

# 二维铁磁材料 $Mn_2AsSb$ 的本征半金属性及磁学性质\*

袁军 汪帆帆 张珠峰 许文武<sup>†</sup> 顾辰杰 周骏<sup>‡</sup>

(宁波大学物理科学与技术学院, 宁波 315211)

(2025 年 11 月 29 日收到; 2026 年 1 月 5 日收到修改稿)

二维半金属铁磁材料因其独特的物理特性而备受关注. 本文设计了一种二维  $Mn_2AsSb$  单层铁磁材料, 并基于密度泛函理论和非平衡格林函数方法, 系统研究其本征半金属性和磁学性质. 结果表明, 该单层材料具有 2.44 eV 的自旋能隙, 表现出本征半金属性, 可在较宽费米窗口 ( $>1.5$  eV) 内 100% 自旋极化. 同时,  $Mn_2AsSb$  单层具有较高的费米速度 ( $1.13 \times 10^5$  m/s)、较大的磁晶各向异性能 (0.025—0.35 meV/unit cell)、高电导率 (约  $10^{11}$  S/cm<sup>2</sup>), 以及较低的吉尔伯特阻尼 ( $2.49 \times 10^{-5}$ ). 此外, 通过自旋极化格林函数方法分析了  $Mn_2AsSb$  单层的有效交换相互作用, 并计算得到了合理的自旋波刚度 ( $92.73$  meV·Å<sup>2</sup>) 和较高的居里温度 ( $263.7$  K  $< T_c < 462.4$  K). 因此,  $Mn_2AsSb$  单层材料具有本征半金属性及优良的磁学性质, 展示出在下一代自旋电子器件中的极大应用潜力.

**关键词:** 二维铁磁材料, 第一性原理, 本征半金属性, 磁学性质**DOI:** [10.7498/aps.75.20251622](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251622)**CSTR:** [32037.14.aps.75.20251622](https://cstr.org/cstr/32037.14.aps.75.20251622)

## 1 引言

自旋电子器件利用电子自旋自由度进行信息的处理、存储和传输, 为信息技术的发展提供了新途径<sup>[1]</sup>. 通常, 自旋电子器件由铁磁材料构建, 因为铁磁材料的自旋向上与自旋向下的电子能带存在内禀分裂, 导致费米面附近两种自旋方向的电子态密度不同, 从而可产生自旋极化的电流<sup>[2]</sup>. 特别是半金属铁磁 (half-metallic ferromagnetic, HMF) 材料, 其在费米能级处呈现特殊的电子结构: 一种自旋方向的电子表现为金属性, 另一种自旋方向的电子表现为绝缘体/半导体性质, 从而理论上可实现高达 100% 的自旋极化率. 这种完全自旋极化的特性使得半金属铁磁材料能够产生近乎纯的自旋

电流, 同时具备高磁阻、高自旋注入效率以及低功耗等优点, 因此在高性能磁存储设备和逻辑运算等自旋电子器件中展现出重要的应用潜力<sup>[3-5]</sup>.

目前已经成功合成了多种用于自旋电子器件的三维 HMF 材料, 例如 Heusler 合金、双钙钛矿以及过渡金属氧化物/硫化物等<sup>[6-8]</sup>. 由于这些三维块体材料制备的自旋电子器件的尺寸较大, 难以满足纳米尺度器件的高集成度和微型化需求. 因此, 二维 HMF 材料被视为下一代纳米器件的理想自旋源, 但它们在维持长程磁有序方面仍面临挑战<sup>[9,10]</sup>. 值得关注的是, 近年来发现的二维范德瓦尔斯铁磁材料, 如  $Cr_2Ge_2Te_6$ ,  $VSe_2$  和  $M_3B_4$  ( $M = Cr, Mn, Fe$ ) 等, 即使处于单层厚度仍可保持本征的长程磁有序状态<sup>[11-13]</sup>. 然而, 这些材料本身不具备半金属性, 即无法在费米面处实现完全的自旋极化. 尽管通过

\* 国家自然科学基金 (批准号: 12474273, 62374097) 和宁波大学王宽诚幸福基金资助的课题.

<sup>†</sup> 通信作者. E-mail: [xuwenwu@nbu.edu.cn](mailto:xuwenwu@nbu.edu.cn)

<sup>‡</sup> 通信作者. E-mail: [zhoujun@nbu.edu.cn](mailto:zhoujun@nbu.edu.cn)

电场调控、异质结设计等手段可在部分材料中诱导出半金属特性<sup>[14]</sup>,但这些方法往往过程复杂、成本高,且调控效果不易保持.因此,开发一种兼具本征长程磁有序和半金属性的二维 HMF 材料,对于推动高性能、低功耗纳米自旋电子器件的发展具有重要意义.

另一方面,结构对称性破缺是调控二维材料磁性与电子性质的关键手段之一<sup>[15,16]</sup>.例如,在双面型二维材料(如  $MnXY$  ( $X, Y = S, Se, Te, X \neq Y$ ) 和  $Cr(I, X)_3$  ( $X = Br, Cl$ )) 中,由于上下表面原子种类不同导致镜面对称性破缺,从而诱导出半金属特性<sup>[17,18]</sup>.研究表明,通过改变晶体结构的对称性,可以有效调控二维材料的电子能带和自旋构型,为实现兼具长程磁有序和半金属性的二维铁磁体提供了可行路径.受此启发,我们拟通过定向设计对称性破缺的晶体结构,构建室温下具有稳定长程磁有序和高自旋极化率的二维 HMF 材料,以满足纳米自旋电子器件对高效自旋注入源的需求.

除半金属性外,二维双面结构铁磁单层的磁学性质也需要满足高性能自旋电子器件的要求.例如,磁晶各向异性 (magnetic crystalline anisotropy, MCA) 决定晶体结构内有利于磁化的方向,是用于评估自旋电子器件的热稳定性和确定自旋转移矩磁阻随机存取存储器 (STT-MRAM) 等自旋电子器件的临界电流的重要参数<sup>[19]</sup>; 吉尔伯特阻尼描述自旋电子器件的磁化进动和自旋泵浦特性,反映自旋电子器件的响应速度<sup>[20]</sup>; 交换相互作用 (exchange interaction, EXC) 反映材料磁有序性、交换刚度和动力学响应的微观机制<sup>[21]</sup>.特别是,居里温度与 EXC 有关,决定自旋电子器件对热波动磁响应的鲁棒性<sup>[22]</sup>.总之,自旋电子器件的性能密切依赖于铁磁材料的磁学性质.

本文基于第一性原理计算,系统研究具有本征半金属性二维  $Mn_2AsSb$  铁磁材料的磁学性质.首先,构建具有结构对称性破缺的双面  $Mn_2AsSb$  单层,并通过结构参数、磁性和稳定性等分析其铁磁构型.在明确  $Mn_2AsSb$  单层的半金属性后,利用密度泛函理论 (density functional theory, DFT) 和非平衡格林函数 (nonequilibrium Green's function, NEGF) 方法计算其自旋相关电导率.同时,计算  $Mn_2AsSb$  单层的 MCA 和吉尔伯特阻尼张量,以评估其在器件中的应用潜力.最后,计算  $Mn_2AsSb$  单层的交换耦合常数、自旋波刚度和居里温度,分

析其磁学性质.研究表明,  $Mn_2AsSb$  单层材料是一种可应用于自旋电子器件的优良半金属铁磁材料.

## 2 计算方法

采用 Quantum-ATK 软件构建二维  $Mn_2AsSb$  单层晶体,并基于第一性原理计算其电子结构<sup>[23]</sup>.计算中选用 PseudoDojo-high 基组,并采用 SG15 赝势库中的广义梯度近似 (GGA)Perdew–Burke–Ernzerhof(PBE) 泛函描述交换关联作用<sup>[24]</sup>.为处理 Mn 原子局域 d 电子的强关联效应,引入 Hubbard  $U$  校正 (GGA+ $U$  方法),通过对  $U$  值在 3–5 eV 范围内进行敏感性测试,确定  $U = 4$  eV 可合理描述 Mn 的电子相互作用<sup>[25,26]</sup>.设置自洽场迭代的能量收敛值为  $1 \times 10^{-6}$  eV,原子间作用力的收敛值为 0.01 eV/Å 和应力收敛值为 0.0001 eV/Å<sup>3</sup>.采用 Monkhorst–Pack 方法进行布里渊区采样, $k$  点网格设置为  $35 \times 35 \times 1$ ,截断能取为 105 Hartree.为消除周期边界条件上下层间相互作用,沿非周期方向 ( $c$  轴) 设置厚度为 30 Å 的真空层.采用冻结声子法计算  $7 \times 7 \times 1$  超胞的声子色散谱,以验证结构的动力学稳定性.其他相关计算方法将在后续章节中详细说明.

