University of Chinese Academy of Sciences

国科物语 2025. 4. 20

# 磁性与半导体的结合：磁性半导体简介

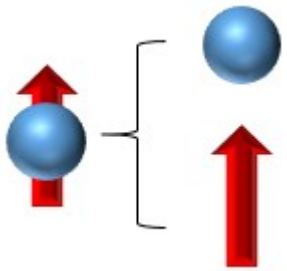

**顾波**

中国科学院大学

卡弗里理论科学研究所

# 自旋电子学（Spintronics）

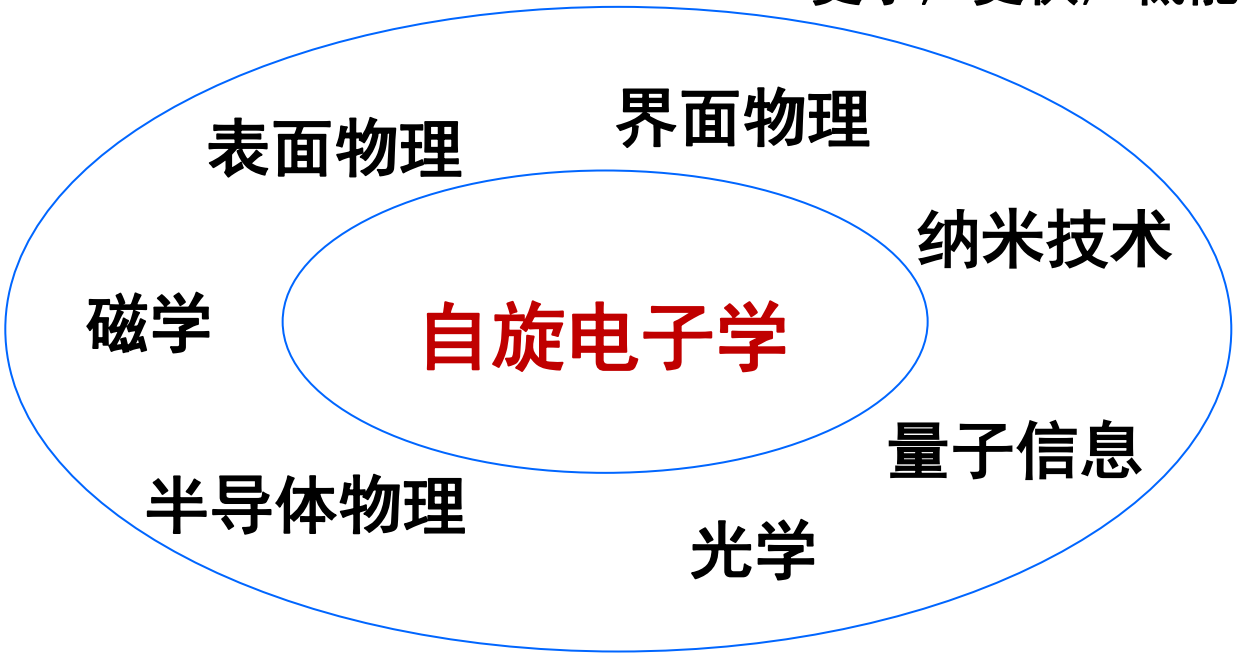
**自旋电子学：**凝聚态物理中一个快速发展的交叉学科，主要目标是研究电子自旋及自旋流的调控



电子

电荷(e) ⇨ 传统电子器件（尺寸不断缩小，接近物理极限）

自旋($\mu_B$) ⇨ 自旋电子器件(新一代电子器件：更小，更快，低能耗)




交叉学科

# 巨磁阻现象（GMR）：2007年诺贝尔物理学奖

发现了巨磁阻现象(1988)

