

Fe₃GeTe₂纳米带的结构稳定性、磁电子性质及调控效应

韩佳凝 范志强 张振华

Structure stability, magneto–electronic properties, and modulation effects of Fe₃GeTe₂ nanoribbons

Han Jia-Ning Fan Zhi-Qiang Zhang Zhen-Hua

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 68, 208502 (2019) DOI: 10.7498/aps.68.20191103

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191103>

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

过渡金属掺杂的扶手椅型氮化硼纳米带的磁电子学特性及力–磁耦合效应

Magneto–electronic properties and mechano–magnetic coupling effects in transition metal–doped armchair boron nitride nanoribbons
物理学报. 2017, 66(23): 238501 <https://doi.org/10.7498/aps.66.238501>

掺杂三角形硼氮片的锯齿型石墨烯纳米带的磁电子学性质

Magneto–electronic properties of zigzag graphene nanoribbons doped with triangular boron nitride segment
物理学报. 2017, 66(24): 246101 <https://doi.org/10.7498/aps.66.246101>

三角形石墨烯量子点阵列的磁电子学特性和磁输运性质

Magneto–electronic and magnetic transport properties of triangular graphene quantum–dot arrays
物理学报. 2017, 66(13): 138501 <https://doi.org/10.7498/aps.66.138501>

钙钛矿 APbI₃ 结构稳定性及光电性质的理论研究

Theoretical study on the stability and photoelectric properties of APbI₃ perovskite
物理学报. 2017, 66(5): 057103 <https://doi.org/10.7498/aps.66.057103>

单层 GaSe 表面 Fe 原子吸附体系电子自旋性质调控

Modification of spin electronic properties of Fe/GaSe monolayer adsorption system
物理学报. 2017, 66(16): 166301 <https://doi.org/10.7498/aps.66.166301>

氮化硼纳米带功能化碳纳米管的热自旋输运性质

Thermal spin transport properties in a hybrid structure of single–walled carbon nanotubes and zigzag–edge boron nitride nanoribbons
物理学报. 2019, 68(5): 057301 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181968>

Fe₃GeTe₂ 纳米带的结构稳定性、磁电子性质及调控效应*

韩佳凝 范志强 张振华†

(长沙理工大学, 柔性电子材料基因工程湖南省重点实验室, 长沙 410114)

(2019年7月18日收到; 2019年8月10日收到修改稿)

Fe₃GeTe₂是目前发现的少数几种二维铁磁材料之一. 基于密度泛函理论的第一性原理方法, 我们对二维 Fe₃GeTe₂ 剪裁而成的纳米带 NR(*n*) 的结构稳定性和磁电子学特性进行了详细研究. 计算的结合能及分子动力学模拟表明纳米带的结构是非常稳定的. 纳米带呈现较大的磁矩及磁化能, 这说明它们具有较高的磁稳定性. 特别是在费米能级上, 纳米带具有较高的自旋极化率 (SP_F), 如 NR(5) 的 SP_F 可达 100%. 同时发现 SP_F 随纳米带宽度变化有明显的奇偶振荡效应, 且纳米带的 SP_F 比 2 维单层的情况有明显优势. 此外, 拉伸效应的计算结果表明, 应变可以灵活地调节纳米带的 SP_F 使其在接近零值和 85.6% 之间变化, 这意味着可设计一个机械开关来控制低偏压下的自旋输运, 使其可逆地工作在高自旋极化与无自旋极化之间.

关键词: Fe₃GeTe₂ 纳米带, 磁电子学特性, 自旋极化, 拉伸效应

PACS: 85.75.-d, 71.15.-m, 72.25.-b, 73.63.-b

DOI: 10.7498/aps.68.20191103

1 引言

自单层石墨烯被成功制备以来, 其以优异的机械、电子和输运特性引起了研究人员的广泛关注^[1,2]. 目前已有大量的类石墨烯二维 (2D) 纳米材料被发现和制备, 它们具有各种奇特的物理性质^[3-5], 例如, 准金属材料硅烯^[6]和锡烯^[7]等; 半导体材料 MX₂ (*M* = Mo, W; *X* = S, Se)^[8]、过渡金属硫化物 (TMDs)^[9]、磷烯^[10]、BN 单层^[11]、砷烯和锑烯^[12,13]等; 2D 超导体材料 NbSe₂^[14,15]和 FeSe^[16-18]等. 它们在复合材料、能量存储、传感、电子器件等领域有较大的应用潜力. 然而, 它们都不具有本征磁性. 研究表明, 2D 铁磁材料 (2D FM) 在自旋电子器件方面有重要的应用, 少层或单层 2D 铁磁材料具有存储稳定、响应快和低功耗的特点. 目前, 实验发

现的铁磁性 2D 材料只有几种, 如 Fe₃GeTe₂ (FGT)^[19,20], CrXTe₃ (*X* = Si, Sn, Ge)^[21,22], CrI₃^[23]等, 因此, 2D 磁性材料的研究引起了越来越多研究人员的关注.

2006 年, Deiseroth 等^[24]首次合成了块体 FGT 化合物. 以此为基础, 2016 年, Zhuang 等^[25]基于密度泛函理论计算 FGT 的声子散射, 证明其 2D 单层表现出稳定的磁性. 因此, 如何制备 2D FGT 单层成为研究人员最为关心的问题. 2017 年, Liu 等^[20]利用分子束外延法, 实现了 2D FGT 铁磁薄膜的晶圆级生长, 并且通过原位反射高能电子衍射振荡实现了 2D FGT 逐层生长, 沿 {002} 表面生长时产生 0.82 nm 的层间距离. 2018 年, Deng 等^[26]利用氧化铝和 FGT 之间的强黏附性和较大的接触面积, 首次成功地从层状 FGT 中分离出了其单层薄膜. 研究发现, FGT 的铁磁性持续到了单

* 国家自然科学基金 (批准号: 61771076, 11674039) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zhzhang@csust.edu.cn

层, 在居里温度为 230 K 时为铁磁体, 且具有面外磁晶各向异性, 这表明 FGT 在研发栅压可调、超高密度且室温可用的磁电子学器件等方面有巨大的应用潜力. 此外, 理论预估 0 K 时 FGT 中 Fe 原子的自旋极化磁矩可以达到 $1.6\mu_B$ [24,27]. Fei 等 [28] 证明了 FGT 在单层时表现出强的 2D 铁磁性和垂直各向异性, 并且这种性质对 FGT 的层数和温度具有敏感性. 除此之外, 异常霍尔效应 [20,29] 和 Kondo 效应 [30] 测量结果表明 FGT 与铁磁超薄膜具有相似的性质, 这使其有望成为应用在自旋电子器件上的候选材料.