## 3 结果与讨论

### 3.1 结构与磁性

利用 Sb 原子取代 MnAs 晶体的一层 As 原子,产生反演对称性破缺,从而构建二维双面结构  $Mn_2AsSb$  单层.如图 1 所示,  $Mn_2AsSb$  单层晶胞由 1 个 As 原子、1 个 Sb 原子和 2 个 Mn 原子组成,属于  $P4mm$  空间群.结构优化后的  $Mn_2AsSb$  单胞的晶格常数  $a = b = 4.61$  Å,最近邻 Mn–Mn 键长  $d_1 = 3.36$  Å, Mn–As–Mn 和 Mn–Sb–Mn 的键角分别为  $\theta_1 = 80.01^\circ$  和  $\theta_2 = 110^\circ$ .为研究不同构型的  $Mn_2AsSb$  单层磁性,如图 2 所示,分别构建了非磁性 (non-magnetic, NM)、铁磁性 (ferromagnetic, FM) 和反铁磁性 (antiferromagnetic, AFM) 的 4 种构型.通过计算 FM 构型与其他构型的能量差,得到  $\Delta E_{FM-NM}$ ,  $\Delta E_{FM-NFM1}$ ,  $\Delta E_{FM-AFM2}$ ,  $\Delta E_{FM-AFM3}$  和  $\Delta E_{FM-AFM4}$  分别为  $-12.57$ ,  $-1.21$ ,  $-1.04$ ,  $-1.12$  和  $-0.37$  eV/(unit cell).显然,铁磁构型的能量在所有构型中是最低的,表明所构建的  $Mn_2AsSb$  铁磁单层是最稳定的.

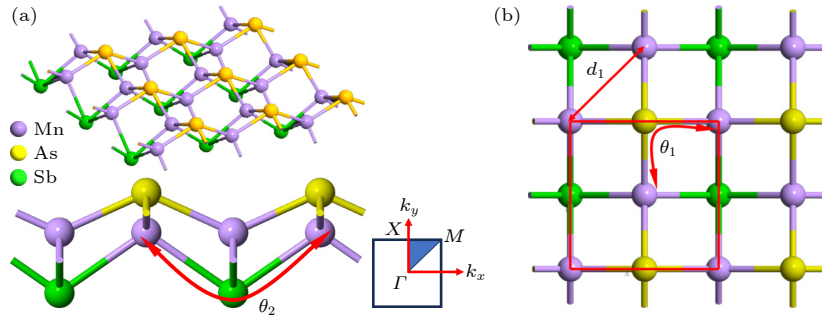


图 1  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  单层晶胞结构的 (a) 透视与侧视图和 (b) 俯视图 (紫色、红色和绿色球体分别代表 Mn, As 和 Sb 原子). 插图为  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  单层结构的布里渊区

Fig. 1. (a) Perspective and side view and (b) top view of the cell structure of  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  monolayer (the purple, red and green balls represent Mn, As, and Sb atoms, respectively). The inset gives the Brillouin Zone of  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  monolayer.

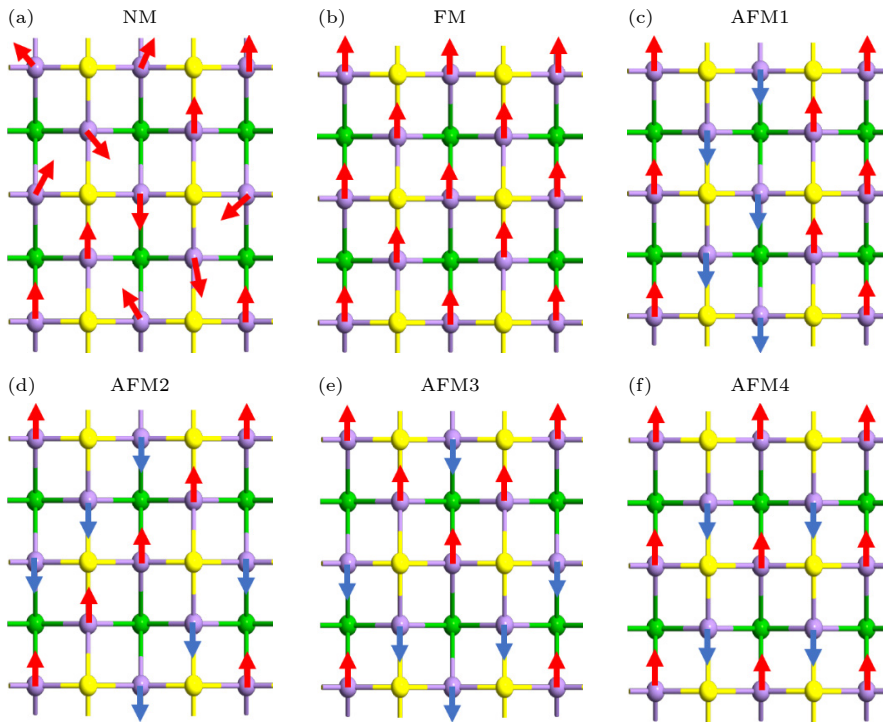


图 2  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  单层的 (a) NM 构型、(b) FM 构型, 以及 (c)—(f) 四种 AFM 构型. 红色与蓝色箭头表示自旋方向

Fig. 2. (a) NM configurations, (b) FM configurations, and (c)–(f) four AFM configurations of  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  monolayer. The red and blue arrows represent spin direction.

事实上,  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  单层的铁磁性由两种交换相互作用的竞争决定: 一种是相邻 Mn 离子部分填充的 d 壳层中电子自旋磁矩之间的直接交换相互作用, 导致 Mn 离子之间的 AFM 耦合; 另一种是超交换相互作用, 即通过 Mn—As/Sb—Mn 中 As 或 Sb 的电子自旋磁矩的相互作用, 导致 Mn 离子之间的 FM 耦合. 根据 Goodenough-Kanamori-Anderson(GKA) 规则, 阳离子-阴离子-阳离子键的键角约为  $90^\circ$  时, 体系倾向于 FM, 约为  $180^\circ$  时, 体系倾向于 AFM<sup>[27]</sup>.  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  的结构数据表明,  $\theta_1$  和  $\theta_2$  的角度都接近  $90^\circ$ , 导致强的 FM, 而相对

较长的距离  $d_1$  导致最近邻 Mn 离子之间较弱的 AFM 耦合. 因此, 超交换相互作用主导了  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  的铁磁性. 利用自旋极化 Mullike 布居分析, 计算出  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  的自旋磁矩  $\mu_S = 8.009\mu_B$  ( $\mu_B$  为玻尔磁子) 中包括 Mn ( $\mu_S^{\text{Mn}} = 4.888\mu_B$ ), As ( $\mu_S^{\text{As}} = -0.769\mu_B$ ) 和 Sb ( $\mu_S^{\text{Sb}} = -0.998\mu_B$ ) 自旋磁矩的贡献. 显然, 两个 Mn 原子的自旋磁矩是主要贡献者, 而 As 和 Sb 原子的自旋磁矩贡献较弱. 这是由于氮族元素通过 As/Sb 的 p 轨道和 Mn 的 3d 轨道与 Mn 原子配位, 在 Mn—As/Sb—Mn 中相邻的 Mn 离子发生了超交换相互作用. 由于 Mn 原子的

自旋磁矩与  $\text{Mn}^{2+}$  离子中三个未配对电子的自旋磁矩 ( $\mu_S^{\text{Mn}} = 5\mu_B$ ) 接近, 说明  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  的铁磁性主要来源于 Mn 原子.

另一方面,  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  单层的铁磁性也与  $\text{Mn}^{2+}$  离子的自旋轨道耦合 (SOC) 相关. 在此, 我们计算  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  的轨道磁矩  $\mu_L$  来分析 SOC 的作用. 对应位于  $i$  处的轨道磁矩  $\mu_L^i$  的笛卡尔分量, 可以表示为<sup>[28]</sup>

$$\langle \mu_L^i \rangle = \text{Re} \sum_{n, \mathbf{k}} \omega_{\mathbf{k}} f_{n, \mathbf{k}} \sum_{\lambda \mu \nu} c_{\lambda}^{n\dagger}(\mathbf{k}) [L_i]_{\lambda \mu} \mathbf{S}_{\mu \nu}(\mathbf{k}) c_{\nu}^n(\mathbf{k}), \quad (1)$$

其中  $n$  为能带指数;  $\mathbf{k}$  为具有相应权重  $\omega_{\mathbf{k}}$  的波矢量;  $f_{n, \mathbf{k}}$  为占据因子. 第二个求和遍历每个位点  $i$  的基函数轨道 ( $\lambda, \mu, \nu$ ),  $c_q^n$  ( $q = \lambda, \nu$ ) 是基轨道的特征向量分量;  $L$  和  $S$  分别表示轨道角动量算符和基轨道重叠矩阵. 根据 (1) 式, 计算出  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  的总轨道磁矩  $\mu_L^{\text{tot}} = 0.0635\mu_B$ , Mn 的轨道磁矩  $\mu_L^{\text{Mn}} = 0.0441\mu_B$ , As 的轨道磁矩  $\mu_L^{\text{As}} = 0.009\mu_B$ , Sb 的轨道磁矩  $\mu_L^{\text{Sb}} = -0.0337\mu_B$ . 显然, 这些轨道磁矩都比对应的自旋磁矩小. 这类似于  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$  的情况, 表明  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  中存在强的 SOC, 产生铁磁性<sup>[29]</sup>. 进一步, 图 3 给出的声子色散关系也表明,  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  的布里渊区的声子带分支都具有实特征频率, 基态构型没有动态变化. 由此可见, 所构建的  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  铁磁材料具有良好的稳定性.

