



中国材料大会 2025

暨新材料科研仪器与设备展

7月5-8日, 2025

福建 厦门

D02-多铁性材料

D02-Multiferroic Materials

主办单位

中国材料研究学会

会议网址: <https://cmc2025.scimeeting.cn>



D02. 多铁性材料

分会主席：殷月伟、马静、张金星、董帅、刘俊明

D02-01

线性磁电的登山之路

刘俊明

南京大学

D02-02

Control of magnetic skyrmions in multiferroic heterostructures

赵永刚

清华大学

D02-03

Geometry-driven polar antiferromagnetic metallicity in a double-layered perovskite cobaltate

舒新愉^{1,3}, 于浦^{*1,2}

1 低维量子物理国家重点实验室, 清华大学物理系, 北京, 中国

2 量子信息前沿科学中心, 北京, 中国

3 电子信息学院, 杭州电子科技大学, 浙江, 中国

结构极性与磁性在单一材料中的共存可催生出多铁性材料, 为多维信息态的传递提供了理想的平台, 由此开辟了兼具重要研究价值与应用前景的新兴领域。尽管既往研究集中于绝缘体系以实现极性, 但磁性极化金属仍极为罕见且科学意义重大——其对称性破缺的晶格畸变、自旋序与本征导电性之间的耦合, 为探索涌现磁电现象提供了独特机遇。

本研究基于脉冲激光沉积技术以及臭氧退火技术, 首次外延生长了高质量单晶双层 Ruddlesden-Popper 钙钛矿 $\text{Sr}_3\text{Co}_2\text{O}_7$ 材料, 并发现了一种新奇的反铁磁极化金属态。具体而言, 不同亚层中的钴离子沿着面外方向产生了非等量位移, 并以此几何构型打破了空间反演对称性, 在维持金属导电性的同时形成稳健的自发极化态。其准二维晶体结构中存在沿着 c 轴 $\mathbf{N}\hat{e}_1$ 矢量的 A 型反铁磁序, 该磁序与钙钛矿双层单元间 $\text{Co-}3d$ 轨道的层间杂化作用息息相关。尤为显著的是, 尽管面外剩余磁化强度近乎可忽略, 但体系中观测到显著的零场反常霍尔电导。深入分析表明, 此现象源于反铁磁序与极性态之间的强耦合效应, 是一种宇称-时间 (PT) 对称性破缺下的一种输运现象。本研究不仅发现了一种融合极性、反铁磁性与金属性的新型关联电子态, 为探索涌现磁电效应提供了崭新平台, 更凸显了层状钙钛矿中对称性工程与几何畸变在多功能量子材料设计中的关键作用。

关键词: 极化金属、反铁磁、Ruddlesden-Popper 钙钛矿、反常霍尔效应、对称性破缺

D02-04

GdMn₂O₅ 中普适的拓扑磁电效应

陆成亮

华中科技大学

拓扑磁电是新涌现的物理现象, 能够实现磁电状态的精确操控。本报告将介绍通过电场实现大幅度扩展多铁材料 GdMn_2O_5 中拓扑磁电的物理参数空间: 磁场从仅限于魔角方向拓展至任意方向; 温度从 $T=2\text{ K}$ 大幅提升至铁电居里温度 $T_C=33\text{ K}$ 。通过系统研究多铁材料家族 RMn_2O_5 中拓扑磁电行为, 我们发现稀土

离子磁性对降低不同磁电状态之间的势垒起到重要作用，对实现低场操控的拓扑磁电有重要意义。

[1] H. W. Wang et al., Phys. Rev. Lett. 134, 016708 (2025).

[2] L. Ponet et al., Nature 607, 81 (2022)

D02-05

铁电/多铁薄膜应变工程 2.0

陈祖煌

哈尔滨工业大学深圳校区

随着电子元器件集成化和大功率化导致的发热问题以及航空航天、外太空探索、石油和天然气勘探以及核能等领域发展，对铁电/多铁器件的高温性能、绝缘性和可靠性提出了更高的要求。因此，研制出具有高居里温度、强极化和低漏电流密度低的高温铁电/多铁薄膜材料有助于提高存储器等电子器件的可靠性、稳定性和工作温度窗口。然而，传统无铅铁电材料如 BaTiO_3 存在居里温度低和极化小问题，而无铅多铁材料如 BiFeO_3 则存在严重的漏电问题，这严重影响器件的服役温度、循环稳定性、寿命和能耗。目前传统掺杂改性通常以阳离子取代和固溶掺杂为主，难以实现铁电/多铁材料综合性能的大幅提升。如传统固溶体掺杂因受到维加德定律限制，导致难以有效结合多个体系的优点进而实现材料综合性能的极大提升。本报告主要介绍我们最近在无铅 $(1-x)\text{BiFeO}_3-x\text{BaTiO}_3$ 多铁固溶体薄膜的工作，我们利用外延应变和化学掺杂协同作用成功突破了传统固溶体经典维加德定律限制，实现了居里温度和极化强度的大幅提升，开发了同时具有大极化、高居里温度和低漏电流的新型无铅铁电/多铁薄膜，有效提高了器件可靠性。

Reference:

1. Wang T., et al., Matter, 8, 101874 (2025)
2. Wang T., et al., Science Advances 11, eads8830 (2025)

D02-06

多铁研究的新机遇

段纯刚*

华东师范大学

多铁性研究领域历经二十余年仍然充满生机，这背后主要有两个推动力，一个是传统铁性（如铁磁性、铁电性）研究的内涵在不断丰富，诞生了如交变磁性、滑移铁电、拓扑铁电（铁磁）等新概念；一个是新型铁性的发现，如铁谷性、变铁性等。在这两个推动力的作用下，铁性之间的耦合变得更加丰富多彩，多种手段如光、电、磁、力、声等联用，使得多铁材料的研究面临更多的新机遇。本报告将以三铁体系 Nb_3X_8 ，滑移及莫尔体系等做展开阐述。

D02-07

Magnetoelectric spring for multiferroic spin-wave transistor with low energy

张金星

北京师范大学

D02-08

室温多铁材料的磁子传输特性及电调控

易迪

清华大学

自旋波可在磁性绝缘体中传输，以自旋波作为信息处理基元的磁子学器件具备低功耗、高速度等优势，

是后摩尔时代信息存储技术的重要候选载体之一。然而，如何实现电场对磁子传输的有效调控，是发展相应逻辑和存储器件所面临的重要挑战之一。以 BiFeO_3 为代表的多铁性材料，在室温下兼具耦合的铁电序和反铁磁序，有望解决上述挑战。本次报告将介绍 BiFeO_3 异质结中的磁子传输特性及电调控行为。我们发现 BiFeO_3 可以高效传输自旋波，通过自旋轨道力矩可实现对磁矩的确定性翻转，通过改变铁电极化方向，可以有效地调控磁子传输特性。在此基础上，我们系统地解析了垂直异质结中磁子传输特性与反铁磁序、晶体对称性、界面耦合作用的关联，提出了实现电控磁子开关的策略，为进一步发展磁子逻辑功能器件奠定了基础。