铁磁|非磁|铁磁 多层膜

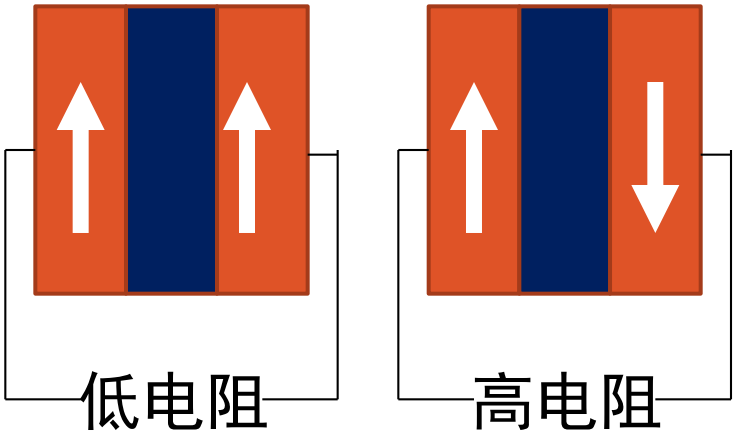


Photo: U. Montan
**Albert Fert**
Prize share: 1/2

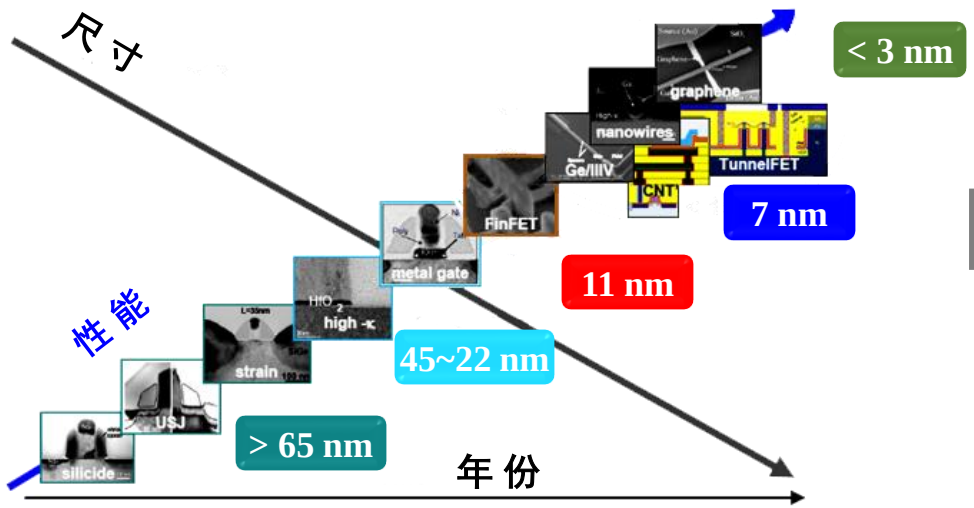
Photo: U. Montan
**Peter Grünberg**
Prize share: 1/2

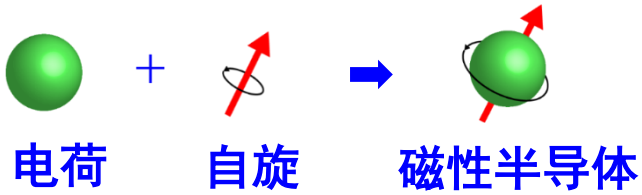
多层膜的电阻受铁磁膜自旋极化方向的调控
引发了硬盘的“大容量、小型化”革命

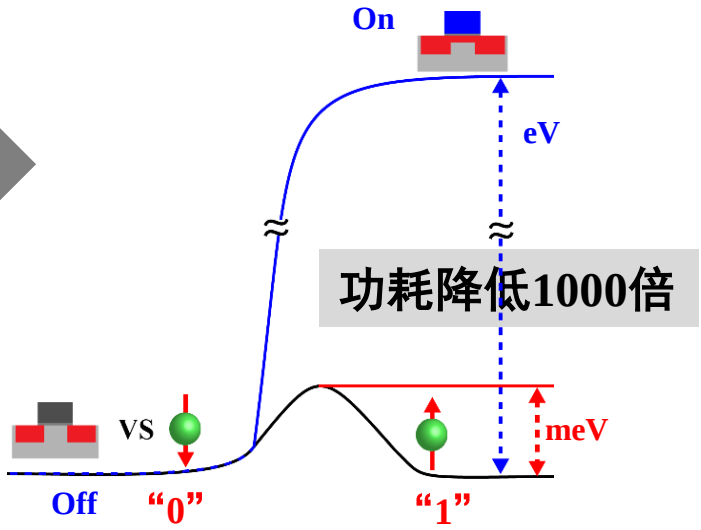
自旋电子学的兴起!