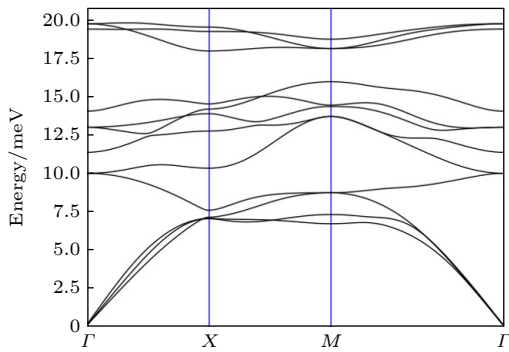


图 3  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  单层的声子色散谱

Fig. 3. Phonon dispersion spectrum of  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  monolayer.

### 3.2 半金属性

现在研究具有 FM 构型的  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  单层的半金属性. 对于不同的电子自旋取向, 计算  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  的能带结构和投影态密度, 如图 4 所示. 从图 4(a) 可以看出, 自旋向下通道的能带结构存在 2.44 eV 的间接带隙, 表现为半导体; 而自旋向上通道的能

带结构在费米能级 ( $\epsilon_F$ ) 附近呈现金属性. 这种典型的半金属能带结构可归结为  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  单层双面结构诱导的晶格场对称性破缺以及产生的轨道选择性占据与杂化. 从图 4(b) 可以看出, 在自旋向下通道中, 导带底 (CBM) 主要来自 Mn-3d 轨道的贡献, 价带顶 (VBM) 主要来自 Mn-d 与 Sb-p(As-p) 轨道的共同作用. 在自旋向上通道中, 对靠近  $\epsilon_F$  电子态的贡献主要来自部分占据的 Mn-3d 轨道与 As/Sb-p 轨道的面内强杂化, 形成穿越  $\epsilon_F$  的类金属带. 呈现出的一个通道的间接带隙和一个通道的类金属带特征, 清晰表明  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  单层的本征半金属性. 再由图 4(c) 可以看出, 在  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  单层中, As/Sb-p 轨道与 Mn-d 轨道间的轨道杂化桥接了局域化的 d 态电子与离域化的 p 态电子, 导致费米能级处出现交叉能带, 从而阻碍了完整带隙的形成, 并赋予其半金属特性. 从图 4(d) 的自旋分辨态密度图可以看出, 自旋向下的 DOS 在费米能级处有一个能隙 (DOS 值为零或接近零), 与能带图 4(a) 中的自旋向下的带隙对应, 而自旋向上的 DOS 在费米能级处有一个峰值, 表明存在可移动的电子态. 总之,  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  单层的电子结构呈现出自旋向上与自旋向下完全不对称的能带和 DOS, 表明存在强局域在 Mn 原子上的自发磁矩, 这是过渡金属铁磁性的主要来源. 同时, 有带隙的自旋向下通道和无带隙的自旋向上通道对应的 DOS 峰值 (图 4(d)) 不仅显示出  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  单层的本征半金属性质, 也意味着它可以在自旋电子器件中产生完全自旋极化的载流子, 因此具有作为理想自旋注入源的潜力.

除半金属性外,  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  能带结构中费米面的形状也反映该材料的许多重要电子特性. 我们计算图 4(a) 中穿过费米能级的三个自旋向上能带所对应的费米面如图 5 所示. 在图 5(a) 中, 对应最低能带的费米面围绕布里渊区的  $\Gamma$  和 X 点, 这种相对局域的费米面预示沿特定晶向具有较高的载流子迁移率. 在图 5(b) 中, 费米面映射的最高能带覆盖除了 M 点以外的整个布里渊区, 这种开放连通的费米面表示该能带主导材料的高电导特性. 中间能带对应的费米面 (图 5(c)) 也主要围绕  $\Gamma$  和 X 点, 具有与最低能带费米面类似的载流子输运性质. 因此, 在器件设计时, 若选用  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  作为电极材料, 为了提高自旋注入效率, 除考量其自旋向上通道能提供 100% 自旋极化载流子的优势, 还应使自

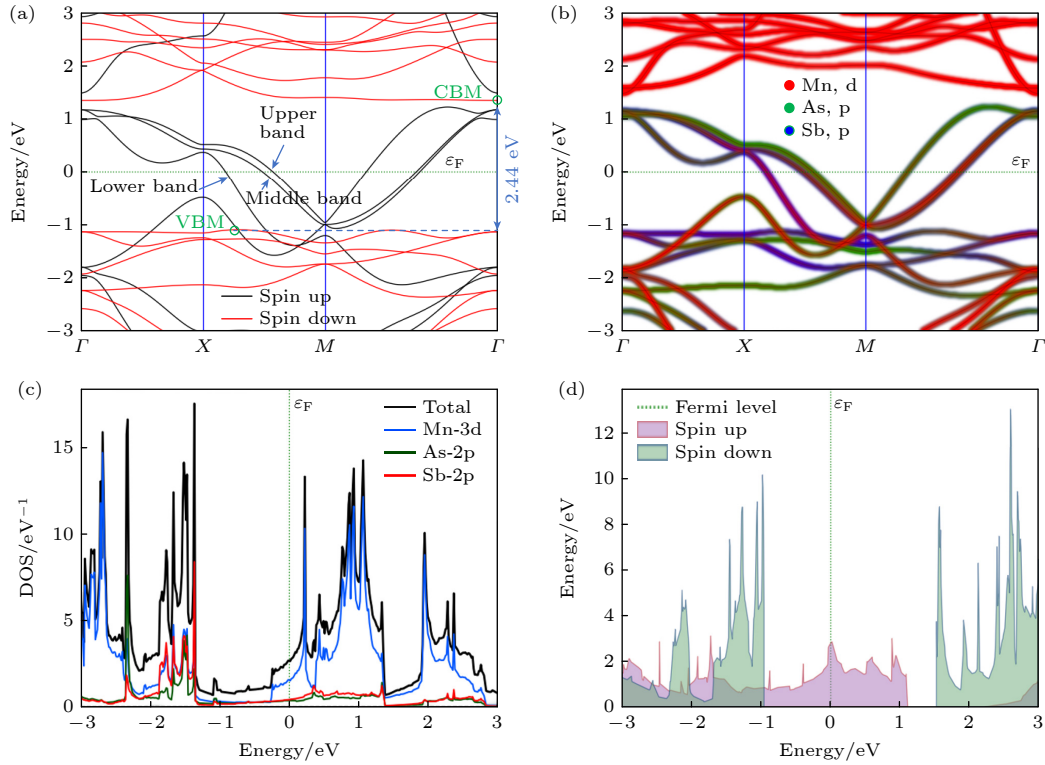


图 4  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  单层的电子结构 (a) 自旋分辨能带结构; (b) 对应原子轨道及其杂化的能带; (c) 总态密度 (TDOS) 和对应原子轨道的投影态密度 (PDOS); (d) 自旋分辨的态密度

Fig. 4. Electronic structure of  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  monolayer: (a) Spin-resolved band structure; (b) band structure corresponding to atomic orbitals and their hybridizations; (c) total density of states (TDOS) and projected density of states (PDOS) corresponding to atomic orbitals; (d) spin-resolved density of states.

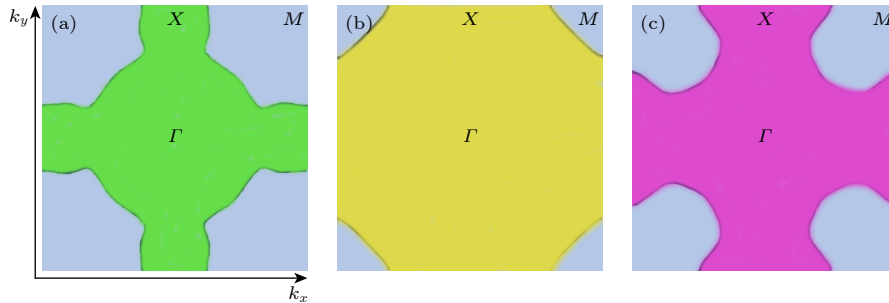


图 5 对应于  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  单层的 (a) 下能带 (绿色)、(b) 上能带 (黄色) 和 (c) 中能带 (粉色) 的二维费米面, 浅蓝色区域表示布里渊区

Fig. 5. 2D Fermi surfaces corresponding to (a) lower band (green), (b) upper band (yellow), and (c) middle band (pink) in the  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  monolayer. The light blue area represents the Brillouin zone.