由于 2D 材料应用的局限性, 实施功能化常常是必要的, 研究表明进一步引入量子限域效应是调节 2D 材料的重要方法. 例如: 将 2D 石墨烯单层剪裁为 1D 扶手椅型石墨烯纳米带能成功打开其带隙, 且通过改变纳米带的宽度可以实现对其带隙的调节 [31]. 而剪裁成的锯齿型石墨烯纳米带具有磁性 [32], 且与纳米带的宽度无关 [33]. 此外, 利用应变效应调控纳米材料的电子特性使其功能化也是常见的物理方法. 例如: 施加轴向应变可以显著调节 H 饱和磷烯纳米带的带隙 [34] 和载流子迁移率 [35]. 在应变 $\varepsilon \leq 10\%$ 的范围内, 锯齿形磷烯纳米带 (z-PNR) 的带隙随应变的增加由 1.30 eV 逐渐减小至 0.28 eV, 而扶手椅型磷烯纳米带 (a-PNR) 在 $0\% < \varepsilon \leq 8\%$ 的范围内, 其带隙由 1.04 eV 增加到 1.22 eV, 继续增加应变至 10% 的过程中, 带隙减小至 1.18 eV [34]. 在 $\varepsilon \leq 3\%$ 和 $\varepsilon \leq 8\%$ 应变下, z-PNR 的空穴迁移率和 a-PNR 的电子的迁移率均增大了数量级, 对角磷烯纳米带 (d-PNR) 在压缩 7% 或拉伸 5% 时实现了直接-间接带隙的转变, 并且其中产生了简并的能量谷 [35], 这在谷电子学和光催化方面有潜在的应用.

在本文中, 我们考虑将二维 FGT 材料剪裁成纳米带 NR(n), 深入研究了其结构稳定性和磁电子学性质, 并讨论其尺度效应. 计算表明, 剪裁后的纳米带是非常稳定的, 且纳米带宽度显著影响了其磁电子学特性. 特别是, 我们发现在费米能级上, 纳米带具有较高的自旋极化率, 且随宽度变化有明显的奇偶振荡效应. 同时, 我们也研究磁电子学特性的拉伸效应. 发现拉伸应变可以灵活地调节纳米带的自旋极化率, 使其在接近零值和 85.6% 之间变化.

2 计算方法

模型的几何优化、结构稳定性的评估和电子特性的计算采用基于密度泛函理论 (DFT) 的第一性原理方法. 所有这些计算都是在 Atomistix ToolKit (ATK) 软件包中实现 [36], 该软件已被广泛应用于纳米结构的研究 [37–40]. 为了求解 Kohn-Sham 方程, 交换关联势采用广义梯度近似 (GGA) 中的 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 近似, 赝势采用 Troullier-Martin 守恒赝势, 基函数组选用 DZP (double ζ +polarized). 能量截取半径 (meshcut-off) 采用 150 Ry. 在简约布里渊区的 k 点抽样采用 $1 \times 1 \times 100$, 其中 Z 轴设为 1D 纳米带的周期延伸方向, 采用周期性边界条件, 而在 X 和 Y 方向, 采用非周期性边界条件, 其单胞的真空层厚度值设置为大于 15 Å, 以消除模型与其“像”之间的相互作用. 所有的计算都在几何结构优化之后进行, 结构优化收敛的标准是作用在每个原子上的力小于 0.01 eV/Å. 为了简单起见, 系统的费米能级设置为零.

3 结果与讨论

3.1 模型结构及其稳定性

FGT 单层是一种具有五个原子层的 2D 纳米材料, 即共价连接的 Fe_3Ge 夹在两层 Te 之间, 其厚度 d_s 为 5.22 Å, 如图 1(a) 所示. FGT 纳米带可以通过剪裁二维 (2D) FGT 单层得到, 沿不同方向剪裁, 可得到不同边型的纳米带. 在本研究中, 我们仅考虑沿水平方向剪裁 FGT 单层, 如图 1(a) 中阴影所示. 纳米带记为 NR(n), 其中 n 为纳米带的宽度, 定义为 Fe, Ge 和 Te 三种原子共同组成的水平直线原子链的数目. 以 NR(9) 为例, 如图 1(b) 所示. 我们发现对纳米带进行优化之后, FGT 纳米带的厚度 d_{NR} 为 5.14 Å, 略小于 FGT 单层的厚度. 同时, 纳米带的边缘出现了轻微的形变. 黑色虚线框代表纳米带的一个单胞.

为了评估纳米带的能量稳定性, 我们计算了不同纳米带的结合能, 其定义为: $E_b = (E_{\text{Fe}_3\text{GeTe}_2} - n_{\text{Fe}}E_{\text{Fe}} - n_{\text{Ge}}E_{\text{Ge}} - n_{\text{Te}}E_{\text{Te}}) / (n_{\text{Fe}} + n_{\text{Ge}} + n_{\text{Te}})$, 其中, $E_{\text{Fe}_3\text{GeTe}_2}$ 为纳米带的总能量, E_{Fe} , E_{Ge} 和 E_{Te} 分别为孤立 Fe, Ge 和 Te 原子的能量. n_{Fe} , n_{Ge} 和 n_{Te}

