous sheet. *J Am Chem Soc*, 2011, 133: 15113–15119
- 87 Wang P, Jiang X, Hu J, et al. Chemically engineering magnetic anisotropy of 2D metalloporphyrin. *Adv Sci*, 2017, 4: 1700019
- 88 Tan J, Li W, He X, et al. Stable ferromagnetism and half-metallicity in two-dimensional polyporphyrin frameworks. *RSC Adv*, 2013, 3: 7016
- 89 Liu J, Sun Q. Enhanced ferromagnetism in a $\text{Mn}_3\text{C}_{12}\text{N}_{12}\text{H}_{12}$ sheet. *ChemPhysChem*, 2015, 16: 614–620
- 90 Wu M, Wang Z, Liu J, et al. Conetronics in 2D metal-organic frameworks: Double/half Dirac cones and quantum anomalous Hall effect. *2D Mater*, 2016, 4: 015015
- 91 Takarabe K, Teranishi R, Oinuma J, et al. Optical properties of $\beta\text{-FeSi}_2$ under pressure. *Phys Rev B*, 2002, 65: 165215
- 92 Galakhov V R, Kurmaev E Z, Cherkashenko V M, et al. Electronic structure of FeSi . *J Phys Condens Matter*, 1995, 7: 5529
- 93 Sandalov I, Zamkova N, Zhandun V, et al. Effect of electron correlations on the Fe_3Si and $\alpha\text{-FeSi}_2$ band structure and optical properties. *Phys Rev B*, 2015, 92: 205129
- 94 Miao N, Xu B, Zhu L, et al. 2D intrinsic ferromagnets from van der Waals antiferromagnets. *J Am Chem Soc*, 2018, 140: 2417–2420
- 95 Li X, Wu X, Li Z, et al. Bipolar magnetic semiconductors: A new class of spintronics materials. *Nanoscale*, 2012, 4: 5680–5685
- 96 Li X, Yang J. Bipolar magnetic materials for electrical manipulation of spin-polarization orientation. *Phys Chem Chem Phys*, 2013, 15: 15793–15801
- 97 Huang C, Du Y, Wu H, et al. Prediction of intrinsic ferromagnetic ferroelectricity in a transition-metal halide monolayer. *Phys Rev Lett*, 2018, 120: 147601

Summary for “低维自旋电子材料的理论设计与调控”

Theoretical design and regulation of low-dimensional spintronics

Haifeng Lü & Xiaojun Wu*

Chinese Academy of Sciences Key Laboratory of Materials for Energy Conversion, Hefei National Laboratory of Physical Sciences at the Microscale, School of Chemistry and Materials Sciences, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China

* Corresponding author, E-mail: xjwu@ustc.edu.cn

Spintronics, using spins of electrons for the information transmission, process and storage, which is a promising technology in the future. Low-dimensional materials, with strong quantum effect, is an ideal platform for the study of spin-charge interactions and could be utilized as spintronics devices. So far, due to the excess freedoms provided by defect, impurity, interface and boundary effects, the magnetic systems with long-range order are difficult to obtain and manipulate. Exploring novel materials in low-dimensional remains a big challenge. In recent years, based on the well-developed first-principle calculations, together with the classical physical model, it's efficient to predict the critical phenomena in low-dimensional materials accurately, which can provide the insights into the spintronics. Moreover, the hybrid and more advanced calculation methods are utilized as effective to understand the electronic structures of strongly correlated systems with consideration of the coulomb interaction between the local d or f electrons. Plus, the magnetic anisotropic energy is also calculated to confirm the easy-magnetization axis, which could be useful to determine the moderate interaction models and further to anticipate the critical behavior in ferromagnetic or antiferromagnetic systems. To utilize the low-dimensional spintronics above room-temperature, high critical transition temperature is prerequisite and in other words, the coupling mechanism matters. Here, through the overview of the recent low-dimensional researches, the highly reliable low-dimensional spintronics are summarized and their exchange interactions are discussed. For one-dimensional spintronics, ligand-H saturated 3d metal chains and MOF-like organic systems are introduced. The mechanical and thermodynamic stabilities are validated and electronic properties shows that the ground states are ferromagnetic or antiferromagnetic, which both own the high magnetization anisotropic energy. Unlike the benzene-ligand ferromagnetic chains, hydrogen can bring the direct interaction into one-dimensional chains and further modulate the transmission properties at the same time. The direct exchange interaction can be a better way to remain the magnetic states. Another MOF-like chains, the exchange interactions are through the basal plane of carbon materials, which could be a super-long exchange interaction. For two-dimensional materials, the CrI_3 and $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ are narrowed down to monolayer successfully and they are both ferromagnetic, which the critical transition behaviors can be reproduced using Ising or XY model. Besides, the high throughput calculations are carried out to screen the potential two-dimensional spintronics. However, the understanding of the exchange interactions which is important for keeping the ferromagnetic or antiferromagnetic states is rare. In the Fe-Si alloy systems, a possible two-dimensional system is designed and the ground states is ferromagnetic. Additionally, it is half-metallic and the curie temperature can reach up to 780 K, which is a promising candidate to investigate the two-dimensional spintronics and potential is applications. Other recent calculations also show that through the W-dopant in CrI_3 or $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$, the curie temperature can be improved, which originates from the narrowing of virtual gaps between orbitals and enhances the coupling interactions. At last, the modulation of spintronics through magnetic fields is difficult for the device miniaturization. Hence, using the electronic field is more convenient and a novel spintronics called bipolar magnetic semiconductor is introduced as a potential material for spintronics. Some other methods like strain and carrier doping could also be utilized to regulate the intrinsic magnetic behaviors reversely.

low-dimensional materials, spintronics, first-principle, magnetocrystalline anisotropy energy

doi: 10.1360/N972018-00915