旋注入源 (另一种铁磁体) 的费米面与  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  的费米面 (图 5) 在形状上相匹配, 这样可以最大限度地减弱界面自旋散射, 降低接触电阻, 实现从源到沟道高效率的自旋极化电流输运<sup>[30,31]</sup>.

进一步, 计算自旋向上通道载流子的费米速度, 以定量评估  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  中自旋极化载流子的输运能力. 实际上, 图 5 中的费米面来自不同的轨道杂化, 导致其上的载流子速度存在各向异性. 为简化起见, 忽略载流子速度的方向, 利用公式  $\hbar v_F =$

$|\nabla_{\mathbf{k}}\epsilon(\mathbf{k})|$ , 计算电子穿过图 5 中所有费米面时费米速度的标量平均值  $v_F$ , 得到电子在整个费米面的平均费米速度  $v_F = 1.13 \times 10^5$  m/s, 表明  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  单层中存在高迁移率的完全自旋极化载流子.

此外, 采用非平衡格林函数 (NEGF) 方法, 研究  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  单层在不同自旋通道中的电子输运性质<sup>[32]</sup>. 在有限尺寸散射区域中, 对于不同自旋通道的能量  $E$ , 材料在弹道输运区的电导由 Landauer-Büttiker 公式给出<sup>[33]</sup>:

$$G_{\sigma} = \frac{e^2}{\pi\hbar} \int_{\varphi_R}^{\varphi_L} T_{\sigma}(E, V_b) [f_L(E - \varphi_L) - f_R(E - \varphi_R)] dE, \quad (2)$$

式中, 下标  $\sigma$  为自旋向上 ( $\uparrow$ ) 态或自旋向下 ( $\downarrow$ ) 态;  $V_b$  为偏置电压;  $e$  为电子电荷;  $\hbar$  为约化普朗克常数;  $f_{L/R}$  和  $\varphi_{L/R} = \varepsilon_F \pm V_b/2$  分别为左 (L) 和右 (R) 电极的费米-狄拉克分布函数和电势.  $T_{\sigma}(E, V_b)$  为偏压  $V_b$  下自旋相关的透射系数, 定义为

$$T_{\sigma}(E, V_b) = \text{Tr}[\mathbf{\Gamma}_{\sigma}^L(E) G_{\sigma}(E, V_b) \mathbf{\Gamma}_{\sigma}^R(E) G_{\sigma}^{\dagger}(E, V_b)], \quad (3)$$

其中  $\mathbf{\Gamma}_{\sigma}^{L(R)}(E)$  为关联左 (L) 或右 (R) 电极自能矩阵  $\Sigma_{\sigma}^{L(R)}(E)$  的展宽矩阵;  $G_{\sigma}$  和  $G_{\sigma}^{\dagger}$  分别为带自旋指标的延迟格林函数和超前格林函数.  $G_{\sigma}(E, V_b) = [ES(E) - H_{\sigma}(E) - \Sigma_{\sigma}^L(E) - \Sigma_{\sigma}^R(E)]^{-1}$  为与导电通道的哈密顿量  $H$  和原子轨道重叠矩阵  $S$  相关的延迟格林函数. 根据 (2) 式和 (3) 式, 计算不同自旋通道下  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  的电导, 结果如图 6 所示. 由图 6 可以看出, 在费米能级附近区域, 自旋向上通道的电导很大, 约为  $10^{11}$  S/cm<sup>2</sup>, 而自旋向下通道的电导几乎可以忽略不计. 这里, 类比 Julliere 模型对隧道磁阻 (TMR) 效应中铁磁层自旋极化的描述 [34], 定义  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  单层的自旋极化率  $P$  为

$$P = \frac{G_{\uparrow} - G_{\downarrow}}{G_{\uparrow} + G_{\downarrow}}, \quad (4)$$

其中  $G_{\uparrow}$  和  $G_{\downarrow}$  分别为自旋向上和自旋向下通道的电导. 则由图 6 和 (4) 式可得, 在约 1.5 eV 的窗口内,  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  单层的自旋极化率  $P$  接近 100%. 因此,  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  的金属特性主要取决于自旋向上载流子诱导的费米面, 并且可以在较宽的偏压范围内产生单纯的自旋电流.

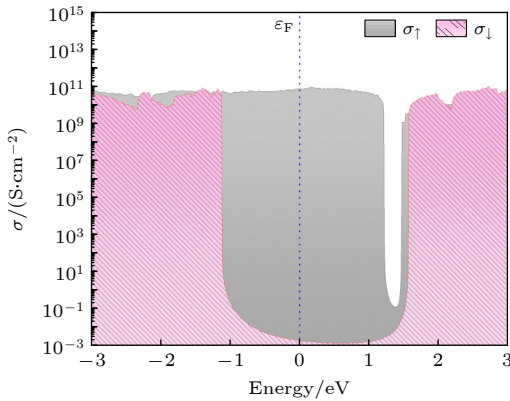


图 6 弹道极限下  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  单层的自旋相关电导

Fig. 6. Spin-dependent conductance of  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  monolayer at the ballistic limit.

### 3.3 磁晶各向异性

$\text{Mn}_2\text{AsSb}$  单层的磁晶各向异性是作为磁存储器件材料的重要性质. 一般而言, 材料的磁晶各向异性是提高长程磁有序热稳定性的先决条件 [35,36]. 就信息的磁存储而言, 对于 STT-MRAM 等自旋电子器件, 稳定写入信号 (数据存储) 所需的能量  $E_{\text{SW}}$  与材料的磁晶各向异性  $E_{\text{MCA}}$  成正比, 即写入信号的稳定性与磁介质层中两个磁化方向之间的能量差有关 [21,37].  $E_{\text{MCA}}$  高, 表示材料的热稳定性好, 不受热涨落的影响, 可以保持数据存储的稳定. 另一方面, 写入信号需要的反转磁化方向的临界电流  $I_c$  也与  $E_{\text{MCA}}$  成正比 [38]:

$$I_c = 2\alpha \frac{e\gamma}{\chi\mu_B} E_{\text{MCA}}, \quad (5)$$

其中  $\alpha$  和  $\gamma$  分别为吉尔伯特阻尼和回旋磁比;  $e$  和  $\mu_B$  分别为电子电荷量和玻尔磁子;  $\chi$  是与磁介质层自旋极化有关的几何函数. 由 (5) 式可见, 如果需要低功耗写入信号, 就要减少  $I_c$ , 则期望低的  $E_{\text{MCA}}$ , 但这又不利于数据存储的稳定性. 因此, 在不牺牲数据存储稳定性的前提下, 尽可能保持低功耗信号写入, 需要选择合适的  $E_{\text{MCA}}$ , 以在  $I_c$  和  $E_{\text{sw}}$  之间作出权衡.

现在, 我们计算  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  的  $E_{\text{MCA}}$ , 并分析其在应力调制下的行为. 根据力定理,  $E_{\text{MCA}}$  可按以下公式计算 [39,40]:

$$E_{\text{MCA}}^{\text{p}} = \sum_{n,\mathbf{k}} f_{n,\mathbf{k}}(\theta, \varphi) E_{n,\mathbf{k}}(\theta, \varphi) \omega_{n,\mathbf{k}}^{\text{p}}(\theta, \varphi) - \sum_{n,\mathbf{k}} f_{n,\mathbf{k}}(\theta_0, \varphi_0) E_{n,\mathbf{k}}(\theta_0, \varphi_0) \omega_{n,\mathbf{k}}^{\text{p}}(\theta_0, \varphi_0), \quad (6)$$

其中  $f_{n,\mathbf{k}}$  和  $E_{n,\mathbf{k}}$  分别是与能带指数  $n$  和波矢量  $\mathbf{k}$  对应的占据因子和能带能量, 球坐标  $(\theta, \varphi)$  描述自旋方向,  $(\theta_0, \varphi_0)$  为初始自旋方向,  $\omega_{n,\mathbf{k}}^{\text{p}}$  为投影权重, 表示为

$$\omega_{n,\mathbf{k}}^{\text{p}} = \langle \psi_{n,\mathbf{k}} | \frac{S\mathbf{P} + \mathbf{P}S}{2} | \psi_{n,\mathbf{k}} \rangle, \quad (7)$$

式中,  $\psi_{n,\mathbf{k}}$  为本征态;  $S$  和  $P$  分别为重叠矩阵和投影矩阵,  $P$  为对角奇异矩阵. 不同原子轨道的  $E_{\text{MCA}}$  可以通过投影到不同的原子轨道上得到, 即  $E_{\text{MCA}}^i = \sum_{\text{p}} E_{\text{MCA}}^{i\text{p}}$ , 求和遍历第  $i$  个原子的所有轨道  $\text{p}$ . 为了保证费米能级附近的能量收敛, 我们在整个布里渊区域设置密集的  $\mathbf{k}$  点采样 ( $45 \times 45 \times 1$ ). 由于存在两个角变量, 为了简单起见, 设置  $\theta_0 = 0^\circ$