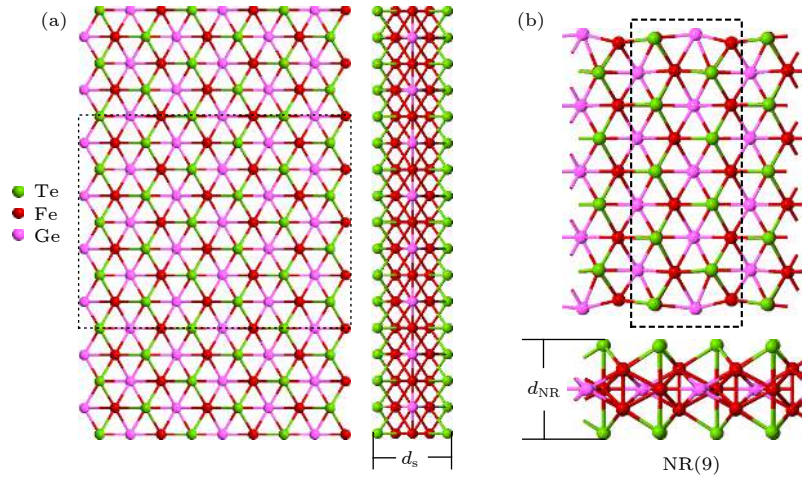


图 1 (a) 2D FGT 单层原子结构的顶视图和边视图, 阴影部分表示所剪裁的纳米带 $NR(n)$; (b) 宽度 $n = 9$ 时的 FGT 纳米带, 黑色虚线框代表纳米带的一个单胞

Fig. 1. (a) Top and side view of atomic structure for 2D FGT monolayer, the shaded region indicates the cutting nanoribbon $NR(n)$; (b) the FGT nanoribbon with width $n = 9$, and the black dashed-line box represents the unit cell of $NR(9)$.

表 1 FGT 纳米带的结合 E_b (单位: eV/atom), 磁化能 E_M (单位: meV/atom) 和费米能级上的自旋极化率 SP_F (%), MM 和 HM 分别表示磁金属和半金属

Table 1. The binding energy E_b (in eV/atom), magnetic energy E_M (in meV /atom), and spin polarized efficiency SP_F (%) for FGT nanoribbons, MM and HM represent the magnetic metal and half-metal, respectively.

Structure	NR(4)	NR(5)	NR(6)	NR(8)	NR(9)
E_b	-4.472	-4.545	-4.590	-4.648	-4.665
E_M	132.958	135.814	186.930	130.815	129.212
SP_F	29.570	100	55.918	11.573	66.823
Magnetic phase	MM	HM	MM	MM	MM

分别为纳米带中 Fe, Ge 和 Te 的原子数目, 单位为 eV/atom. 根据结合能的定义, 负的结合能意味着更稳定的结构. 我们计算了 NR(4)—NR(17) 纳米带的结合能, 发现其值落在从 -4.737 — -4.472 eV/atom 的范围内, 其中, NR(4), NR(5), NR(6), NR(8) 和 NR(9) 的形成能列于表 1 中, 分别为 -4.472, -4.545, -4.590, -4.648 和 -4.665 eV/atom. 所以, FGT 纳米带具有较好的能量稳定性, 且随着宽度 n 的增加而稳定性增加. 这是可以理解的, 随着宽度增加纳米带趋于 2D 结构, 其能量稳定性相对纳米带而言是最高的.

为了检验纳米带的热稳定性, 我们对几何优化后的纳米带进行了 Forcite 退火分子动力学模拟. 使用 4 个退火循环过程, 每个退火循环初始温度和最高温度分别设置为 300 K 和 500 K, 温度间隔取 10 K, 总时间为 8 ps, 升温到 500 K 后再退火到室温, 模拟结果如图 2(a)—(e) 所示. 与退火前的纳米带相比, 带边缘原子产生了一个很小的位

移, 但没有产生局部重建. 这表明我们所研究的模型的热稳定性是较高的.

3.2 磁电子学性质

基于密度泛函理论的研究预测 2D FGT 单层是一种磁金属, 其费米能级附近的能带结构主要由 Fe 的 3d 轨道贡献, Ge 和 Te 的 p 轨道影响很小. 除此之外, FGT 单层表现出显著的磁晶各向异性, 各向异性能达 $920 \mu\text{eV}/\text{atom}$ ^[25]. 这里, 我们关注的是当 2D FGT 单层剪裁成纳米带后的磁特性. 为了探索其磁性, 进行了自旋极化计算, 分别考虑铁磁态 (FM) 和反铁磁态 (AFM) 设置以寻找最可能的磁耦合态. 初始的 FM 态被设置为所有原子的自旋指向相同的方向, 而初始 AFM 态则被设置各种磁构型, 即 AFM-条序 (AFM1), AFM-锯齿序 (AFM2), 及 AFM-Néel 序 (AFM3)^[41]. 然而, 各种初始自旋设置的最终磁序总是收敛到 FM 态, 这表明纳米带只有 FM 态, 与 2D FGT 单层相同. 为了

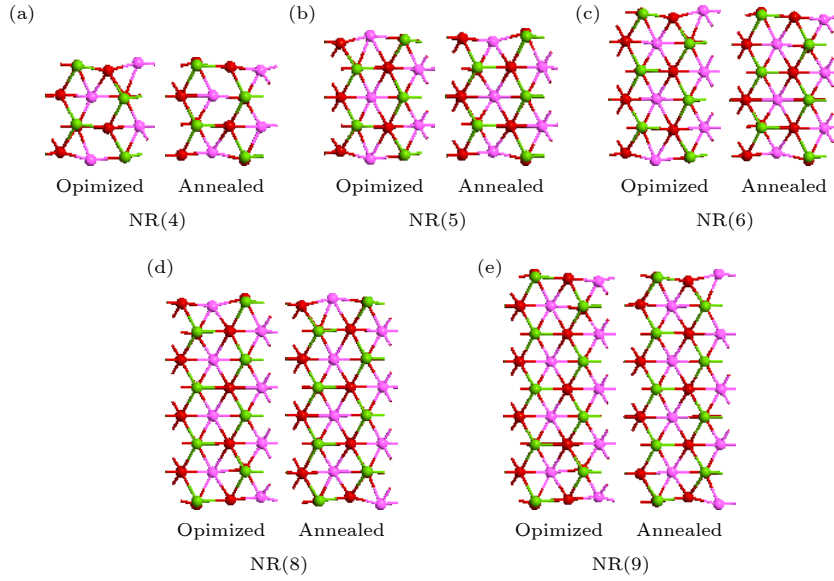


图 2 退火模拟前后的 FGT 纳米带的结构图 (a) NR(4); (b) NR(5); (c) NR(6); (d) NR(8); (e) NR(9)

Fig. 2. The ribbon structures before and after annealing simulation: (a) NR(4); (b) NR(5); (c) NR(7); (d) NR(8); (e) NR(9).