D02-09

多铁异质结构中电场调控垂直磁化的研究

陈爱天*

电子科技大学

垂直磁各向异性材料能够增加信息存储密度和器件热稳定性，在磁性存储等领域具有重要的应用价值，其电场调控能够开发低能耗多功能器件，受到了广泛关注。铁磁/铁电多铁异质结构作为电场调控磁性的有效方案，在电场调控面内磁化方面取得了显著效果，而对垂直磁化的有效调控还比较欠缺，相关机制还不成熟。为此，我们在铁电材料 PMN-PT 上，制备不同的垂直磁化体系，观察到电场对垂直磁各向异性的增强和减弱现象，表明其来源于磁致伸缩系数的正负差异；揭示了界面粗糙度变化在电场调控界面垂直磁各向异性中的重要作用；构造具有条状磁畴的垂直磁化结构，得到了电场对条状磁畴取向的有效调控。相关研究为深入理解电场调控垂直磁各向异性材料提供了参考。

D02-10

PbZrO_3 反铁电薄膜的极化与介电调谐研究

潘豪

北京大学深圳研究生院

D02-11

交错磁 type-II 多铁中的磁电耦合及高通量搜索

郭文锦^{*1}，徐俊奇¹，杨玉荣¹，王怀强²，张海军¹

1. 南京大学

2. 南京师范大学

交变磁性作为一种新型磁序，具有补偿共线磁矩和动量依赖的自旋劈裂特性，近期引发了广泛关注，在下一代超快自旋电子学领域极具潜力^[1-5]。当前关于交变磁性^[1-5]与铁电性相互作用的研究极具吸引力——这种磁电耦合效应有助于开发新型磁电存储器和计算逻辑器件，但现有研究主要集中于交变磁体与 I 型多铁材料的结合。由此引发的一个关于交变磁体中磁电耦合机制的关键科学问题：其非常规自旋结构能否产生自发极化，从而实现 II 型多铁性？同时，本征 2D 交错磁材料的稀缺也大大阻碍了相关研究领域的进展。

一方面，我们结合对称性分析与电偶极矩微观理论，首次明确提出交变磁序诱导铁电极化的物理机制。其次，通过建立交变磁体中电极化矢量与 $\mathbf{N}\hat{\mathbf{e}}_1$ 序参量之间的对称性关联，我们揭示了二者显著的依赖行为，并依据层群对称性将二维交变磁体划分为八种不同的磁电耦合类型。另外，以单层 MgFe_2N_2 为原型材料的第一性原理计算验证了理论框架的可靠性。同时，我们还提出利用磁光法拉第检测识别交变磁多铁材料中的 $\mathbf{N}\hat{\mathbf{e}}_1$ 序取向及其伴随的极化。另一方面，我们以超十万个的 2D 材料数据库为载体，考虑满足交错磁材料的对称性筛选出超 1100 个本征 2D 交错磁材料，并识别出上百个交错磁 type-II 多铁材料。我们的研究通过桥接 II 型多铁性的强磁电耦合特性与交变磁体的独特优势，为发展交变磁多功能自旋电子学开辟了新路径。

参考文献:

- [1] L. Smejkal, J. Sinova, T. Jungwirth, Emerging Research Landscape of Altermagnetism, *Phys. Rev. X* 12, 040501 (2022).
- [2] L. Smejkal, J. Sinova, T. Jungwirth, Beyond Conventional Ferromagnetism and Antiferromagnetism: A Phase with Nonrelativistic Spin and Crystal Rotation Symmetry, *Phys. Rev. X* 12, 031042 (2022).
- [3] P. Liu, J. Li, J. Han, X. Wan, Q. Liu, Spin-group symmetry in magnetic materials with negligible spin-orbit coupling, *Phys. Rev. X* 12, 021016 (2022).
- [4] J. Krempaský, L. Smejkal, S. W. DSouza, et al., Altermagnetic lifting of Kramers spin degeneracy, *Nature* 626, 517 (2024).
- [5] R. A. Leenders, D. Afanasiev, A. V. Kimel, R. V. Mikhaylovskiy, Canted spin order as a platform for ultrafast conversion of magnons, *Nature* 630, 335 (2024).
- [6] Wen-Ti Guo, Junqi Xu, Yurong Yang, Huaiqiang Wang, Haijun Zhang, Altermagnetic type-II Multiferroics with Néel-order-locked Electric Polarization, *Phys. Rev. Lett.* under review (2025).
- [7] Wen-Ti Guo, Junqi Xu, Xinqi Liu, Rongxiang Zhu, Huaiqiang Wang, Haijun Zhang, High-throughput screening and classification of intrinsic altermagnetic monolayers, *Nat. Commun.* to be submitted (2025).

D02-12

基于极化拓扑的存储与类脑原型器件

高兴森

华南师范大学

D02-13

钙钛矿铁电体中压电效应与电畴尺寸的关系

李飞*

西安交通大学

Piezoelectricity of perovskite ferroelectric crystals is widely utilized in electromechanical devices such as sensors and actuators. It is broadly believed that the smaller the ferroelectric domain size, the higher the piezoelectricity, arising from the commonly assumed larger contributions from the domain walls. In this presentation, the domain-size dependence of piezoelectric coefficients of prototypical ferroelectric crystals is theoretically studied based on thermodynamic analysis and phase-field simulations. It is revealed that the inverse domain-size effect, i.e., the larger the domain size, the higher the piezoelectricity, is entirely possible and can be just as common. The nature of the domain-size dependence of piezoelectricity is shown to be determined by the propensity of polarization rotation inside the domains instead of the domain wall contributions.