# 磁性 + 半导体：磁性半导体

**半导体集成电路瓶颈 → 量子极限**



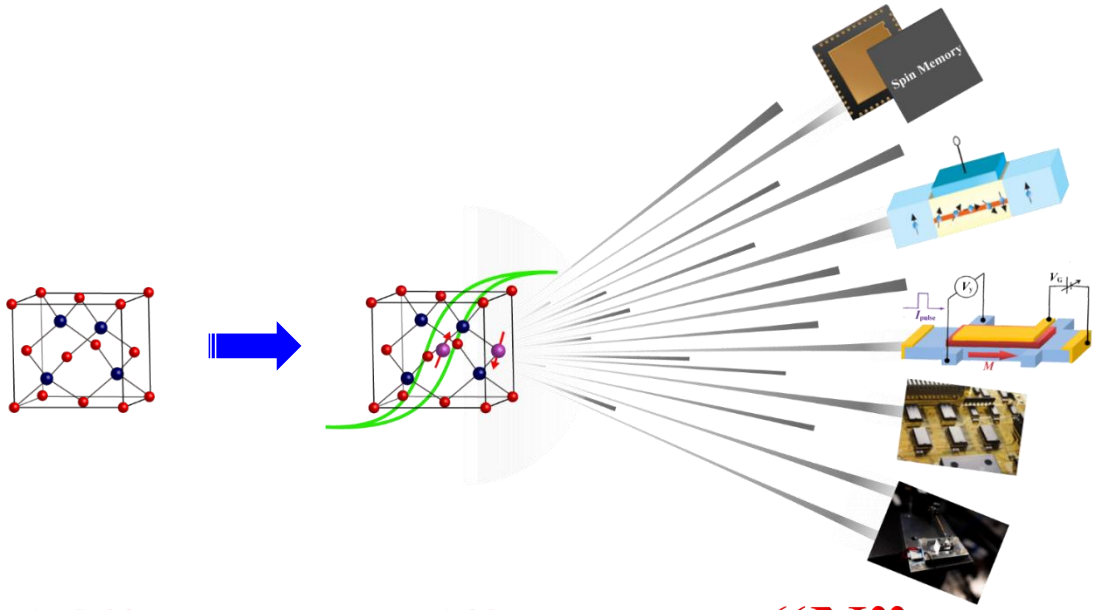

重大科学问题 **"室温磁性半导体"**

**传统半导体器件面临量子极限，发展遇到瓶颈，迫切需要发展新型电子学**

# 磁性半导体材料与器件

**从“0”到“1”的突破！**

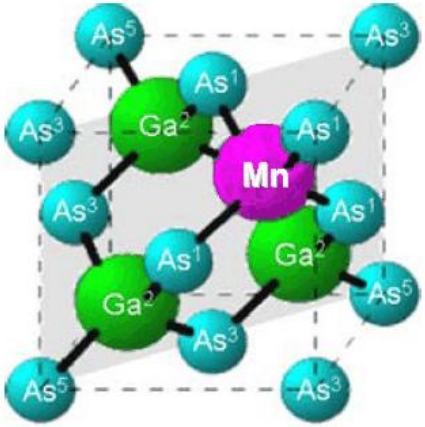
**理想室温磁性半导体材料与器件：**

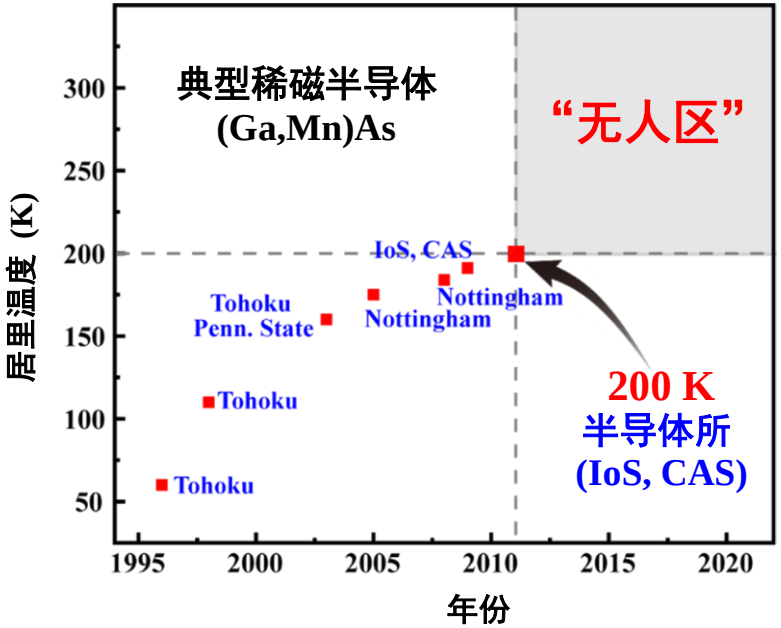



“0” → “1” → “N”

- 自旋存储
- 自旋逻辑
- 自旋光通讯
- 全电学自旋态调控器件
- 自旋场效应晶体管
- 自旋发光二极管
- ……

# 室温磁性半导体

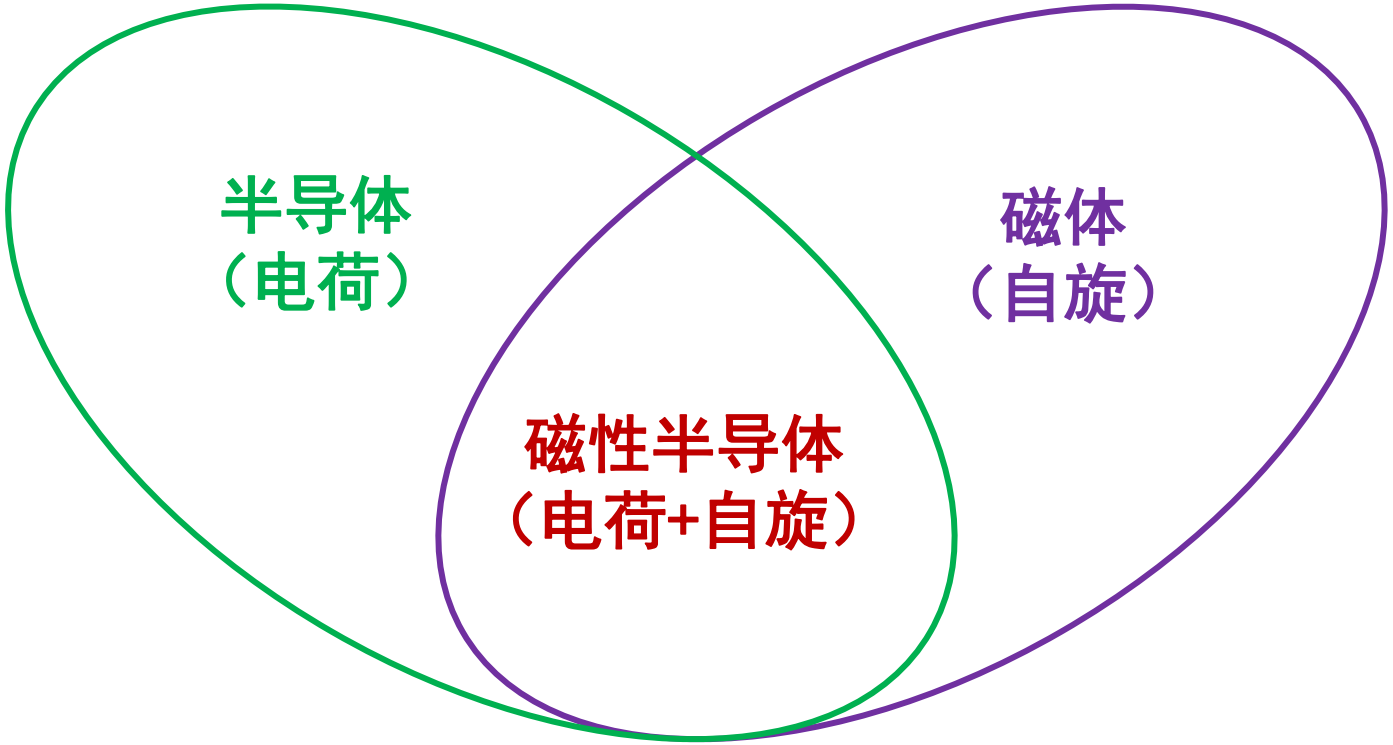



**“能否制造出室温铁磁半导体？”**

**2005年被Science杂志列入**
**125个重要未解科学问题之一！**

# 磁性半导体




自旋电子学的一种基础材料

# 本征磁性半导体

TABLE II. Magnetic and crystallographic properties of ferromagnetic spinels.