解纳米带的磁分布, 计算了上述五种宽度纳米带的自旋极化电荷密度, 如图 3(a)—(e) 所示. 从图中可以看出, 纳米带的磁性绝大部分都分布在过渡金属 Fe 原子上. 同时我们发现处在纳米带外层原子处 Fe 原子的磁性要高于处在中间原子层的 Fe 原子, 而纳米带边缘 Fe 原子的磁性低于外层 Fe 原子, 这也许是因为在几何优化后, 边缘发生形变减弱了边缘 Fe 原子的磁性. 除此之外, 有极少量的磁矩分布在 Te 原子上, 但是只分布在内部 Te 原子上, 带边缘的 Te 原子几乎没有磁性. 所有的 Ge 原子上也几乎没有磁性, 纳米带中磁性的分布与纳米带的几何结构是否是关于轴线对称关系不大.

为了发现系统的基态, 我们计算了这五种 FGT 纳米带的磁化能, 定义为^[42]: $E_M = (E_{NM} -$

$E_{FM})/N$. 这里 E_{NM} 及 E_{FM} 分别为非磁态和 FM 态时一个单胞的能量, 而 N 为一个单胞的原子总数. 根据磁化能的定义, 更高的正磁化能意味着更稳定的磁性结构. NR(4)—NR(17) 的磁化能在 125.2—186.9 meV/原子的范围内, NR(4), NR(5), NR(6), NR(8) 和 NR(9) 的磁化能列于表 1 中, 分别为 132.9, 135.8, 186.9, 130.8 和 129.2 meV/atom, 很明显纳米带的基态是铁磁态.

为了更深入地了解 Fe, Ge, Te 对整个纳米带的能带结构做出的贡献, 我们计算了 FGT 纳米带的投影能带, 分别如图 4(a)—(e) 所示, 显然, 纳米带能带结构是高度自旋极化的, 其中 NR(4), NR(6), NR(8) 和 NR(9) 均为磁金属, 但 NR(5) 为半金属. 特别是从图 4(a)—(e) 能清楚地看出: 在费米能级附近, 不同原子对能带的贡献比重不同, 且相同原

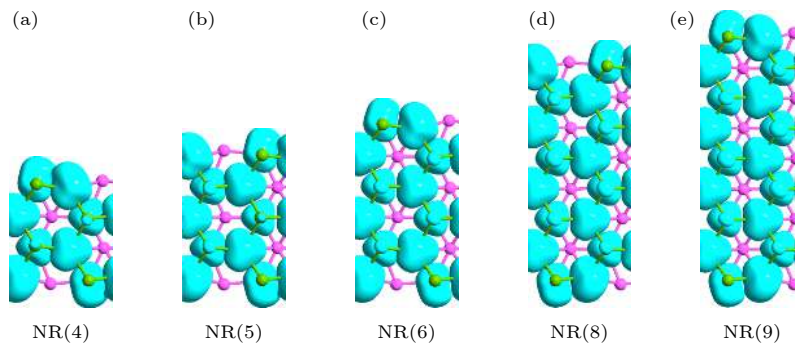


图 3 自旋极化电荷密度 (a) NR(4), (b) NR(5), (c) NR(6), (d) NR(8) 和 (e) NR(9), 等值面值取为 $0.01|e|\text{Å}^{-3}$

Fig. 3. The spin-polarized charge density: (a) NR(4), (b) NR(5), (c) NR(6), (d) NR(8), and (e) NR(9), the isosurface value is set as $0.01|e|\text{Å}^{-3}$.

子对不同自旋的贡献也存在一定的差异. 例如, Fe 原子对能带的贡献比重最大, Ge 原子几乎为零, 且几乎与纳米带宽度无关. Fe 原子对 α -自旋的贡献比例明显小于 β -自旋, β -自旋在费米能级附近的能带几乎全部由 Fe 原子贡献, 且与纳米带是否关于轴线对称无关. 而 α -自旋在费米能级附近的带结构主要由 Fe 和 Te 原子贡献. 总之, Fe 原子的重要作用覆盖在整个纳米带的能带结构中, 与之相反, Ge 原子在整个能带结构中产生的影响很小, 而 Te 原子只对 α -自旋的能带贡献比较大.

我们还计算了 NR(n) 的磁矩随纳米带宽度的变化, 如图 4(f) 所示. 磁矩的单位为 μ_B /磁性原子. 由于纳米带的磁性绝大部分都分布在 Fe 原子上, 因此, 磁性原子的数目为纳米带中 Fe 原子的个数. 从图 4(f) 可见, 磁矩值落在 $1.885\text{--}2.004 \mu_B$ /磁性原子的范围内, 显然, FGT 纳米带的磁矩比较高. 一般说来, 高的磁矩对应高的磁稳定性. 所以, FGT 纳米带的磁稳定性是非常高的. 特别是随着纳米带宽度的增加磁矩也增加, 且稳定在 $2.004 \mu_B$ /磁性原子附近, 趋于 2D FGT 单层的磁矩 $2.084 \mu_B$ /磁性原子^[25]. 这是容易理解的. 如前述, 带内 Fe 原子磁性较强, 而在边缘 Fe 原子上的磁分布较少. 因此, 随着纳米带宽度的增加, 纳米带 Fe 原子相

应增加, 导致带边缘 Fe 原子对平均磁矩影响的相对比重越来越弱, 从而纳米带的磁矩随着宽度的增加整体上呈增大的趋势, 并逐渐趋于一个稳定值.