D02-14

铁电-反铁电固溶体中的极性斯格明子纳米畴

温峥*

Qingdao University

最近, 极性拓扑畴, 特别是极性斯格明子 (Polar skyrmion) 受到业界广泛关注, 其具有手性、负电容、场控二次谐波等新奇物性, 并且这种拓扑孤子可以稳定在原子尺度, 在超高密度数据存储、负电容低功耗场效应器件以及高灵敏太赫兹成像等领域显示出巨大应用潜力, 这推动了铁电拓扑电子学在新一代信息技术的持续创新发展。然而, 铁电体的“电极化-晶格”强耦合使得极性斯格明子成为能量介稳态。目前, 其仅存在于少数借助复杂薄膜结构来平衡能量间相互作用的材料体系中, 限制了相关电子学器件的设计、制备

和 CMOS 系统集成。因此，探索新的极性斯格明子材料体系对于拓扑电子学的发展十分重要，但同时由于苛刻的力、电边界条件充满了挑战。

当前工作提出基于铁电-反铁电固溶体的斯格明子材料体系。固溶体中铁电序与反铁电序共存，其能量相互竞争导致电偶极子旋转，当固溶成分恰当时，非共线电偶极子有序化形成如 Néel 畴壁等排列并产生斯格明子拓扑结构。该体系化学组分简单，易于制备且鲁棒性强，蕴含了拓扑极性结构形成的新机制，使得斯格明子电畴能够广泛存在于陶瓷和薄膜两种材料形态中，这不仅为极性拓扑相的理论和实验研究提供了广阔的平台，还促进了铁电电子学的创新发展。

参考文献: Weijie Zheng#, Xingyue Ma#, Zhentao Pang#, Yifeng Ren, Hongying Chen, Jibo Xu, Chunyan Zheng, Jianyi Liu, Xiaohui Liu, Yu Deng*, Yuefeng Nie, Di Wu, Laurent Bellaiche, Yurong Yang*, and Zheng Wen*, Skyrmion nanodomains in ferroelectric-antiferroelectric solid solutions, Nature Materials, DOI: 10.1038/s41563-025-02216-8 (2025)

D02-15

铁性拓扑结构的力学调控

王学云

Beijing Institute of Technology

D02-16

铁电拓扑畴形成的极化波叠加原理

高荣贞^{1,2}, 王静¹, 唐诗雨¹, 董守哲¹, 张树君³, 黄厚兵*¹, 南策文²

1. 北京理工大学
2. 清华大学
3. 卧龙岗大学

波干涉可以生成多种拓扑向量实体，例如经典电磁（光学）、声波、弹性波和水波中的涡旋。在铁电材料中，正负电荷的分离形成偶极子，这些偶极子在周期性排列时会产生连续的偶极波。受这些波之间相似性的启发，我们提出了铁电体拓扑结构形成的一般性原理，证明了铁电涡旋的基本形成机制是两个正交偶极波的叠加，这一机制通过数学推导、相场模拟和角分辨压电力显微镜得到了验证。此外，我们还展示了这一原理可以扩展到一系列非平庸的拓扑结构，包括 Ising、Néel 和 Bloch 畴壁、merons、skyrmions、Hopf 环、Solomon 环等。这些发现不仅加深了我们对现有拓扑结构形成机制的理解，还能够预测铁电/铁磁材料、液晶、玻色-爱因斯坦凝聚态（如超导体和超流体）等材料中的拓扑结构，例如 Star of David 环。

D02-17

高压磁电功能材料与物理

龙有文

中国科学院物理研究所

D02-18

分子压电材料的设计、合成及应用探索

游雨蒙

东南大学

D02-19

基于磁电复合材料的多场耦合与跨介质通信

储昭强*

哈尔滨工程大学

聚焦空海，空地跨介质通信的应用需求，美国 DARPA 率先提出并开展了“机械天线”的研究项目，旨在发展便携式、低功耗、低频磁场发射机。低频机械天线基于高 Q 值力学系统，驱动铁磁/铁电材料中磁/电偶极子的宏观运动，从而产生时变电磁场。汇报人主要从事磁电复合材料与器件方面的研究工作。本报告围绕低频机械天线的应用背景，介绍课题组在磁电复合材料非线性控制、甚低频磁电天线设计与应用方面的研究进展。我们发现多层磁电复合结构可以中和非晶 Metglas 中的弹簧硬化效应和压电陶瓷中的弹簧软化效应，从而有效抑制磁电天线的动力学非线性。在 50 Vpp 驱动电压下，单个多层磁电天线在自由空间 100 m 处可产生 851 fT 的磁通密度。此外，为了系统了解低频机械天线的发展趋势，报告还将介绍我们近两年在磁摆式超低频机械天线以及压电驱动的旋磁式极低频机械天线方面的一些工作。最后，本报告简述我们针对磁机天线未来在基础研究和场景应用上一些思考。

D02-20**基于补偿亚铁磁材料的电场调控垂直磁矩翻转**李超，汤爱华，南天翔，江万军，易迪*，南策文
清华大学材料学院

用电场调控垂直磁矩的翻转对发展低能耗的自旋电子学器件至关重要，是长期以来的目标，但同样充满挑战。这里，我们报道了基于应变媒介的磁电耦合，利用亚铁磁和铁电异质结实现了电场对垂直亚铁磁序的翻转。我们展示了利用电场可以在室温下实现对补偿亚铁磁主导磁亚晶格的可逆调控。利用化学掺杂的策略，我们进而降低了磁矩翻转所需的辅助磁场。在仅为 3 mT 的辅助磁场下，我们实现了对垂直亚铁磁序 180° 的可逆翻转，翻转比例接近 100%。此外，我们基于一种独特的机制，利用易失性的压电应变实现了非易失性的磁矩翻转，扩展了应变调控策略的应用范围。进一步地，我们在磁性多层膜中实现了零辅助磁场下电场对垂直磁矩的翻转。我们的研究结果为实现纯电场控制的新型自旋电子学器件开辟了新途径。

D02-21**ABO₃ 铁电氧化物/半导体异质结构的特殊电学响应研究**吕笑梅*，刘琳，雷林，黄凤珍，朱劲松
南京大学物理学院

基于 ABO₃ 铁电氧化物的异质结构在电、磁、声、光等领域展现出新颖的性能和广泛的应用前景。当铁电氧化物被沉积在半导体衬底上，两者之间形成的特殊异质界面将导致复杂而有趣的电场响应。我们通过脉冲激光沉积法、溶胶凝胶法在 Si 等半导体衬底上制备了 BiFeO₃ 基薄膜，其展现出不同于典型铁电材料的特殊电滞回线，矫顽电压和回线形态也可随后处理条件发生变化。介电谱测量显示，在较低频率以及较大偏压下可测得负的电容值。分析认为，薄膜与衬底之间形成的异质结，既能够影响氧空位等荷电缺陷的分布、迁移，也能够影响极化开关，而负电容则主要源于界面电荷注入引起的弛豫电响应。该工作可为低能耗的铁电/半导体集成器件设计提供重要参考。