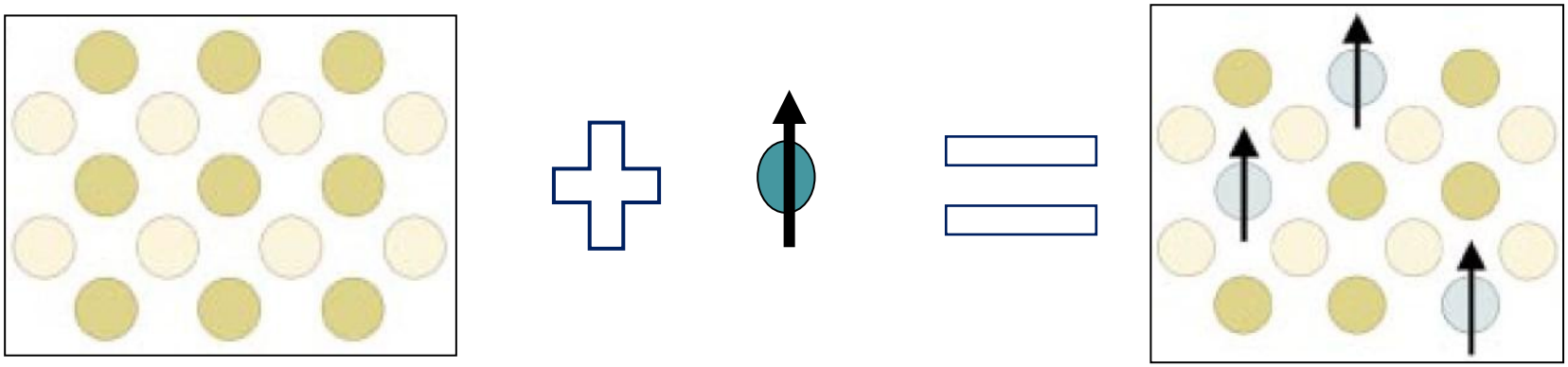
| Composition | Lattice parameter Å | $u$ parameter | Magnetic moment (4.2°K) $\mu_B$/molecule | Curie temp. $T_c$, °K | Curie-Weiss $\theta$, °K | Curie constant $C_M$ | $\frac{\theta}{T_c}$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $CdCr_2S_4$ | 10.244 | 0.390 | 5.15 | 84.5 | 152 | 3.70 | 1.80 |
| $CdCr_2Se_4$ | 10.755 | 0.390 | 5.62 | 129.5 | 204 | 3.82 | 1.57 |
| $HgCr_2S_4$ | 10.237 | 0.390 | 5.35 | 36.0 | 142 | 3.62 | 3.94 |
| $HgCr_2Se_4$ | 10.753 | 0.390 | 5.64 | 106 | 200 | 3.79 | 1.89 |

P. K. Baltzer et al. Phys Rev 151, 367 (1966)

| | | |
|---|---|---|
| **$CdCr_2Se_4$** | **Tc = 130K** | **1966** |
| EuO | Tc = 68K | 1986 |
| EuS | Tc = 16K | 1986 |