为了进一步了解纳米带磁性来源, 计算了总态密度 (DOS) 和投影态密度 (PDOS), PDOS 为分别投影在 Fe, Ge 和 Te 三种原子上的态密度, 可以清楚地看出它们各自对总的态密度的贡献, 如图 5(a)—(e) 所示. 显然, 对于各纳米带, α -自旋和 β -自旋的 DOS 是高度非对称的, 表明显著的自旋极化, 并且它们的 DOS 压倒性地来源于 Fe 原子的贡献, 其次来源于 Te 原子的少量贡献. 为了对 FGT 纳米带的输运性质进行表征, 常常计算费米能级上的自旋极化率^[41], 定义为: $SP_F = (D_\alpha - D_\beta) / (D_\alpha + D_\beta) \times 100\%$, 其中 D_α 和 D_β 分别为 α -自旋和 β -自旋在费米能级上的态密度值, 若 $SP_F = 0$ 意味着无自旋极化发生, 负值代表另一个方向上自旋极化较强. 因 NR(5) 为半金属材料, 计算结果表明它在费米能级上是完全极化的 ($SP_F = 100\%$), 而 NR(4), NR(6), NR(8) 和 NR(9) 的自旋极化率分别为 29.57%, 55.92%, 11.57% 和 66.82%, 如表 1 所列. 此外, 我们计算了其他宽度纳米带的自旋极化率. 所有 NR(4)—NR(17) 的自旋极化率如图 5(f) 所示. 显然, 我们能得出 2 个重要的结论:

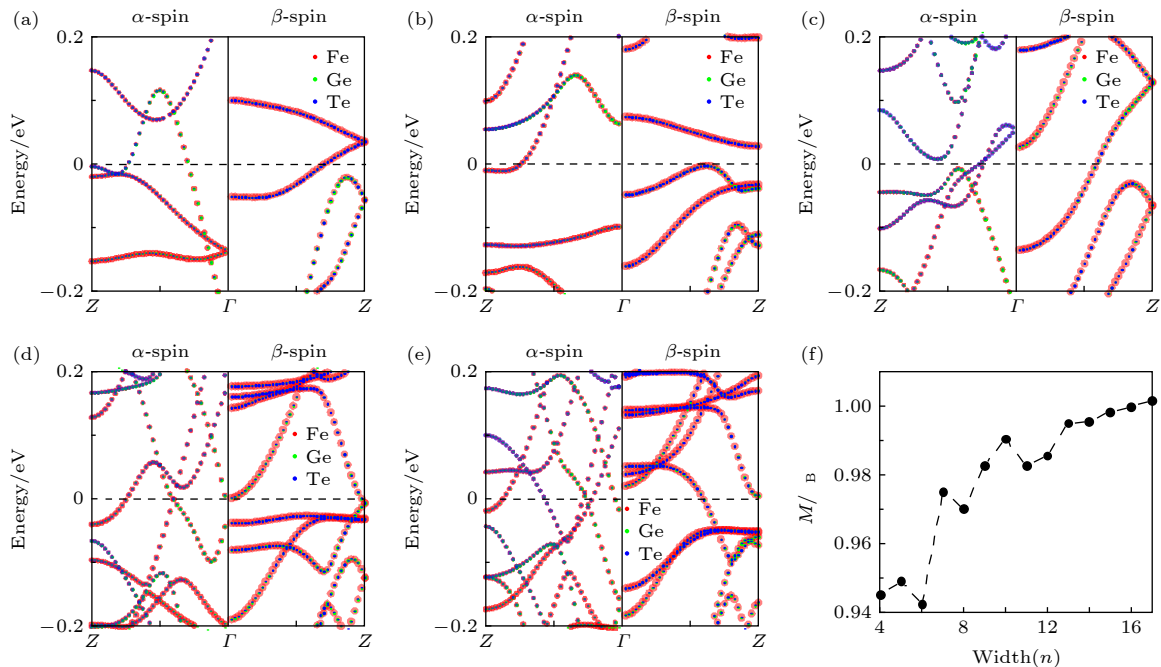


图 4 投影能带结构 (a) NR(4), (b) NR(5), (c) NR(6), (d) NR(8) 和 (e) NR(9); (f) 不同宽度 NR(n) 的磁性原子的平均磁矩, 其中 n 为 FGT 纳米带的宽度

Fig. 4. The projected band structure for (a) NR(4), (b) NR(5), (c) NR(6), (d) NR(8), and (e) NR(9), respectively; (f) magnetic moment per magnetic atom for NR(n) versus ribbon widths, where n represents the width of the FGT nanoribbons.