D02-22**光电磁耦合材料制备与光伏调控自旋电子器件研究**周子尧
常州大学**D02-23**

铁电薄膜界面调控与信息存储器件性能

胡卫进*

中国科学院金属研究所

铁电阻变型存储器利用铁电极化相关的电阻态存储信息，读写速度快，写入功耗低，在未来信息存储技术中具有独特优势。利用界面精准调控铁电薄膜极化性能并揭示其与阻变性能的内在关联对于开发高性能铁电存储器件具有重要意义。本报告中，我将系统介绍如何采用界面功函数、外延应变、界面重构、缺陷工程等手段，精细调控钙钛矿铁电氧化物薄膜的自发畴结构和极化强度，从而优化铁电二极管、铁电异质结及铁电隧道结的性能。获得的主要结论包括：（1）利用金属/铁电界面的肖特基势垒，可在 BiFeO_3 薄膜中实现铁电自极化单畴，显著提升 $\text{SrRuO}_3/\text{BiFeO}_3/\text{Pt}$ 铁电二极管开关比 100 倍；（2）发现氧空位缺陷与铁电极化之间的强耦合效应，从而同步诱发多级电导跳跃与极化翻转平台，为铁电多态存储提供新视角；（3）发现界面元素扩散可诱导 BaTiO_3 薄膜铁电单畴，从而提升铁电类神经突触器件长时程增强与抑制的线性度和对称性，以实现 95% 的模式识别率；（4）利用 $\text{Sr}_3\text{Al}_2\text{O}_6$ 缓冲层连续调控 BaTiO_3 单晶薄膜晶格弛豫，可增强界面铁电极化强度至 $80 \mu\text{C}/\text{cm}^2$ ，从而提升铁电隧道结隧穿电致电阻 50 倍。

参考文献：

- [1] B. H. Huang, et al. Oxygen Pressure Modulation of Self-Polarization: Insights into ferroelectric Resistive Switching, ACS Appl. Ener. Mater. Revision, 2025
- [2] B. H. Huang, et al. Enhancing Ferroelectric Resistive Switching via Polar Order engineering in Sm-Doped BiFeO_3 films, Microelectron eng. 299, 112343, 2025.
- [3] X. Q. Li, et al. Interface element accumulation-induced single ferroelectric domain for high-performance neuromorphic synapse. Adv. Func. Mater. 2025.
- [4] X. Q. Li, et al. Epitaxial strain enhanced ferroelectric polarization towards a giant tunneling electroresistance, ACS Nano 18, 7989 (2024)
- [5] L. L. Li, et al. 2D antiferroelectric hybrid perovskite with a large breakdown Electric field and energy storage density, Adv. Func. Mater. 33, 2305524, 2023
- [6] B. H. Huang, et al. Schottky barrier control of self-polarization for a colossal ferroelectric resistive switching, ACS Nano, 17, 12347, 2023
- [7] B. H. Huang, et al. Coupled current jumps and domain wall creeps in a defect-engineered ferroelectric resistive memory, Adv. Elect. Mater. 8, 2101059 (2022).

D02-24

具有多级图像处理功能的感存算一体铁电光伏器件

樊贞*

华南师范大学

基于冯诺依曼架构的传统机器视觉系统面临着高能耗、高延迟等问题，难以满足智能驾驶等场景中海量视觉信息实时处理的需求。相比而言，具有感存算一体架构的智能视觉系统能直接在传感器端进行数据处理，从而大幅提升视觉信息处理的速度和能效。构建感存算一体智能视觉系统的核心部件是光电突触器件。在众多新兴光电突触器件中，铁电光伏突触因其多态可调、高稳定性、高耐久性、低能耗等优势脱颖而出。本课题组近年来一直围绕铁电光伏突触及感存算一体技术开展研究，取得了一些进展[1,2]。本报告将简要介绍一种新型光电压型铁电光伏突触，该器件基于极化调控光电压工作，表现出大光电压、动态光响应和可调光响应度。利用这些独特性能，基于光电压型铁电光伏突触的神经网络能同时实现图像存储、低级处理（视觉自适应）和高级处理（图像识别）等功能，为开发多功能感存算一体智能视觉系统提供了新思路。

[1] Cui et al., Nat. Commun. 13, 1707 (2022).

[2] Lin et al., Nat. Commun. 16, 421 (2025).

D02-25

氧化铪中通用的空穴阈与完备电极化翻转路径

曹腾飞*

西北工业大学

氧化铪薄膜 (HfO_2) 与 CMOS 工艺具有良好的兼容性, 尤其是超薄铁电相的开发, 使其成为超薄、超密存储器件开发的关键材料。然而, HfO_2 薄膜中铁电相的亚稳态特性使得大规模开发面临重大挑战。尽管至今已提出多种稳定机制, 但仍缺乏统一的方法来解释相关问题。实验研究表明, 阳离子 (如 La、Al、Y 等)、阴离子 (如 N、P、As 等) 掺杂、界面电荷交换以及带正电的氧空位等因素均有助于 HfO_2 铁电相的稳定。因此, 额外空穴对稳定 HfO_2 铁电相可能存在普遍机制。对这一机制的深入理解将为 HfO_2 铁电薄膜的大规模合成与器件应用奠定基础。在本报告中, 我们将介绍 HfO_2 铁电相稳定性中的普遍空穴阈值[1-2]。只要额外空穴的掺杂浓度低于该阈值, 额外空穴的引入将稳定 HfO_2 的铁电相; 反之, 当额外空穴浓度高于该阈值时, 空穴的存在反而降低 HfO_2 铁电相的稳定性。该阈值在不同的掺杂体系和界面异质结构中均表现出鲁棒性, 其原因是空穴在 HfO_2 基体中三配位、四配位氧亚晶格上的竞争分布所导致的静电能量变化。此外, 我们还设计了两个相互印证的实验来验证普遍空穴阈值的存在。在此基础上, 我们进一步分析了 HfO_2 中多种电极化反转路径, 并指出 90°C 的电极化反转在 HfO_2 电极化过程中占据重要地位。

[1] Tengfei Cao*, Guodong Ren, Ding-Fu Shao, Evgeny Y. Tsymbal*, and Rohan Mishra*, Stabilizing polar phases in binary metal oxides by hole doping, Physical Review Materials 7, 044412 (2023).