居里温度Tc远低于室温

# 稀磁半导体



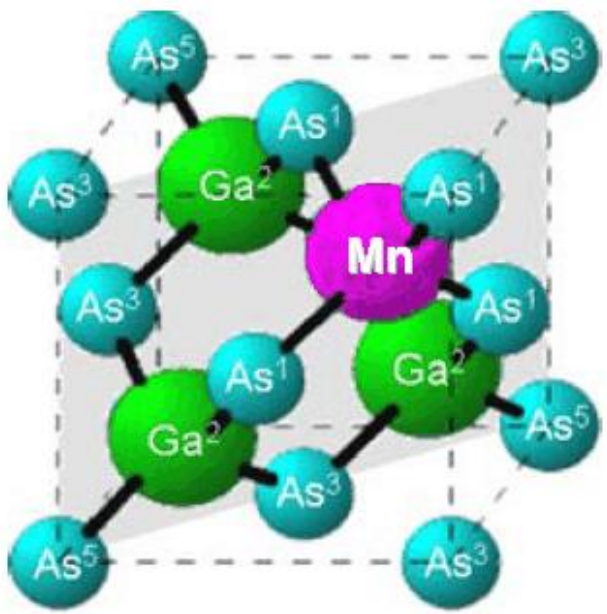
非磁性半导体
（电荷）

磁性杂质
（自旋）

稀磁半导体
（电荷+自旋）

实现磁性半导体的一种有效途径

# 经典的稀磁半导体: (Ga,Mn)As




(Ga, Mn) As : 经典的稀磁半导体

最高居里温度 Tc = 200 K

Nano Lett 11, 2584 (2011)
（半导体所赵建华组）

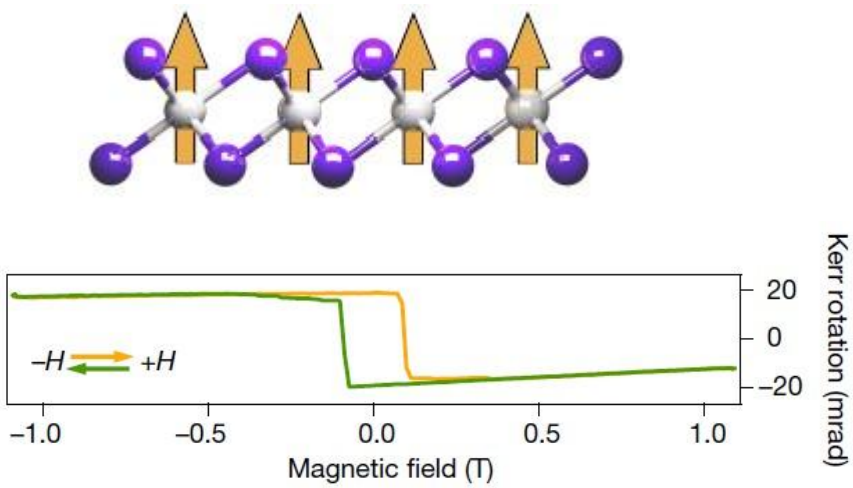
($Ga^{3+}$, $Mn^{2+}$) 参杂中价态不匹配

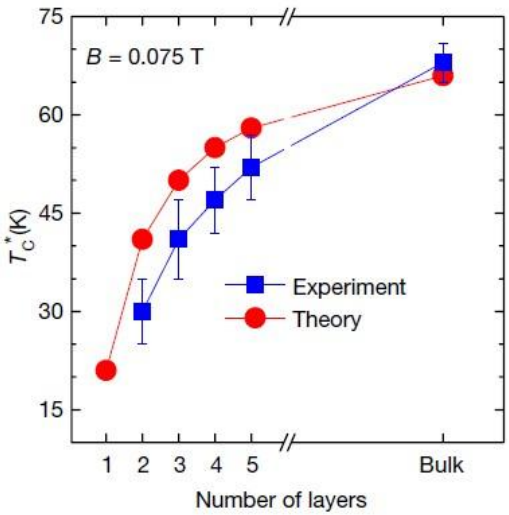
→ 两个问题(Mn杂质浓度低;同时引入了自旋和载流子)

→ 提高居里温度Tc难度很大

# 二维本征磁性半导体

2017年实验合成了二维本征铁磁半导体




$CrI_3$
Tc = 45K (Monolayer)
Ising-type

Nature 546, 270 (2017)

$Cr_2Ge_2Te_6$
Tc = 28K (Bilayer)
Heisenberg-type

Nature 546, 265 (2017)

# 寻找高温磁性半导体

- 三维本征磁性半导体:Tc低　　1960s

⇩

- 稀磁半导体：掺杂导致了难题　　1970s －

⇩

- 二维本征磁性半导体　　2017 －

⇩

**室温磁性半导体?**

# 理论进展

我们预言了几种**高温铁磁半导体**

2D $PdBr_3$,$PtBr_3$ PRAppl(2019)
2D 锝(Tc)基半导体 PRR(2020)

本征

Cr掺杂InSb,GaSb PRB(2020)
Mn掺杂BAs arXiv(2023)

掺杂

2D $Cr_2Ge_2Se_6$ PRAppl(2019)
2D $Cr_2Ge_2Te_6$ ACS Nano(2023)

应变

2D $Cr_2Ge_2Te_6/PtSe_2$ PRB(2020)

异质结

**基于半导体**

2D 铁磁金属 + 元素替换 PRB(2023)
2D 铁磁金属 + 异质结/应变 PRB(2024)
2D 铁磁金属 + 部分元素替换 arXiv(2024)

**基于铁磁金属**

**高温亚铁磁半导体**

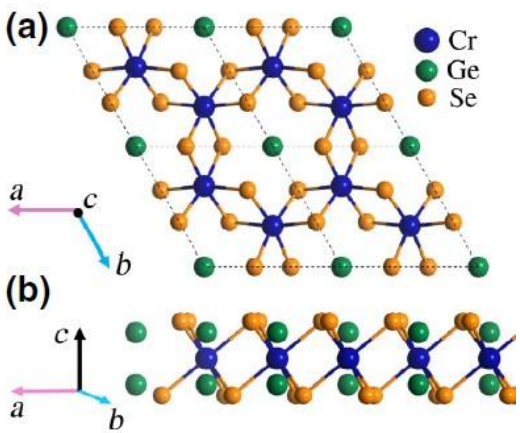
反铁磁绝缘体 + 自旋选择性掺杂
npj Comput. Mater. (2024)