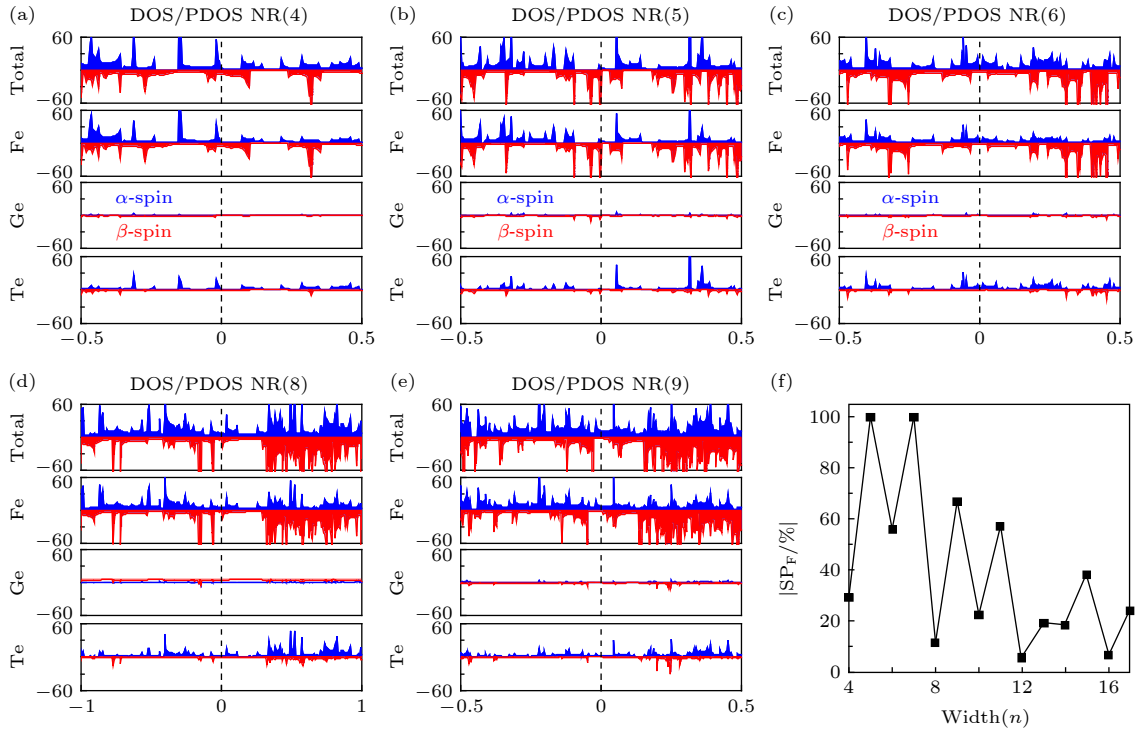


图 5 不同 FGT 纳米带的总态密度 (DOS)、投影态密度 (PDOS) 以及费米能级上的自旋极化率 (a) NR(4), (b) NR(5), (c) NR(6), (d) NR(8) 和 (e) NR(9); (f) 不同宽度纳米带 NR(n) 的在费米能级上自旋极化率 SP_F , 其中 n 为 FGT 纳米带的宽度
Fig. 5. The DOS and PDOS for (a) NR(4), (b) NR(5), (c) NR(6), (d) NR(8), and (e) NR(9); (f) the spin polarity efficiency at the Fermi level (SP_F) for ribbons with various different widths NR(n), where n represents the width of the FGT nanoribbons.

1) 自旋极化率随宽度变化有明显的奇偶振荡效应, 即奇数宽度的纳米带的自旋极化率高于附近偶数宽度的纳米带, 当 $n \leq 12$ 时, 表现得尤为明显, 这意味着宽度为奇或偶时, α -自旋和 β -自旋在费米能级上的态密度有较大的差别, 这也许是由纳米带宽度 n 分别为奇数或偶数时, 量子限域效应有所不同导致的, 充分反映了“结构-性能”的关系; 2) 纳米带的宽度较宽时, 自旋极化率的奇偶振荡效应稳定在一个比较小的范围内, 且为较小的值, 最后趋于 2D 的情况, 这意味着, 纳米带的自旋极化率比 2D 单层的情况有一定优势, 且纳米带越窄, 优势越明显.

3.3 拉伸效应

下面简单地检验 FGT 纳米带的应变效应. 众所周知, 施加应变是通常采用的调控纳米材料电子及磁学性质的重要方法之一, 应变效应的机制是它可以改变原子构型、键长和键角, 进而改变其轨道重叠、电荷分布和键合强度, 从而调控纳米材料的性能. 它为设计和优化功能器件提供了较大的灵活性^[42]. 应变定义为 $\varepsilon = (L - L_0) / L_0 \times 100\%$, 其中

L_0 和 L 分别是应变前和应变后单胞的晶格常数. 这里, 我们以 NR(9) 为例来研究应变对其磁电子特性的调控作用. 在实验上, 拉伸应变比压缩应变容易实现, 所以我们只考虑轴向拉伸应变, 如图 6(a) 所示, 且应变范围限制在 0—10% 之内. 计算表明: 在不同应变下, NR(9) 始终保持 FM 基态, 其态密度如图 6(b) 所示, 可以看出, 在拉伸过程中, NR(9) 保持磁金属性不变. 然而, α -自旋和 β -自旋在费米能级上的态密度是应变依赖性的. 为了描述这一性质, 我们仍计算费米能级上的自旋极化率 SP_F , 如图 6(c) 所示. 显然, SP_F 具有应变的灵活可调性, SP_F 随应变先减后增再减, 在 $\varepsilon \geq 6\%$ 时, 自旋极化率稳定在一个较小的变化范围内. SP_F 在拉伸为 4% 时达到最大值 85.6%, 这是一个相当高的值; 而在拉伸为 8% 时达到最小值, 几乎为零. 这意味着可设计一个机械开关来控制低偏压下的自旋运输, 使它可逆地工作在高自旋极化 (拉伸为 4% 时) 与几乎无自旋极化 (拉伸为 8% 时) 之间.

最后, 我们计算了 NR(9) 的磁矩和磁化能随拉伸应变的变化情况, 如图 6(d) 所示. 可以看出, 在较低的应变下, 即在 $\varepsilon \leq 6\%$ 的范围内, 纳米带的