[2] Shu Shi#, Tengfei Cao#, Haolong Xi, Jiangzhen Niu, Xixiang Jing, Hanxin Su, Xiaojiang Yu, Ping Yang, Yichen Wu, Xiaobing Yan, He Tian*, Evgeny Y. Tsymbal*, and Jingsheng Chen*, Stabilizing the Ferroelectric Phase of $\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$ Thin Films by Charge Transfer, Physical Review Letters, 133, 036202 (2024).

[3] Qi Hu#, Shuning Lv#, Hsiaoyi Tsaia, Yufeng Xuea, Xixiang Jingc, fanrong Lin, Chuanjia Tong, Tengfei Cao*, Gilberto Teobaldif and Li-Min Liu*, Mapping of the full polarization switching pathways for HfO_2 and its implications, Proc Natl Acad Sci USA, 122(7), e2419685122 (2025).

D02-26

Gd 掺杂 NbNaO_3 基陶瓷类反铁电弛豫行为的研究

黄晓桦

厦门理工学院

D02-27

铁电氧化物界面的电子显微学研究

陈春林*

中国科学院金属研究所

界面是材料中广泛存在的微观结构, 对材料的力学、物理与化学等各方面性能均具有重要影响。本研究以 $\text{SrNbO}_{3.5}$ 、 $\text{LaTiO}_{3.5}$ 和 $\text{Epsilon-Fe}_2\text{O}_3$ 等铁电/多铁氧化物薄膜为研究对象, 在脉冲激光沉积薄膜生长的基础上, 应用像差校正透射电子显微术结合第一性原理计算的研究方法, 深入研究了薄膜中界面的原子与电子结构及其对薄膜电学与磁学性质的影响, 并阐明了微观机理。

D02-28

La₂SrSc₂O₇ 基陶瓷的杂化非常规铁电性

刘小强*, 郭喆, 魏玉璐, 陈湘明

浙江大学

杂化非常规铁电体(Hybrid improper ferroelectric)由于其内禀的电控磁性而受到广泛关注, 其铁电性来源于氧八面体的面内旋转和面外倾侧两个主序参量的耦合而诱发的二阶铁电序。近年来, 科学工作者们已经在双层 Ruddlesden-Popper (R-P)和 Dion-Jacobson (D-J)层状钙钛矿中观测到杂化非常规铁电性, 并初步建立了铁电性能与氧八面体畸变的关联, 为调控和优化杂化非常规铁电体的性能指明了方向。

最近, 日本小组在具有双层 R-P 结构的 La₂SrSc₂O₇ 陶瓷中发现了室温铁电性, 其中 A 位离子无序起到了决定性作用。由于其 B 位为三价离子, 很容易被三价的磁性离子置换从而引入磁性。因此, 在本工作中我们制备了 La₂Sr(Sc_{1-x}Fe_x)₂O₇ 陶瓷, 并测试了其铁电、介电和磁学性能。研究表明, 陶瓷的居里温度随着 x 的增加线性下降, 且 x = 0.15 时其居里温度降到室温附近。同时, 其剩余极化强度和矫顽场也随着 x 的增加而下降, 这与其氧八面体的旋转和倾侧角的演化规律对应。可惜的是, 直到 x = 0.15 的陶瓷中仍然未出现长程磁有序^[1]。另外, 我们还制备了一系列 Ln₂SrSc₂O₇ (Ln = Pr, Nd, Sm, Eu)单相致密陶瓷, 发现了其室温铁电性。研究表明, 随着稀土离子的变化, 出现了新的铁电相^[2]。

参考文献

[1] Guo, Z.; Zhang, Z.D.; Liu, X.Q.; Chen, X.M. Hybrid improper ferroelectricity in La₂Sr(Sc_{1-x}Fe_x)₂O₇ ceramics with double-layered Ruddlesden-Popper structures, *Appl. Phys. Lett.* 125, 042902 (2024).

[2] Wei, Y.L.; Guo, Z.; Zhang, Z.D.; Lin, J.; Huang Y.; Lu, X.; Liu, X.Q.; Chen, X.M. Competing octahedral modes in the hybrid improper Ruddlesden-Popper ferroelectric Ln₂SrSc₂O₇, *Chem. Mater.* (2025) DOI: 10.1021/acs.chemmater.5c00325.

D02-29

Revisit the magnetotransport of perovskite manganite heterostructures

Lingfei Wang*

University of Science and Technology of China

In transition-metal-oxide heterostructures, the anomalous Hall effect (AHE) serves as a powerful tool for detecting magnetic states and revealing intriguing interfacial magnetic orderings. However, achieving a larger AHE at room temperature in oxide heterostructures remains challenging due to the dilemma of mutually strong spin-orbit coupling and magnetic exchange interactions. In this study, we use perovskite manganite heterostructures as a model system and employ several experimental approaches to enhance the magnetotransport signal. First, we explored the Ru doping-enhanced AHE in La_{2/3}Sr_{1/3}Mn_{1-x}Ru_xO₃ epitaxial films. By increasing the B-site Ru doping level up to 20%, we observed an enhancement in anomalous Hall resistivity at room temperature from nΩ·cm to μΩ·cm scale. Ru doping leads to strong competition between ferromagnetic double-exchange interaction and antiferromagnetic super-exchange interaction. The resultant spin frustration and spin-glass state facilitate a strong skew-scattering process, thus significantly enhancing the extrinsic AHE. Second, we discovered in-plane AHE (IP-AHE) in the ruthenate/manganite/ruthenate trilayer heterostructures. Both the ruthenate capping/buffer layers effectively modulate the MnO₆ octahedral rotation/distortion pattern of the manganite layer, thereby resulting in an in-plane uniaxial magnetic anisotropy. The simultaneous breaking of inversion and time-reversal symmetries induce a pronounced IP-AHE, reaching up to 100 nW×cm. Moreover, the IP-AHE can be effectively modulated by various stimuli, including epitaxial strain, interfacial structure, and magnetic field. At last, we demonstrate the tunable magnetic skyrmions and the corresponding topological Hall effect of manganite thin films.