**基于反铁磁绝缘体**

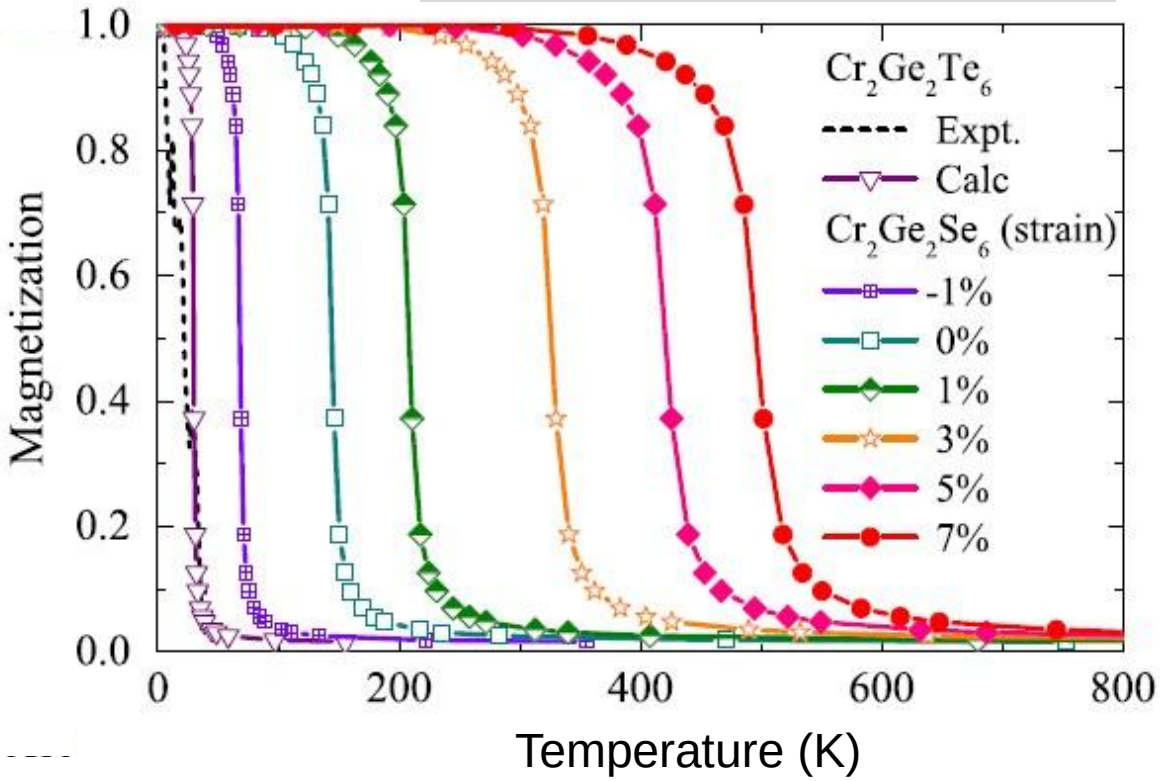
# 数值计算：应变提升二维磁性半导体$Cr_2Ge_2Se_6$居里温度Tc

$Cr_2Ge_2Te_6$ : Tc = 28K
Nature (2017)

$Cr_2Ge_2Se_6$：更高的Tc




密度泛函理论 + 蒙特卡洛模拟




拉伸应变可以产生高于室温的居里温度

X. J. Dong, J. Y. You, B. Gu, and G. Su, Phys. Rev. Appl. 12, 014020 (2019)

# 应变提升铁磁居里温度的机理：超交换作用

密度泛函理论 + 瓦尼尔函数计算

TABLE II. DFT results for hopping-matrix element $|V|$ and energy difference $|E_p - E_d|$ between $4p$ orbitals of Se and $3d$ orbitals of Cr for the 2D semiconductor $Cr_2Ge_2Se_6$ without strain and with 5% strain.

| | Hopping-matrix element $\|V\|$ (eV) | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| Strain (%) | $p_z - d_{z^2}$ | $p_z - d_{xz}$ | $p_z - d_{yz}$ | $p_z - d_{x^2-y^2}$ | $p_z - d_{xy}$ |
| 0 | 0.257983 | 0.29527 | 0.380283 | 0.190041 | 0.445906 |
| 5 | 0.258289 | 0.22747 | 0.306872 | 0.201524 | 0.416315 |
| | Energy difference $\|E_p - E_d\|$ (eV) | | | | |
| | $p_z - d_{z^2}$ | $p_z - d_{xz}$ | $p_z - d_{yz}$ | $p_z - d_{x^2-y^2}$ | $p_z - d_{xy}$ |
| 0 | 1.415092 | 0.4458 | 0.45512 | 0.581666 | 0.581166 |
| 5 | 1.552237 | 0.09143 | 0.09775 | 0.695055 | 0.693946 |

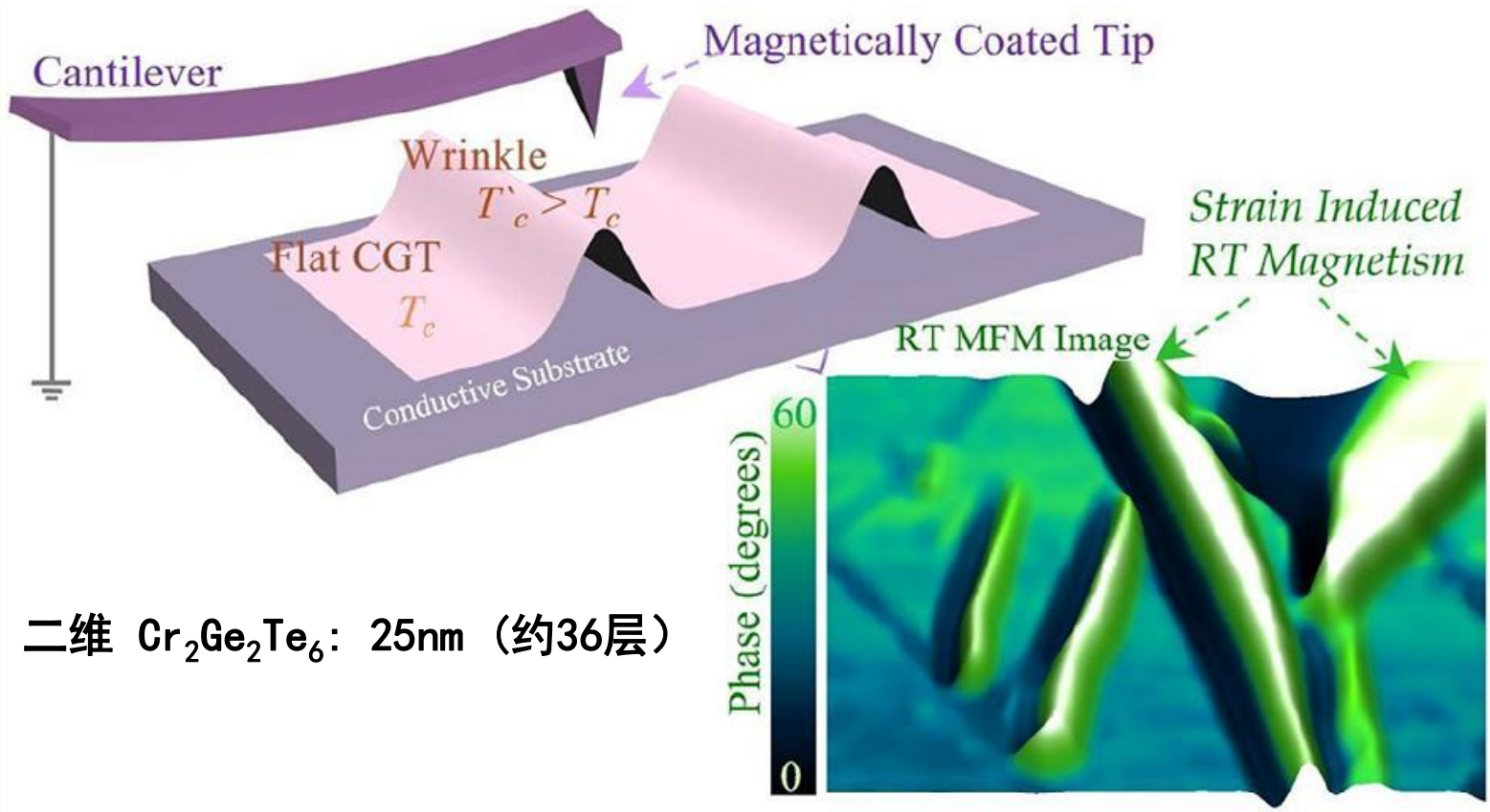
Cr(d)-Se(p)反铁磁关联 $$J_{pd} \approx 2|V_{pd}|^2 \frac{1}{|E_p - E_d|}$$