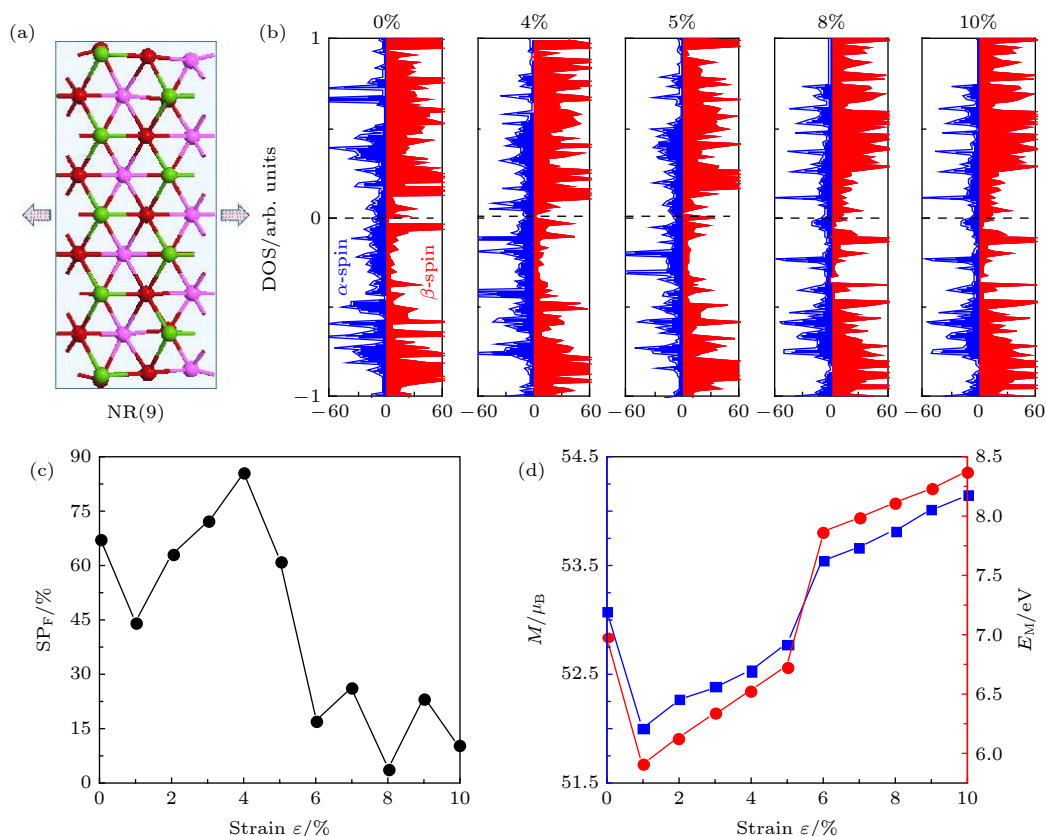


图6 应变效应 (a) 对 NR(9) 施加拉伸应力的模型图, 仅铁磁基态下被考虑; (b) 施加不同应变时的态密度 (DOS) 变化情况; (c) 费米能级上的自旋极化率 SP_F 随应变的变化; (d) 磁矩 (M) 和磁化能 (E_M) 随应变的变化

Fig. 6. Strain effects: (a) The schematic for NR(9) applied by stretching strain, only the FM ground state is taken into account; (b) the DOS versus strains; (c) the spin polarity efficiency at the Fermi level SP_F versus strains; (d) the magnetic moment (M) and magnetize energy (E_M) versus strains.

磁矩和磁化能均低于未施加应力时的情况. 但进一步拉伸纳米带, 它的磁矩和磁化能单调增加. 这也许是因为拉伸应变增大键长, 从而减少 (增加) 共价键 (离子键) 成分, 使未配对电子增加而提高磁性 (磁矩变大). 一般而言, 磁矩增大, 磁稳定性相应提高, 即磁化能随之增加.

4 总结

对二维 FGT 材料进行剪裁得到 FGT 纳米带, 并对其结构稳定性和磁电子学特性进行了详细的研究. 计算的结合能及分子动力学模拟表明纳米带的几何结构是非常稳定的. 较大的磁矩及磁化能表明纳米带的磁性非常稳定. 特别是在费米能级上, 纳米带具有较高的 SP_F , 如 NR(5) 的 SP_F 可达 100%. 同时发现 SP_F 随纳米带宽度变化有明显的奇偶振荡效应, 且纳米带的 SP_F 比二维单层的情况有明显优势. 此外, 拉伸效应的计算结果表明,

应变可以灵活地调节纳米带的 SP_F 使其在接近零值和 85.6% 之间变化, 这意味着可设计一个机械开关来控制低偏压下的自旋输运, 使其可逆地工作在高自旋极化与无自旋极化之间. 这些研究表明 FGT 纳米带对于研发灵活可调的磁器件有潜在应用.

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] Novoselov K S, Jiang D, Schedin F, Booth T J, Khotkevich V V, Morozov S V, Geim A K 2005 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **102** 10451
- [3] Zhang M, Wang X X, Cao W Q, Yuan J, Cao M S 2019 *Adv. Opt. Mater.* **7** 1900689
- [4] Zeng Y, Wu D, Cao X, Zhou W, Tang L, Chen K 2019 *Adv. Funct. Mater.* **531** 1800390
- [5] Cao M S, Wang X X, Zhang M, Shu J C, Cao W Q, Yang H J, Fang X Y, Yuan J 2019 *Adv. Funct. Mater.* **29** 1807398
- [6] Cahangirov S, Topsakal M, Aktürk E, Sahin H, Ciraci S 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 236804
- [7] Tang P, Chen P, Cao W, Huang H, Cahangirov S, Xian L, Rubio A 2014 *Phys. Rev. B* **90** 121408