D02-30**Synthesis of perovskite BaCoO_{3-δ} film with emergent electronic state and superior**

鲁年鹏*

中国科学院物理研究所

The discovery of novel materials with exotic properties can not only greatly broaden our understanding of the nature, but also provide us more ingredients to design applicable functionalities and devices. Cobaltite oxide materials, such as perovskite SrCoO_{3-δ} and CaCoO_{3-δ}^[1,2], have attracted much attention recently due to their rich electronic states and ionic functionalities. However, their counterpart perovskite BaCoO_{3-δ} remains largely unexplored due to its larger tolerance factor, which conventionally favors hexagonal phase instead. Here, we successfully synthesize the perovskite BaCoO_{3-δ} in thin-film form, and reveal its superior performance of oxygen ion evolution. Specifically, brownmillerite BaCoO_{2.5} is firstly achieved using a template-guided epitaxial growth. Subsequently, the as-grown sample is readily transformed into perovskite BaCoO_{3-δ} through a soft chemical redox reaction at moderate temperature and ambient pressure, highlighting its reduced oxygen diffusion barrier energy. Moreover, due to the pronounced spin super-exchange interaction and the symmetry induced energy bandgap opening, BaCoO_{3-δ} shows a room-temperature ferromagnetic (350 K) insulating ground state that can be applied to spintronic devices. Furthermore, owing to the enlarged lattice framework and enhanced oxygen catalytic reactivity comparing to its counterparts, BaCoO_{3-δ} exhibits an excellent oxygen reduction reaction, showing promising performance as cathode material in solid oxide fuel cell. Thus, our finding for this new-synthesized perovskite BaCoO_{3-δ} films exhibits great potential to fabricate desired physical properties and functionalities.

References:

- [1] Nianpeng Lu, et al., Electric-field control of tri-state phase transformation with selective dual-ion switch. *Nature* 546, 124 (2017).
- [2] Jianbing Zhang, et al., A correlated ferromagnetic polar metal by design. *Nat. Mater.* 23, 912 (2024).

D02-31**BiFeO₃薄膜中的畴工程**陈德杨^{*1}, 陆旭兵¹, 高兴森¹, 朱莱², 洪子健³, 陈龙庆⁴, 刘俊明⁵

1. 华南师范大学
2. 香港理工大学
3. 浙江大学
4. 宾州州立大学
5. 南京大学

多铁性材料中晶格、自旋、电荷等各种序参量的竞争和共存, 为材料的性能调控提供了一种多维度方案, 是解决摩尔定律走向极限所带来的信息存储材料和器件挑战的重要路径之一。铁电畴作为多铁性材料中的核心功能基元是其功能特性和应用前景的重要决定因素。本报告将介绍多铁性 BiFeO₃ 薄膜中拓扑畴结构的调控, 结合界面工程、应变工程等途径, 实现了不同类型拓扑畴的构建, 构筑了大面积导电 180° 拓扑畴壁 (*Nature Communications* 2023, *Science Advances* 2025), 获得了尺寸为几个纳米的涡旋-反涡旋对阵列, 并实现了其尺寸和周期的调控 (*Advanced Materials* 2025)。这些研究为基于畴壁器件的研发提供了材料基础。

D02-32**铁酸铋中本征氧空位的超分辨电子叠层成像研究**杨文峰¹, 李才勇², 曹国平¹, 于浦², 于荣^{*1}

1. 清华大学材料学院

2. 清华大学物理系

氧空位作为过渡金属氧化物中常见的本征缺陷，对材料的电子结构、磁结构、输运性能及光吸收特性等物理性质具有显著调控作用^[1,2]。铁酸铋 (BiFeO_3) 作为典型的过渡金属氧化物，因其兼具室温铁电性与反铁磁性，成为单相多铁性材料的代表性体系，在自旋电子学、能量存储等领域展现出重要研究价值^[3,4]。然而，传统电子显微学方法受限于对轻元素（如氧）的低灵敏度，难以实现对铁酸铋中氧空位的高空间分辨定量分析，这一技术瓶颈制约了对其缺陷物理机制的深入解析。

超分辨电子叠层成像作为一种基于扫描透射电镜中像素化探测器数据（也称 4D-STEM）的计算成像方法，不仅具备准三维成像能力，更在空间分辨率、位置精度和剂量效率等关键性能指标上超越了像差校正电镜的 HAADF、ABF、iDPC 等传统技术，成为原子分辨结构分析领域的前沿技术^[5,6,7]。

本研究借助超分辨 4D-STEM 方法^[8]，首次在铁酸铋的四方相中观测到本征氧空位的存在。研究发现，无论是纯四方相铁酸铋，还是菱方-四方混合薄膜中的四方相区域，均呈现出相似的氧空位有序现象。这一结果表明，氧空位有序是铁酸铋四方相的一种自发现象，而非特定制备条件下的偶然产物。该发现为深入理解铁酸铋的物理化学行为提供了全新视角，并为开发其在信息存储、电子器件等领域的新功能开辟了潜在路径。

1. Wang, Z., et al., EELS analysis of cation valence states and oxygen vacancies in magnetic oxides. *Micron* 2000, 31(5): 571-580.

2. Jeschke, HO, et al., Localized versus itinerant states created by multiple oxygen vacancies in SrTiO_3 . *New J Phys* 2015, 17(2): 023034.

3. Zeches, RJ, et al., A strain-driven morphotropic phase boundary in BiFeO_3 . *Science* 2009, 326(5955): 977-980.

4. Farokhipoor, S, et al., Local conductivity and the role of vacancies around twin walls of (001)- BiFeO_3 thin films. *J Appl Phys* 2012, 112(5): 052003.

5. Rodenburg, J.M., Ptychography and related diffractive imaging methods. *Advances in imaging and electron physics*, 2008. 150: p. 87-184.

6. Yu, R., et al., Introduction to electron ptychography for materials scientists. *Microstructures*, 2024. 4(4): p. 2024056.

7. Miao, J., Computational microscopy with coherent diffractive imaging and ptychography. *Nature*, 2025. 637(8045): p. 281-295.

8. Yang, W., et al. Local-orbital ptychography for ultrahigh-resolution imaging. *Nature Nanotechnology* 2024, 19(5): 612-617.