和  $\varphi_0 = 0^\circ$ , 计算在面内方位角  $\varphi = 0^\circ$  和  $\varphi = 45^\circ$  时  $E_{\text{MCA}}$  随极角  $\theta$  的变化, 结果如图 7 所示. 对比图 7(a) 和图 7(b) 可见,  $E_{\text{MCA}}$  不仅强烈地依赖于  $\theta$ , 也随  $\varphi$  有一定改变, 说明面外存在较大的磁晶各向异性, 面内各向异性较小. 在无应变情况下, 当  $\theta = 90^\circ$  时,  $E_{\text{MCA}}$  达到最大, 其值为 0.35 和 0.4 meV/(unit cell), 在  $\theta = 0^\circ$  时,  $E_{\text{MCA}}$  为最小值, 分别为 0.025 和 0.03 meV/(unit cell). 由于在  $x$ - $y$  面内  $E_{\text{MCA}}$  最大, 因此垂直  $x$ - $y$  面的方向是易磁化方向, 即对应于  $z$  ( $c$ -轴) 方向. 值得注意的是,  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  的  $E_{\text{MCA}}$  最大值显著高于 Fe, Co 和 Ni 的  $E_{\text{MCA}}$  (1—3  $\mu\text{eV}/\text{atom}$ )<sup>[41]</sup>, 甚至可与  $\text{CrI}_3$ ,  $\text{CrBr}_3$ ,  $\text{CrCl}_3$  的  $E_{\text{MCA}}$  (0.02—0.8 meV/(Cr atom)) 相媲美<sup>[42]</sup>, 表明其具有好的热稳定性.

进一步, 计算应变情况下  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  单层的  $E_{\text{MCA}}$ , 结果也显示在图 7 中. 可以看出, 当沿面内方向施加双轴应变时, 无论  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  单层受到压缩或拉伸,  $E_{\text{MCA}}$  都随着应变的增加而增大, 且拉伸应变的影响更为明显. 由此可见, 应变可以显著改变  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  单层的  $E_{\text{MCA}}$ . 由于结构对称性破缺,  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  单层在应变作用下, Mn—As/Sb 的键长和键角发生改变, 从而调整 Mn 原子周围的晶体场, 导致 Mn 原子的自旋-轨道耦合 (SOC) 相互作用发生改变, 从而引起  $E_{\text{MCA}}$  的变化, 尤其是拉伸应变引起的晶格扩张使  $E_{\text{MCA}}$  的应变响应格外显著. 因此, 施加应变可以实现  $E_{\text{MCA}}$  的有效调控, 以满足器件制造和应用的要求.

### 3.4 吉尔伯特阻尼

吉尔伯特阻尼  $\alpha$  是决定磁性材料动态响应的

重要参数. 由 (5) 式可知, 临界电流  $I_c$  不仅与磁性材料的  $E_{\text{MCA}}$  正相关, 也与  $\alpha$  正相关. 如果磁性材料具有小的  $\alpha$ , 则可以获得小的  $I_c$ , 从而降低自旋电子器件的能耗. 根据 Kambersky 的扭矩关联模型,  $\alpha$  的矩阵元表示为<sup>[43,44]</sup>:

$$\alpha_{pq} = \frac{g}{m_s \pi} \int_{\Omega} \sum_{n,m} \mathcal{W}_{n,m}(\mathbf{k}) \mathcal{T}_{n,m}^q(\mathbf{k}) [\mathcal{T}_{n,m}^p(\mathbf{k})]^\dagger d\mathbf{k}, \quad (8)$$

其中  $g$  为朗德 (Landé) 因子;  $m_s$  为总磁矩;  $p, q$  ( $= x, y, z$ ) 为笛卡尔坐标. 波矢量  $\mathbf{k}$  的积分遍历整个布里渊区体积  $\Omega$ , 并对所有能带指标 ( $n, m$ ) 求和.  $\mathcal{T}_{n,m}^p(\mathbf{k}) = \langle n, \mathbf{k} | \mathcal{T}^p | m, \mathbf{k} \rangle$  是扭矩算子  $\mathcal{T}^p = [\sigma^p, H_{\text{SO}}]$  的矩阵元, 其中  $\sigma^p$  和  $|n, \mathbf{k}\rangle$  分别是自旋-轨道耦合哈密顿量  $H_{\text{SO}}$  的泡利自旋矩阵和布洛赫本征态. 两个能带  $E_{n,\mathbf{k}}$  和  $E_{m,\mathbf{k}}$  之间的谱重叠函数  $\mathcal{W}_{n,m}(\mathbf{k})$  定义为

$$\mathcal{W}_{n,m}(\mathbf{k}) = \int \eta(E) A_{n,\mathbf{k}}(E, \Lambda) A_{m,\mathbf{k}}(E, \Lambda) dE, \quad (9)$$

式中,  $\eta(E) = -\partial f / \partial E$  为费米-狄拉克分布函数  $f(E, \varepsilon_F)$  的负导数,  $A_{n,\mathbf{k}}(E, \Lambda) = (1/\pi) [ \Lambda / ((E_{n,\mathbf{k}} - E)^2 + \Lambda^2) ]$  为具有寿命展宽  $\Lambda$  的洛伦兹线型函数,  $\Lambda$  描述所有散射过程, 如电子-声子散射、杂质散射、合金散射和自旋相关散射<sup>[45]</sup>. 然而, 对纯晶体而言, 当环境温度  $T > 0$  K 时, 电子-声子散射是主要机制. 因此, 吉尔伯特阻尼  $\alpha$  是  $\Lambda$  的函数, 描述其随电子-声子散射过程的变化.

在计算中, 考虑  $\eta(E)$  的温度依赖性, 选择  $40 \times 40 \times 1$  的  $k$  点采样以保证  $\alpha_{pq}$  的收敛性.  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  的  $\alpha$  作为  $\Lambda$  的函数如图 8 所示. 由图 8 可以看出, 由于  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  是对称性破缺的各向异性晶体, 无论

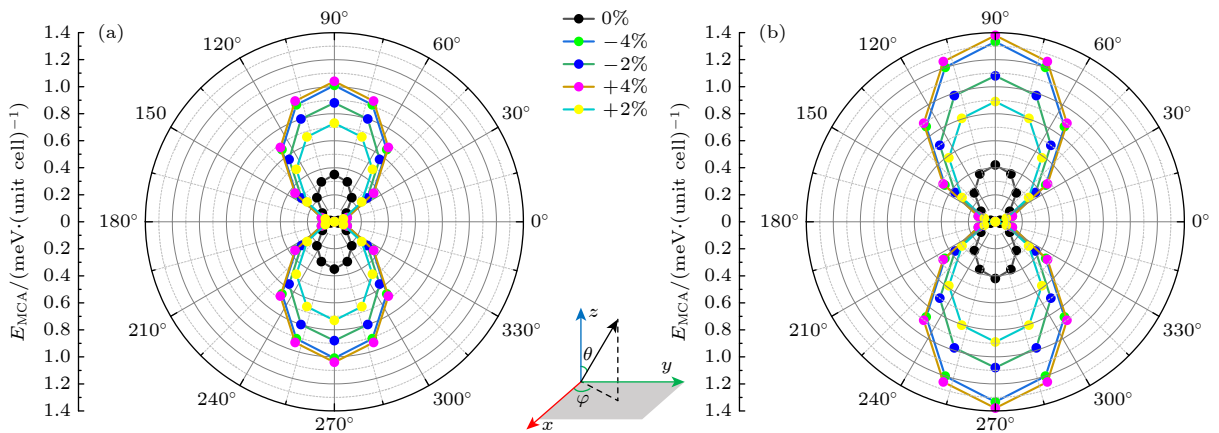


图 7 方位角 (a)  $\varphi = 0^\circ$  和 (b)  $\varphi = 45^\circ$  时,  $E_{\text{MCA}}$  随极角  $\theta$  与应变的变化

Fig. 7. At the azimuthal angles (a)  $\varphi = 0^\circ$  and (b)  $\varphi = 45^\circ$ ,  $E_{\text{MCA}}$  dependent on polar angle  $\theta$  and the strains.