超交换作用

拉伸应变：减小了Cr(d)和Se(p)能级差
增强了Cr(d)和Se(p)反铁磁关联
增强了Cr(d)和Cr(d)铁磁性

X. J. Dong, J. Y. You, B. Gu, and G. Su, Phys. Rev. Appl. 12, 014020 (2019)

# 实验：室温铁磁半导体$Cr_2Ge_2Te_6$ （强应变）




二维 $Cr_2Ge_2Te_6$：25nm（约36层）

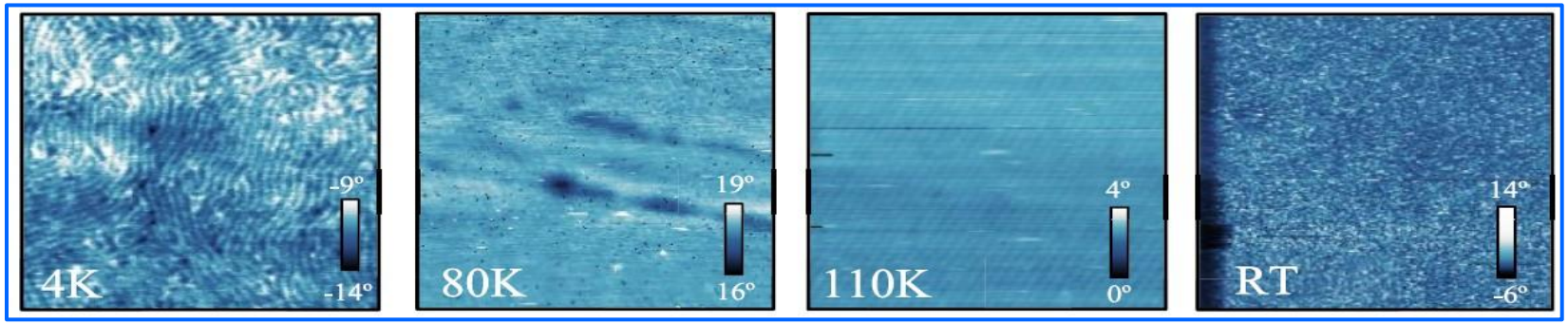
实验：应变产生弯曲皱纹的二维范德华铁磁半导体$Cr_2Ge_2Te_6$中利用磁力显微镜观测到了室温铁磁性

A. O Neill, S. Rahman, Z. Zhang, P. Schoenherr, T. Yildirim, B. Gu, G. Su, Y. Lu, and J. Seidel, ACS Nano 17, 735 (2023)

# 实验：室温铁磁半导体$Cr_2Ge_2Te_6$ （强应变）

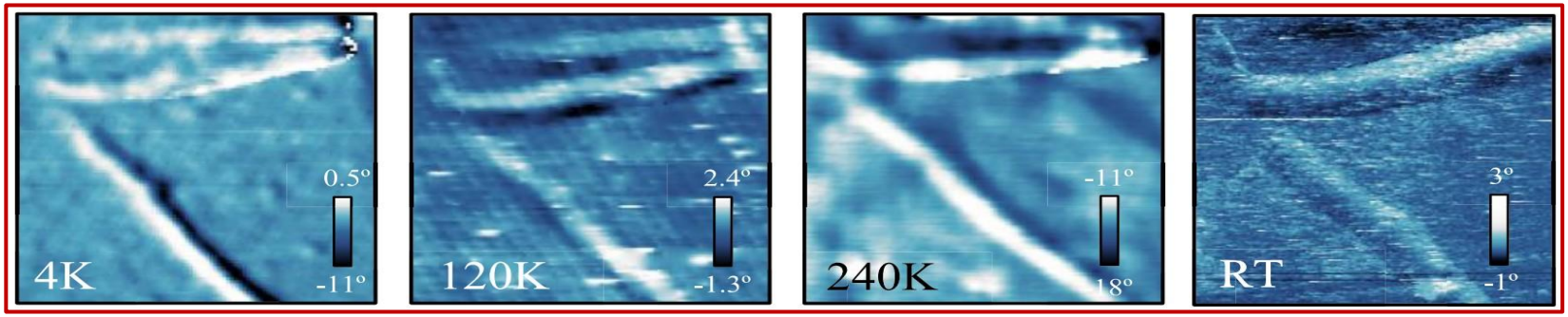
## 弯曲皱纹的二维 $Cr_2Ge_2Te_6$：温度依赖的磁力显微镜(MFM)信号