D02-33

氧化铪铁电薄膜的原子尺度结构演化及性能调控

辛天骄, 郑勇辉, 高兆猛, 郑赟喆*, 许亦琳, 成岩*
华东师范大学

氧化铪铁电材料是下一代存储介质的重要候选者，其关键的铪基铁电相并非热力学稳定相，且原子层沉积技术制备的氧化铪基铁电材料经过退火后呈现出多晶多相且取向随机的结构，这使得器件的一致性很难得到有效控制。因此提升铁电相的稳定性以及实现对铁电相极轴取向的精准调控，是决定未来铪基铁电存储器能否成功应用的核心要点。基于工程化的需要，针对原子层沉积技术制备的 $\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$ 的铁电相稳定性与取向调控进行了研究，内容如下：

(1) 原位快速热退火揭示了铁电畴的形成起源。在球差校正透射电镜环境中，设计了针对存储电容的快

速热退火原位实验。实验结果表明，铁电相在降温阶段约 300°C 时开始形成，其根源是四方结构向正交结构的转变。这一发现为铅基铁电的起源提供了直接的实验依据。

(2)瞬态高分辨成像揭示了铁电畴形成的微观机制。借助原位快速热退火技术，成功实现了对铁电相从四方结构通过原子切变转变为正交结构过程的瞬态高分辨成像。基于此，提出了优化工艺策略，即适当放缓降温速率或者进一步制造温差，以此提高相结构转变的驱动力，进而提升铁电相在材料中的占比，最终增强铅基器件的铁电性。

(3)通过快速热退火过程中原位交流电偏置，进行氧化铅铁电电容器的极轴取向调控。在热处理的冷却阶段施加电场，能够明显提升铅基铁电电容器的剩余极化强度。结构表征显示，电场下快速热退火这一方法能够有效地将铁电相的极化方向控制在与平板电容器面外电场方向一致的位置。

D02-34

MX₂ 单层中的铁磁致铁电

董帅^{*1}，周颖¹，叶浩燊¹，张俊廷²

1. 东南大学

2. 中国矿业大学

多铁材料中的磁致铁电体为实现本征强磁电耦合提供了理想途径，然而传统体系受限于复杂的反铁磁结构、微弱的磁致极化强度及较低的工作温度，其磁电性能难以满足实际应用需求。二维 MX₂ 单层材料由于低维限域效应为实现磁电耦合效应提供了独特平台。通过对称性分析与理论计算，揭示了此类材料中由于 pd 轨道杂化诱导的铁磁致铁电性的普适机制。得益于强自旋-轨道耦合作用，一些材料的极化强度可以达到第二类多铁性材料中极化的最大的值。更有趣的是，拓扑保护机制（如双叶黎曼面结构）赋予磁化反转过程鲁棒性与低耗散特性。本工作阐明了材料本征属性（强 SOC 元素）与低维结构的协同效应，为设计高性能磁电功能器件奠定了理论基础，在自旋电子学与非易失存储领域具有应用潜力。

1. Y. Zhou, H. Ye, J. Zhang, and S. Dong, Double-leaf Riemann surface topological converse magnetoelectricity, *Phys. Rev. B* 110, 054424 (2024).

2. Y. Zhou, H. Ye, J. Zhang, and S. Dong, Record-large magnetically driven polarization in room temperature ferromagnets OsX₂ monolayers, *Phys. Rev. Mater.* 8, 104403 (2024).

D02-35

铁电极化翻转和磁性的耦合

杨玉荣^{*}，王健，李旭，吴迪

南京大学

多铁性材料是重要的功能材料，在驱动、信息存储、自旋电子学等领域有重要的应用前景。磁电耦合弱是多铁性材料的瓶颈之一，实现电控磁是多铁性功能材料研究的重要难点。目前的研究大多集中在线性磁电耦合，而忽略了高阶的磁电耦合，也就是铁电极化在翻转过程中可能的耦合效应。利用第一性原理方法，我们重点预言了两类铁电翻转对磁性的影响：1) 在正交相多铁性材料中，铁电极化翻转是极化方向旋转到相反的方向，而铁磁性（反铁磁性）有较强的各向异性，所以铁磁性（反铁磁性）会随极化旋转过程导致的结构各向异性的变化而变化，导致磁性变化至相反方向^[1]；2) 在滑移铁电极化翻转过程中，不仅面外极化发生变化，也会产生面内极化的变化，极化旋转至相反的方向，根据麦克斯韦方程，电极化旋转会引起动态磁性的产生^[2]。这种铁电极化旋转导致的磁性变化或产生动态磁性是一种新的磁电耦合效应，在传感、电磁领域内会产生新的应用价值。

参考文献：

[1]. Xu Li, Hao Tian, Lan Chen, Hongjun Xiang, Jun-Ming Liu, L. Bellaiche, Di Wu & Yurong Yang, npj Computational Materials 10, 70 (2024)

[2]. Jian Wang, Xu Li, Xingyue Ma, Lan Chen, Jun-Ming Liu, Chun-Gang Duan, Jorge Íñiguez-González, Di Wu, Yurong Yang, Physical Review Letters 133, 126801 (2024)

D02-36

铁电隧道结：面内畴壁与极化界面的效应

李明*

电子科技大学

铁电隧道结具有超高开关比、超快读写速度等优势，被认为是下一代非易失信息存储技术。畴壁，特别是具有高电导率的带电畴壁如何形成与稳定，会对隧穿电阻效应产生什么样的影响，是设计铁电隧道结存储器的关键问题之一。通过第一性原理计算，我们发现，在 LSMO/BTO/LSMO 的铁电隧道结中，对称的极性界面促进了二维电子气的形成，稳定了头对头的带电畴壁。并且，由于带电畴壁中存在共振隧穿导致了更高的电导率，产生了与单一极化方向不同的电阻态，借助界面工程学，我们进一步在面内铁电隧道结器件中实现了可完全相互转换的三重电阻态，并将此效应命名为畴壁致隧穿电阻效应。该方案有助于增大存储容量、提升开关比。

此外，针对带电畴壁的形成机制，我们基于实验上在 SRO/BFO/SRO 隧道结中发现了尾对尾的带电畴壁，利用氧空位与对称界面的作用理论解释了这一带电畴壁的成因。氧空位提供了必要的正的屏蔽电荷，而对称界面提供了保持氧空位不受影响的静电势，从而降低了带电畴壁的形成能。这一理论模型完美解释了实验发现的带电畴壁的形成以及畴壁随氧空位移动而迁移的行为。这一新机制的发现拓宽了铁电隧道结存储器的设计思路，拓展了畴壁隧道结的应用场景。