有无应变,  $\alpha$  的面内分量都几乎相等 ( $\alpha_{xx} \simeq \alpha_{yy}$ ); 在无应变和施加压缩应变时, 面内分量大于面外分量, 而对应拉伸应变, 当  $\Lambda > 0.7$  meV 时, 面内分量小于面外分量. 从图 8 还可以看出, 如果沿面内方向施加双轴应变, 无论是压缩还是拉伸, 面内分量的值都表现出明显的减小. 有趣的是, 无论有无应变,  $\alpha$  的面内分量随寿命展宽  $\Lambda$  呈现非单调变化, 并在  $\Lambda_0$  ( $= 0.85, 1.2, 3.5$  meV) 处出现最小值  $\alpha_{\min}$  ( $= 2.51 \times 10^{-6}, 6.52 \times 10^{-6}, 2.49 \times 10^{-5}$ ). 因为  $\Lambda_0$  对应于材料本征电子-声子散射的最优能量, 反映电子态密度与带内和带间跃迁的能量平衡,  $\alpha$  出现最小值, 说明计算是收敛且可靠的. 此外, 即使没有施加应变, 吉尔伯特阻尼的最小面内分量  $\alpha_{\min} = 2.49 \times 10^{-5}$  也低于已经报道的材料, 如传统铁磁材料 (Fe, Co, Ni)<sup>[46]</sup>, 金属氧化物 ( $\text{CrO}_2$ ,  $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ )<sup>[8,47]</sup> 和 Heusler 合金 ( $\text{Co}_2\text{FeGa}$ )<sup>[48]</sup>, 因此具有显著优势. 这里极低的吉尔伯特阻尼可能源于  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  单层的低态密度和低散射的电子环境. 由于  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  的双面结构破坏的是垂直对称性, 所以无应变或者沿面内方向施加双轴应变, 晶格参数  $a$  与  $b$  保持相等, 面内几乎各向同性, 而面内与面外的阻尼分量差异较大. 对于压缩与拉伸应变下的面外阻尼出现的相反行为, 可以归结为压缩应变通过增强面内晶体场, 稳固了面内阻尼的主导地位, 而拉伸应变使面内晶格扩张, 导致面内晶体场强度减弱, 当寿命展宽  $\Lambda > 0.7$  meV 时激发 Mn 原子的  $d_z$  轨道与具有较强自旋轨道耦合的 As/Sb 原子的  $p_z$  轨道在垂直方向上的杂化, 形成高的面外阻尼.

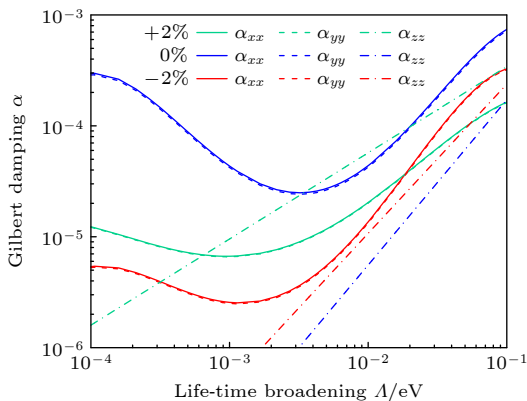


图 8 不同应变条件下, 吉尔伯特阻尼张量  $\alpha$  随寿命展宽  $\Lambda$  的变化

Fig. 8. Gilbert damping tensors  $\alpha$  as the function of life-time broadening  $\Lambda$  for various strains.

### 3.5 交换相互作用和居里温度

根据海森伯模型, 交换相互作用的哈密顿量为<sup>[49]</sup>

$$H_{\text{ex}} = - \sum_{i \neq j} J_{ij} \hat{e}_i \cdot \hat{e}_j, \quad (10)$$

式中,  $\hat{e}_i$  和  $\hat{e}_j$  为指向原子  $i$  和  $j$  的磁矩方向的单位矢量;  $J_{i,j}$  为  $i$  和  $j$  处的电子自旋的交换耦合常数,  $J_{i,j}$  的正负号表示两个自旋之间的铁磁或反铁磁耦合. 应用 Liechtenstein-Katsnelson-Antropov-Gubanov(LKAG) 方程<sup>[50]</sup>,  $J_{i,j}$  由下式计算:

$$J_{ij} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\epsilon_F} \text{Tr}[\hat{G}_{ij}^\dagger \hat{V}_j \hat{G}_{ji}^\dagger \hat{V}_i] dE, \quad (11)$$

其中  $\hat{G}_{ij}^\dagger$  和  $\hat{G}_{ji}^\dagger$  表示  $i$  和  $j$  之间的实空间格林函数算子;  $\hat{V}_i$  和  $\hat{V}_j$  分别是  $i$  和  $j$  处的局域交换相互作用势.

具体到  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  单层铁磁材料, 考虑其磁矩主要来自 Mn 的贡献, 我们计算 ( $7 \times 7 \times 1$ ) 超胞内连续相邻 8 个 Mn 离子的局部磁矩之间的交换耦合  $J_{i,j}$ . 图 9 给出了位于中心位置 ( $i = 0$ ) 与第  $j$  个近邻位置距离  $R_{0j}$  ( $= |\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_0|$ ) 的 Mn 离子之间的交换耦合  $J_{0j}$  的计算结果. 由图 9 可见,  $J_{0j}$  随着  $R_{0j}$  增大而急剧减小, 并且在第一个最近邻位置 ( $j = 1$ ) 之后表现出非常弱的振荡行为, 这表明交换相互作用的范围实际上非常小, 与 Ruderman-Kittel-Kasuya-Yoshida(RKKY) 相互作用相同<sup>[51]</sup>. 此外, 还研究了在应变影响下  $J_{0j}$  的变化. 如图 9 所示, 应变在一定程度上延缓了  $J_{0j}$  的下降, 但趋势与无

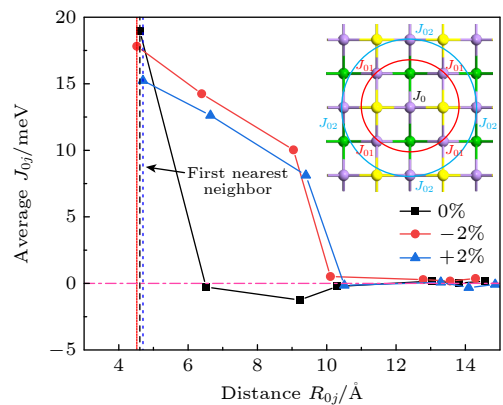


图 9 不同应变条件下, 交换相互作用  $J_{0j}$  随 Mn 的位置间距  $R_{0j}$  的变化关系. 红色、黑色和蓝色垂直虚线分别表示不同应变下第一近邻的间距

Fig. 9. Dependence of exchange interaction  $J_{0j}$  on the distance  $R_{0j}$  between Mn sites for various strain. Vertical dashed lines in red, black and blue indicate the distance to the first nearest neighbor at various strains.

应变时的  $J_{0j}$  相同, 特别是对于  $j > 3$  的情况. 进一步, 对于  $-2\% \sim +2\%$  范围内的外加应变, 计算出相应的总交换耦合常数分别为 17.58(0), 41.452(-2%) 和 35.528(+2%) meV. 这里, 交换耦合常数的值均为正, 再次证实  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  的铁磁性.

为评估  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  磁有序的稳定性与交换作用强度, 计算自旋波刚度  $D$ . 对于二维均匀铁磁材料, 在自旋波能量的长波极限下,  $D$  近似表示为<sup>[52]</sup>

$$D = \lim_{\eta \rightarrow 0} D(\eta) D = \lim_{\eta \rightarrow 0} D(\eta), \quad (12)$$

$$D(\eta) = \sum_j \frac{2\mu_B}{3\mu_s} J_{0j} R_{0j}^2 \exp\left(-\eta \frac{R_{0j}}{R_{01}}\right), \quad (13)$$

式中,  $\mu_s$  为每个原子的自旋磁矩;  $\eta$  为收敛参数. 在没有应变的情况下, 计算得到  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  的自旋波刚度  $D(0) = 92.73 \text{ meV} \cdot \text{\AA}^2$ , 表明  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  中存在较强的交换相互作用和稳定的磁有序, 预期其具有较高的居里温度.