- [8] Latzke D W, Zhang W, Suslu A, Chang T R, Lin H, Jeng H T, Lanzara A 2015 *Phys. Rev. B* **91** 235202
- [9] Xiao D, Liu G B, Feng W, Xu X, Yao W 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 196802
- [10] Kuang W, Hu R, Fan Z, Zhang Z 2019 *Nanotechnology* **30** 145201
- [11] Blase X, Rubio A, Louie S G, Cohen M L 1995 *Phys. Rev. B* **51** 6868
- [12] Zhang S, Yan Z, Li Y, Chen Z, Zeng H 2015 *Angew. Chem. Int. Ed.* **54** 3112
- [13] Zhang S, Xie M, Li F, Yan Z, Li Y, Kan E, Zeng H 2016 *Angew. Chem. Int. Ed.* **55** 1666
- [14] Efetov D K, Wang L, Handschin C, Efetov K B, Shuang J, Cava R, Kim P 2016 *Nature Phys.* **12** 328
- [15] Yokoya T, Kiss T, Chainani A, Shin S, Nohara M, Takagi H 2001 *Science* **294** 2518
- [16] Hsu F C, Luo J Y, Yeh K W, Chen T K, Huang T W, Wu P M, Wu M K 2008 *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **105** 14262
- [17] Peng R, Xu H C, Tan S Y, Cao H Y, Xia M, Shen X P, Xie B P 2014 *Nat. Commun.* **5** 5044
- [18] Wang Q Y, Li Z, Zhang W H, Zhang Z C, Zhang J S, Ding H, Ou Y B, Deng B, Chang K 2012 *Chin. Phys. Lett.* **29** 037402
- [19] Deiseroth H J, Aleksandrov K, Reiner C, Kienle L, Kremer R K 2006 *Eur. J. Inorg. Chem.* **2006** 1561
- [20] Liu S, Yuan X, Zou Y, Sheng Y, Huang C, Zhang E, Zou J 2017 *npj 2D Mater. Appl.* **1** 30
- [21] Zhuang H L, Xie Y, Kent P R C, Ganesh P, 2015 *Phys. Rev. B* **92** 035407
- [22] Siberchicot B, Jobic S, Carteaux V, Gressier P, Ouvrard G 1996 *J. Phys. Chem.* **100** 5863
- [23] Gong C 2017 *Nature* **546** 265
- [24] Deiseroth H J, Aleksandrov K, Reiner C, Kienle L, Kremer R K 2006 *Chem. Inform.* **37** 1561
- [25] Zhuang H L, Kent P R C, Hennig R G 2016 *Phys. Rev. B* **93** 134407
- [26] Deng Y, Yu Y, Song Y, Zhang J, Wang N Z, Sun Z, Wang J 2018 *Nature* **563** 94
- [27] Chen B, Yang J H, Wang H D, Imai M, Ohta H, Michioli C, Fang M 2013 *J. Phys. Soc. Jpn.* **82** 124711
- [28] Fei Z, Huang B, Malinowski P, Wang W, Song T, Sanchez J, Wu W 2018 *Nature Mater.* **17** 778
- [29] Wang Y, Xian C, Wang J, Liu B, Ling L, Zhang L, Xiong Y 2017 *Phys. Rev. B* **96** 134428
- [30] Zhang Y, Lu H, Zhu X, Tan S, Feng W, Liu Q, Xie D 2018 *Sci. Adv.* **4** 6791
- [31] Gan Y, Sun L, Banhart F 2008 *Small* **4** 587
- [32] Son Y W, Cohen M L, Louie S G 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 216803
- [33] Botello-Méndez A R, López-Urías F, Terrones M, Terrones H 2008 *Nano Lett.* **8** 1562
- [34] Zhang R Y, Zheng J M, Jiang Z Y 2018 *Chin. Phys. Lett.* **35** 017302
- [35] Han X, Morgan Stewart H, Shevlin S A, Catlow C R A Guo Z X 2014 *Nano Lett.* **14** 4607
- [36] Brandbyge M, Mozos J L, Ordejón P, Taylor J, Stokbro K 2002 *Phys. Rev. B* **65** 165401
- [37] Zhu Z, Zhang Z H, Wang D, Deng X Q, Fan Z Q, Tang G P 2015 *J. Mater. Chem. C* **3** 9657
- [38] Wu D, Cao X, Chen S, Tang L, Feng Y, Chen K, Zhou W 2019 *J. Mater. Chem. A* **7** 19037
- [39] Zhang H L, Sun L, Han J N 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 246101
- [40] Liu J, Hu R, Fan Z Q, Zhang Z H 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 246101 (in Chinese) [Liu J, Hu R, Fan Z Q, Zhang Z H 2017 *物理学报* **66** 246101]
- [41] Hashmi A, Hong J 2017 *J. Phys. Chem. C* **66** 238501 (in Chinese) [Hashmi A, Hong J 2017 *物理学报* **66** 238501]
- [42] Hu R, Li Y H, Zhang Z H, Fan Z Q, Sun L 2019 *J. Mater. Chem. C* **7** 7745

Structure stability, magneto-electronic properties, and modulation effects of Fe₃GeTe₂ nanoribbons*

Han Jia-Ning Fan Zhi-Qiang Zhang Zhen-Hua[†]

(Hunan Provincial Key Laboratory of Flexible Electronic Materials Genome Engineering, Changsha University of Science and Technology, Changsha 410114, China)

(Received 18 July 2019; revised manuscript received 10 August 2019)

Abstract

Fe₃GeTe₂ monolayer is one of the currently fabricated 2-dimensional (2D) ferromagnetic materials. Based on the first principle of density functional theory, we here study the structural stability and magneto-electronic properties of nanoribbons NR(*n*) obtained by cutting 2D Fe₃GeTe₂. The calculated binding energy and molecular dynamics simulation results identify that nanoribbons are rather stable. The large magnetic moment and magnetized energy prove the extremely high magnetism stability for NR(*n*). Moreover, with the increase of the width, the magnetic moment of the nanoribbons generally increases, and gradually tends to a stable value. In particular, the nanoribbons possess a high spin polarization efficiency at the Fermi level (SP_F). For example, the SP_F for NR(5) is up to 100%. With the width variation of the nanoribbons, the SP_F has a significant odd-even oscillating effect, that is, the spin-polarization of the odd nanoribbons is higher than that of the adjacent even nanoribbons, especially when the width is in the range of $n \leq 12$. This means that the α -spin and β -spin are quite different in the density of states at the Fermi level when the width is odd or even. This may be caused by the difference of the quantum confinement effect for the odd or even nanoribbons, respectively. Meanwhile, when the width of the nanoribbons is wide enough, the odd-even oscillation effect of the spin polarizability is stabilized in a relatively small range, and the nanoribbons finally tend to be 2D Fe₃GeTe₂ monolayer. The nanoribbons have an obvious advantage on SP_F over the 2D Fe₃GeTe₂ monolayer. In addition, the calculation of the strain effect demonstrates that the strain can flexibly tune the SP_F varying from approximately zero to 85.6%, and the SP_F reaches a maximum of 85.6% at a stretch of 4%, which is a fairly high value; then reaches a minimum at a stretch of 8%, almost being zero, which means that a mechanical switch can be designed to control the low-bias spin transition, allowing it work between high spin polarization and spin unpolarization.

Keywords: Fe₃GeTe₂ nanoribbon, magneto-electronic properties, spin polarization, strain effect

PACS: 85.75.-d, 71.15.-m, 72.25.-b, 73.63.-b

DOI: 10.7498/aps.68.20191103

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61771076, 11674039).

[†] Corresponding author. E-mail: zhzhang@csust.edu.cn