Strain 1.3%




施加1.3%应变的样品：MFM信号在110K以上基本消失， Tc≈110K

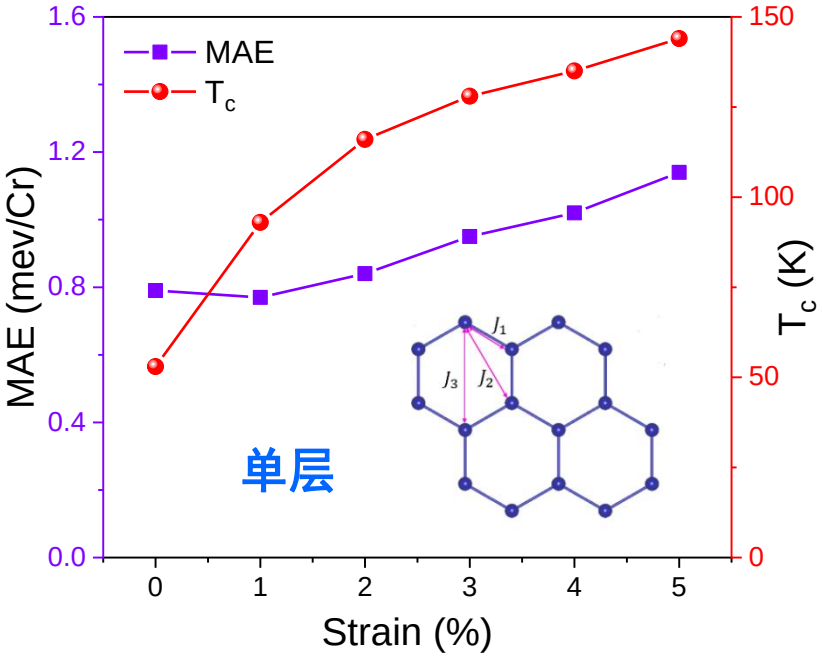
Strain 2.3%

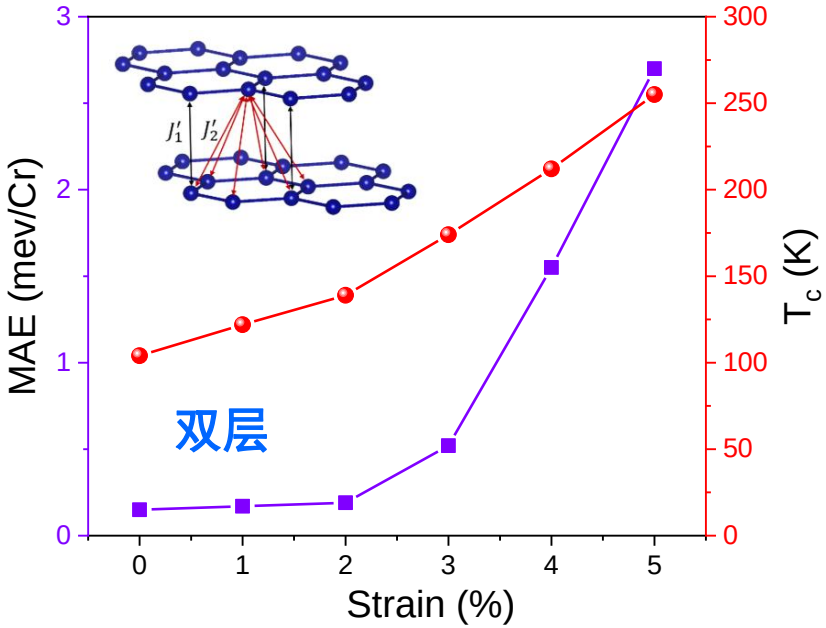



施加2.3%应变的样品：弯曲皱纹处MFM信号保持到室温， Tc≈300K

A. O Neill, S. Rahman, Z. Zhang, P. Schoenherr, T. Yildirim, B. Gu, G. Su, Y. Lu, and J. Seidel, ACS Nano 17, 735 (2023)

# 计算：室温铁磁半导体$Cr_2Ge_2Te_6$ （强应变）




**二维 $Cr_2Ge_2Te_6$ 计算：单层Tc < 双层Tc；应变6-8%下，双层Tc≈300K**

**二维 $Cr_2Ge_2Te_6$实验：25nm（约36层），2.3%应变，弯曲皱纹处Tc≈300K**

**强应变下二维$Cr_2Ge_2Te_6$可以具有室温铁磁性**

A. O Neill, S. Rahman, Z. Zhang, P. Schoenherr, T. Yildirim, B. Gu, G. Su, Y. Lu, and J. Seidel, ACS Nano 17, 735 (2023)

# 小结

**“能否制造出室温铁磁半导体？”**

**2005年被Science杂志列入125个重要未解科学问题之一！**

**可能！**

1. 强应变下二维磁性半导体$Cr_2Ge_2Te_6$
2. 其他途径（新材料、异质结、亚铁磁半导体等）