最后, 作为评价材料磁化转变的关键参数, 评估  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  单层的居里温度  $T_c$ . 对于四方晶格铁磁材料, 由伊辛模型 (IM) 和自旋波 (SW) 理论计算居里温度的表达式分别为<sup>[53,54]</sup>

$$T_c^{\text{IM}} = \frac{2J}{k_B \ln(1 + \sqrt{2})}, \quad (14)$$

$$T_c^{\text{SW}} = \frac{\pi JS^2}{2k_B \ln\left(\frac{\Delta + 2\pi JS}{\Delta}\right)}, \quad (15)$$

式中,  $k_B$  为玻尔兹曼常数;  $J = \sum_j J_{0j}$  表示位于设定中心 ( $i = 0$ ) 和位于  $j$  的原子之间的总交换相互作用, 自旋波能隙  $\Delta = 2E_{\text{MCA}}/(nS)$ , 其中  $n$  和  $S$  分别是每个单胞包含的 Mn 原子数和 Mn 原子自旋. 对于四方晶格  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  单层,  $n = 2$  和  $S = 5/2$ , 由图 9 和最大  $E_{\text{MCA}}$  值, 计算得到无应变时  $T_c^{\text{IM}} = 462.36 \text{ K}$  和  $T_c^{\text{SW}} = 263.70 \text{ K}$ . 显然,  $T_c^{\text{IM}} > T_c^{\text{SW}}$ . 一般地, 伊辛模型给出高估的居里温度, 而自旋波理论给出低估的值, 所以预期  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  单层的居里温度在以上两个估值之间. 还需指出, 尽管自旋波理论得到的  $T_c^{\text{SW}}$  较小, 但仍高于其他典型的二维铁磁材料的居里温度, 如  $\text{CrI}_3$ <sup>[36]</sup> 和  $\text{CrXTe}_3$  ( $X = \text{Si}, \text{Ge}$ )<sup>[55]</sup>. 进一步, 计算沿面内方向施加双轴应变情况下的居里温度, 得到压缩应变 ( $-2\%$ ) 下的  $T_c^{\text{IM}} = 1150.7 \text{ K}$  和  $T_c^{\text{SW}} = 585.89 \text{ K}$ , 拉伸应变 ( $+2\%$ ) 下的  $T_c^{\text{IM}} = 935.45 \text{ K}$  和  $T_c^{\text{SW}} = 488.18 \text{ K}$ . 可

见, 施加应变可以增强原子间总的交换相互作用, 从而调控半金属铁磁材料  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  的居里温度.

## 4 结 论

本文系统地研究了二维铁磁材料  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  的本征半金属性和磁学性质. 发现该材料具有大的自旋能隙, 可以产生纯自旋电流和高注入效率, 可以选择作为高性能自旋电子器件的注入源材料. 此外, 该材料具有较大的 MCA、较低的吉尔伯特阻尼和合理的自旋波刚度, 可以优化纳米级自旋电子器件的热稳定性和临界电流. 由于  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  的本征半金属性及其良好的磁学性质, 也可以选择作为自旋电子器件中的电极材料. 此外, 在应变调控下, 可以增大  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  的磁晶各向异性, 进一步减小吉尔伯特阻尼, 获得更高的居里温度. 也需要指出,  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  单层铁磁材料的实验制备还未见报道, 但参考已被成功制备的二维磁性材料, 实际  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  样品的磁学性质会受到缺陷、应变、衬底相互作用等因素影响<sup>[56,57]</sup>. 总之, 本文的理论研究表明, 二维本征半金属  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  铁磁材料具有优异的磁学性质, 可望在下一代纳米自旋电子器件中获得应用.

## 参考文献

- [1] Zhang Y, Feng X Q, Zheng Z Y, Zhang Z Z, Lin K L, Sun X H, Wang G D, Wang J K, Wei J Q, Vallobra P, He Y, Wang Z X, Chen L, Zhang K, Xu Y, Zhao W S 2023 *Appl. Phys. Rev.* **10** 011301
- [2] Hirohata A, Yamada K, Nakatani Y, Prejbeanu I L, Dieny B, Pirro P, Hillebrands B 2020 *J. Magn. Magn. Mater.* **509** 166711
- [3] Liu H, Honda Y, Taira T, Matsuda K, Arit M, Uemura T, Yamamoto M 2012 *Appl. Phys. Lett.* **101** 132418
- [4] Hu B, Moges K, Honda Y, Liu H, Uemura T, Yamamoto M 2016 *Phys. Rev. B* **94** 094428
- [5] Shen Y, Kan D, Lin I, Chu M, Suzuki I, Shimakawa Y 2020 *Appl. Phys. Lett.* **117** 042408
- [6] Farshchi R, Ramsteiner M 2013 *J. Appl. Phys.* **113** 191101
- [7] Li M R, Retuerto M, Deng Z, Stephens P W, Croft M, Huang Q, Wu H, Deng X, Kotliar G, Sanchez-Benitez J, Hadermann J, Walker D, Greenblatt M 2015 *Angew. Chem. Int. Ed.* **54** 12069
- [8] Zhang Z, Cheng M, Yu Z, Zou Z, Liu Y, Shi J, Lu Z, Xiong R 2020 *Phys. Rev. B* **102** 014454
- [9] Cao T, Li Z, Louie S G 2015 *Phys. Rev. Lett.* **114** 236602
- [10] Jiang C, Wang Y, Zhang Y, Wang H, Chen Q, Wan J 2018 *J. Phys. Chem. C* **122** 21617
- [11] 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
- [12] Bonilla M, Kolekar S, Ma Y, Diaz H C, Kalappattil V, Das R, Eggers T, Gutierrez H R, Phan M H, Batzill M 2018 *Nat. Nanotechnol.* **13** 289
- [13] Ma C, Wang S, Gao C, Wang J 2024 *Sci. Technol. Adv. Mater.* **25** 2404384
- [14] Nazir S, Liaqat T, Alvi K, Zulfiqar M 2023 *Mater. Chem. Phys.* **307** 128149
- [15] Zhang C, Nie Y, Sanvito S, Du A 2019 *Nano Lett.* **19** 1366
- [16] Yuan J, Yang Y, Cai Y, Wu Y, Chen Y, Yan X, Shen L 2020 *Phys. Rev. B* **101** 094420
- [17] Liang J, Wang W, Du H, Halla A, Garcia K, Chshiev M, Fert A, Yang H 2020 *Phys. Rev. B* **101** 184401
- [18] Xu C, Feng J, Prokhorenko S, Nahas Y, Xiang H and Bellaiche L 2020 *Phys. Rev. B* **101** 060404
- [19] Watanabe K, Jinnai B, Fukami S, Sato H, Ohno H 2018 *Nat. Commun.* **9** 663
- [20] Gilbert T L 2004 *IEEE Trans. Magn.* **40** 3443
- [21] Heinrich B, Cochran J F 1993 *Adv. Phys.* **42** 523
- [22] Brännvall M A, Persson G, Casillas-Trujillo L, Armiento R, Alling B 2024 *Phys. Rev. Mater.* **8** 114417
- [23] Smidstrup S, Markussen T, Vancraeyveld P, Wellendorff J, Schneider J, Gunst T, Verstichel B, Stradi D, Khomyakov P A, Vej-Hansen U G, Lee M E, Chill S T, Rasmussen F, Penazzi G, Corsetti F, Ojanperä A, Jensen K, Palsgaard M L N, Martinez U, Blom A, Brandbyge M, Stokbro K 2020 *J. Phys. Condens. Matter* **32** 015901
- [24] Perdew J P, Burke K, Ernzerh M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [25] Liechtenstein A I, Anisimov V I, Zaanen J 1995 *Phys. Rev. B* **52** R5467
- [26] Zhou J, Sun Q 2011 *J. Am. Chem. Soc.* **133** 15113
- [27] Yorulmaz U, Šabani D, Sevik C, Milošević M V 2024 *2D Mater.* **11** 035013
- [28] Autes G, Barreateau C, Spanjaard D, Desjonqueres M C 2006 *J. Phys. Condens. Matter* **18** 6785
- [29] Zhuang H L, Kent P R C, Hennig R G 2016 *Phys. Rev. B* **93** 134407
- [30] Karpan V M, Giovannetti G, Khomyakov P A, Talanana M, Starikov A A, Zwierzycki M, van den Brink J, Brocks G, Kelly P J 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 176602
- [31] Harada T, Ohkubo I, Lippmaa M, Sakurai Y, Matsumoto Y, Muto S, Koinuma H, Oshima M 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 076602
- [32] Stradi D, Martinez U, Blom A, Brandbyge M, Stokbro K 2016 *Phys. Rev. B* **93** 155302
- [33] Büttiker M, Imry Y, Landauer R, Pinhas S 1985 *Phys. Rev. B* **31** 6207
- [34] Qi Y, Xing D Y, Dong J 1998 *Phys. Rev. B* **58** 2783
- [35] Mermin N D, Wagner H 1966 *Phys. Rev. Lett.* **17** 1133
- [36] 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
- [37] Dieny B, Chshiev M 2017 *Rev. Mod. Phys.* **89** 025008
- [38] Ikeda S, Miura K, Yamamoto H, Mizunuma K, Gan H D, Endo M, Kanai S, Hayakawa J, Matsukura F, Ohno H 2010 *Nat. Mater.* **9** 721
- [39] Li D, Barreateau C, Castell M R, Silly F, Smogunov A 2014 *Phys. Rev. B* **90** 205409
- [40] Ghosh R K, Jose A, Kumari G 2021 *Phys. Rev. B* **103** 054409
- [41] Halilov S V, Perlov A Y, Oppeneer P M, Yaresko A N, Antonov V N 1998 *Phys. Rev. B* **57** 9557
- [42] Webster L, Yan J A 2018 *Phys. Rev. B* **98** 144411
- [43] Gilmore K, Idzerda Y U, Stiles M D 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 027204
- [44] Thonig D, Kvashnin Y, Eriksson O, Pereiro M 2018 *Phys. Rev. Mater.* **2** 013801
- [45] Gilmore K, Garate I, MacDonald A H, Stiles M D 2011 *Phys. Rev. B* **84** 224412
- [46] Gilmore K, Stiles MD, Seib J, Steiauf D, Fähnle M 2010 *Phys. Rev. B* **81** 174414
- [47] Liao Z, Huijben M, Zhong Z, Gauquelin N, Macke S, Green R J, Van Aert S, Verbeeck J, Van Tendeloo G, Held K, Sawatzky G A, Koster G and Rijnders G 2016 *Nat. Mater.* **15** 425
- [48] Santos B L D, Krohling A C, Krambrock K, Passamani E C, Macedo W A A 2025 *J. Magn. Magn. Mater.* **614** 172691
- [49] Liechtenstein A I, Katsnelson M I, Antropov V P, Gubanov V A 1987 *J. Magn. Magn. Mater.* **67** 65
- [50] Han M J, Ozaki T, Yu J 2004 *Phys. Rev. B* **70** 184421
- [51] Rahman A, Rehman M U, Yousaf M, Kiani M, Zhao H Z, Wang J L, Lu Y L, Ruan K Q, Dai R C, Wang Z P, Liu W, Zhang L, Zhang Z M 2022 *Phys. Rev. B* **105** 214410
- [52] Sipr O, Mankovsky S, Ebert H 2019 *Phys. Rev. B* **100** 024435.
- [53] Onsager L 1944 *Phys. Rev.* **65** 117
- [54] Lado J L and Fernández-Rossier J 2017 *2D Mater.* **4** 035002
- [55] Li X and Yang J 2014 *J. Mater. Chem. C* **2** 707
- [56] Wang H Y, Liu Y J, Xun L L, Li J, Yang Q, Tian Q Y, Nie T X, Zhao W S 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 127301 (in Chinese) [王海宇, 刘英杰, 寻璐璐, 李竞, 杨晴, 田祺云, 聂天晓, 赵巍胜 2021 物理学报 **70** 127301]
- [57] Li P G, Zhang J H, Tao Y, Zhong D Y 2022 *Acta Phys. Sin.* **71** 127505 (in Chinese) [李培根, 张济海, 陶野, 钟定永 2022 物理学报 **71** 127505]

# Intrinsic half-metallicity and magnetic properties of two-dimensional ferromagnetic material $\text{Mn}_2\text{AsSb}$ \*

YUAN Jun WANG Fanfan ZHANG Zhufeng XU Wenwu †

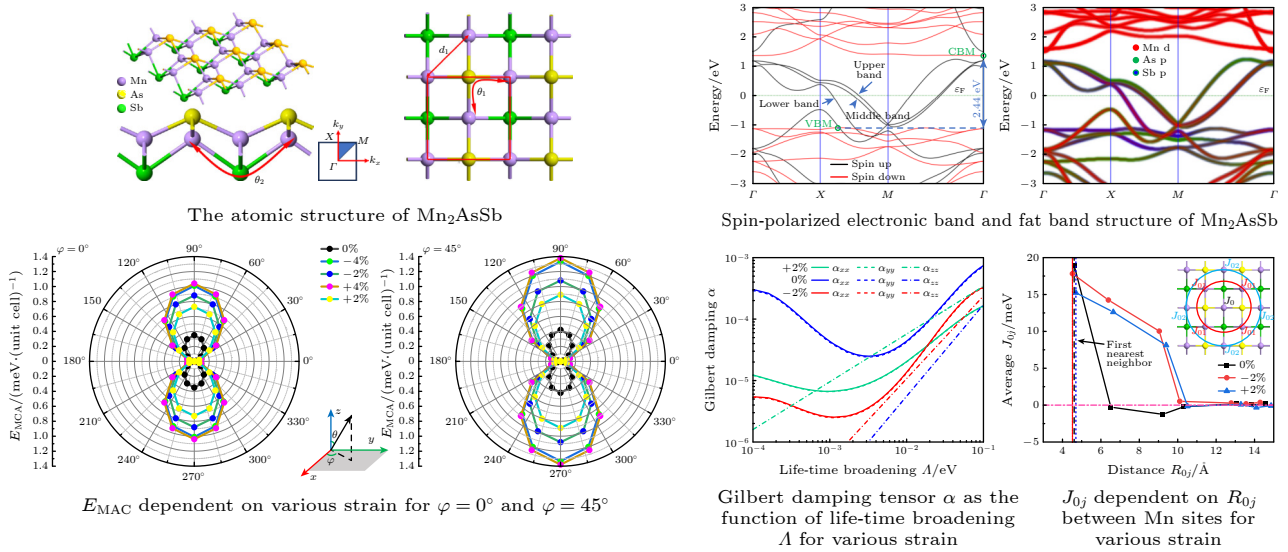
GU Chenjie ZHOU Jun ‡

(School of Physical Science and Technology, Ningbo University, Ningbo 315211, China)

(Received 29 November 2025; revised manuscript received 5 January 2026)

## Abstract

Two-dimensional half-metallic ferromagnet materials have attracted significant attention because of their fascinating physical properties. Herein, a two-dimensional  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  monolayer ferromagnetic material was designed, and its intrinsic half-metallicity and magnetic properties were systematically investigated through density functional theory (DFT) and the nonequilibrium Green's function (NEGF) method. Research results show that  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  monolayer has a spin gap of 2.44 eV, exhibits intrinsic half-metallicity, and can achieve 100% spin-polarization within a wide Fermi window ( $>1.5$  eV). Meanwhile, the  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  monolayer has a high Fermi velocity ( $1.13 \times 10^5$  m/s), a large magnetic crystalline anisotropy ( $0.025\text{--}0.35$  meV/(unit cell)), a high electrical conductivity ( $\sim 10^{11}$  S/cm<sup>2</sup>), and a low Gilbert damping ( $2.49 \times 10^{-5}$ ). Furthermore, the effective exchange interaction of  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  monolayer is explored by using the spin-polarized Green's function formalism. The calculations give a reasonable spin wave stiffness ( $92.73$  meV·Å<sup>2</sup>) and a high Curie temperature ( $263.7$  K  $< T_c < 462.4$  K). Therefore, the  $\text{Mn}_2\text{AsSb}$  monolayer material has intrinsic half-metallicity and excellent magnetic properties, which demonstrates its promising application prospect in the next generation spintronic devices.



**Keywords:** two-dimensional (2D) ferromagnet materials, first principles, intrinsic half-metallicity, magnetic property

DOI: 10.7498/aps.75.20251622

CSTR: 32037.14.aps.75.20251622

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12474273, 62374097) and the K. C. Wang Magna Fund in Ningbo University, China.

† Corresponding author. E-mail: [xuwenwu@nbu.edu.cn](mailto:xuwenwu@nbu.edu.cn)

‡ Corresponding author. E-mail: [zhoujun@nbu.edu.cn](mailto:zhoujun@nbu.edu.cn)

二维铁磁材料 $Mn_2AsSb$ 的本征半金属性及磁学性质

袁军 汪帆帆 张珠峰 许文武 顾辰杰 周骏

**Intrinsic half-metallicity and magnetic properties of two-dimensional ferromagnetic material  $Mn_2AsSb$**

YUAN Jun WANG Fanfan ZHANG Zhufeng XU Wenwu GU Chenjie ZHOU Jun

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 080712 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251622

CSTR: 32037.14.aps.75.20251622

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251622>

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

基于钙钛矿的二维铁磁体 $Sr_2RuO_4$ 单层

Perovskite-based two-dimensional ferromagnet  $Sr_2RuO_4$  monolayer

物理学报. 2024, 73(22): 226101 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20241042>

$CrO_2$ 单层: 一种兼具高居里温度和半金属特性的二维铁磁体

$CrO_2$  monolayer: a two-dimensional ferromagnet with high Curie temperature and half-metallicity

物理学报. 2024, 73(10): 106102 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240246>

过渡金属原子 $X$  ( $X = Mn, Tc, Re$ ) 掺杂二维 $WS_2$ 第一性原理研究

First-principles study of transition metal atoms  $X$  ( $X = Mn, Tc, Re$ ) doped two-dimensional  $WS_2$  materials

物理学报. 2022, 71(12): 127301 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212439>

应变对(Ga, Mo)Sb磁学和光学性质影响的理论研究

First-principles study of strain effect on magnetic and optical properties in (Ga, Mo)Sb

物理学报. 2022, 71(9): 096103 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212316>

二维 $SiP_2$ 同素异构体结构预测及其电子性质的第一性原理研究

First-principles study of structure prediction and electronic properties of two-dimensional  $SiP_2$  allotropes

物理学报. 2022, 71(23): 236101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220853>

二维kagome晶格过渡金属酞菁基异质结的电子性质

Electronic properties of two-dimensional kagome lattice based on transition metal phthalocyanine heterojunctions

物理学报. 2023, 72(24): 247502 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230921>