D02-37

二维滑移铁电极化翻转动力学的理论研究

何日*

中科院宁波材料所

二维滑移铁电材料由于存在堆叠自由度，提供了一种通过层间滑动操纵极化的新途径。近些年，一些研究小组在实验中观察到 WTe_2 , h-BN, $3R-MoS_2$ 等范德华材料的滑移铁电形。与传统铁电材料类似，滑移铁电的极化翻转依靠畴壁的移动，因此对滑移铁电畴壁进行研究对于理解其极化翻转动力学至关重要。然而由于滑移铁电畴壁特征宽度较大，使用常规的第一性原理密度泛函理论 (DFT) 计算无法对其进行研究。这里，我们利用 DFT 计算结果作为训练集，开发了双层 h-BN 和 $3R-MoS_2$ 的深度学习势场模型。利用深度势场，我们系统地揭示了滑移铁电畴壁能量、原子结构及其动力学性质。我们发现，滑移铁电畴壁在电场下具有超快的移动速率 (千米/秒)，同时几乎不会被缺陷所钉扎。这使得滑移铁电具有独特的动力学特性，如皮秒级别的超快翻转速率和优异的抗疲劳特性。此外我们还提出通过弯曲诱导的层间滑移来翻转滑移铁电的面外极化的策略。这些特性使滑移铁电材料成为制备下一代功能器件的有力竞争者。

D02-38

氧化铪基铁电薄膜中铁电畴与畴壁动力学的相场模拟

彭仁赐*

西安电子科技大学

HfO_2 基铁电体由于其具有良好的 CMOS 兼容性和纳米尺度上稳定的铁电性，为下一代非易失性铁电存储器件提供了应用前景。然而，从根本上理解 HfO_2 基铁电极化翻转和畴壁动力学的机制具有挑战性，因

为其独特本征结构-隔离层在畴尺度上的作用仍不清楚。在这里，我们利用相场模拟实现了外延 $\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$ 薄膜时间分辨的纳米尺度铁电畴动力学可视化。我们表明了无尺度畴独立翻转特性和尖锐的畴壁，这些起源于相邻畴之间弱的相互作用，这种相互作用能通过梯度能系数来量化，这揭示了隔离层在铁电畴动力学中的介观机制。同时，揭示了 180° 极化翻转机制以新畴的形核为主导，且具有高的形核密度，这与形核受限翻转模型一致。该研究不仅提供了隔离层在畴动力学中的介观机制，而且进一步推动铁电畴态的精细调控以设计高密度、高速 HfO_2 基薄膜铁电存储器方面的研究。

研究工作最近发表于:

1. Peng R-C, Wen S, Cheng X, et al. *Advanced Functional Materials*, 34(40): 2403864 (2024).
2. Yang, J, Liao J, Huang J, Peng R-C, et al. *Applied Physics Letters*, 125, 142901 (2024).
3. Jia S, Liao J, Yang Q, Peng R-C, et al. *Advanced Functional Materials*, 2501470 (2025).

D02-39

原子尺度相场模拟设计铁电材料

黄厚兵*

北京理工大学

伴随着电子元器件的小型化，对芯片等电子元器件的高效制冷也成为领域内重大需求。铁电材料在电、力、热等外场下发生相变，相变可用于在高效固态制冷器件，因此铁电材料在电子元器件领域展现出巨大应用前景。铁电材料的性能由铁电畴形貌决定，铁电畴形貌受到电-力-热等多场交叉调控。因此，揭示多场下畴形貌演化规律是提升其性能的关键。精准设计、开发高性能铁电材料需要对多场耦合作用下铁电畴形貌演化进行解耦，但由于这一过程是瞬态动力学过程，为解耦耦合作用带来了极大的科学挑战。围绕此问题，本报告主要介绍如下研究进展：针对低电场下熵变低的应用瓶颈，搭建原子尺度相场模型，提出电场诱导结晶相变提升熵变设计思路，实现低电场下熵变的 4 倍提升；相场理论指导实验，制备出纳米岛实现拓扑铁电畴逻辑器件，为低功耗、高密度存算一体化器件提供设计思路。

D02-40

基于交错磁序的磁电耦合机制研究

逯学曾

东南大学

多铁材料是一类具有两种及以上铁性的功能材料，其中铁性包括铁电性、铁磁性或反铁磁性以及铁弹性。多铁材料在记忆存储设备中有着广阔的应用前景，是凝聚态物理方向非常重要的研究对象。尤其是发掘室温的、强磁电耦合的多铁材料一直是多铁领域重要的研究方向，也是难点问题之一。目前已知的室温多铁材料铁酸铋中的磁电耦合性是通过铁电和磁畴之间的耦合实现的，但具备此种铁电和磁畴耦合方式的材料都是铁酸铋结构的衍生。在我们的工作中，基于交错磁性的特性，首先澄清了自旋轨道耦合情形下自旋群操作存在的必然性，并提出了考虑自旋轨道耦合后，普适的铁电和磁性的耦合方式。基于此发现，我们证明了基于交错磁的多铁材料是一类必然具有磁电耦合性的功能材料，并且可以在实空间实现电控磁的反转。工作为进一步探索高温、强磁电耦合材料提供了新途径。

D02-41

变铁性的朗道理论描述

张骏杰*

东南大学

磁性与电极性统称为铁性，是固体材料最基本且关键的物理属性之一，长期以来一直是凝聚态物理领域的重要研究课题。从应用角度看，磁性与电极性的耦合及其交叉调控在构建高速、低功耗、高集成度的

信息器件方面具有重要价值。然而，随着磁电耦合及多铁性材料研究的深入，研究者逐渐发现，由于磁性与电极性在微观机制上的不兼容性与互斥性，多铁性材料在实现理想磁电耦合方面仍面临重大挑战。针对这一问题，理论上提出了一类新型磁电耦合形式——变铁(alterferroicity)，其表现出一种类似“跷跷板”的磁电响应特性^[1]。不同于传统多铁性材料中磁性与电极性的共存特性，变铁性材料中的磁性与电极性虽同属一个体系，但分属不同相，从而在本质上解决了两者互斥的矛盾。在本次报告中，我们将介绍一种基于朗道理论的变铁性模型，该模型能够有效刻画变铁性材料中“跷跷板”式的磁电耦合行为^[2]。此外，该模型在理论框架上实现了对单铁性、多铁性与变铁性三种铁性状态的统一描述。进一步地，我们结合密度泛函理论计算，对 TiGeSe₃ 和 TiSnSe₃ 单层材料中的磁电耦合强度进行了定量分析。基于朗道理论的相图分析表明 TiGeSe₃ 单层有望展现变铁性行为，而 TiSnSe₃ 则不具备该特性。

参考文献

[1] Z. Wang and S. Dong, Alterferroicity with seesawtype magnetoelectricity, P. Natl. Acad. Sci. USA 120, e2305197120 (2023)

[2] J.-J. Zhang, B. I. Yakobson and S. Dong, Landau theory description of autferroicity, Phys. Rev. Lett. (2025) Accepted

D02-42

超晶格中界面相关的晶格动力学以及原子间力常数行为的研究

赵锦柱*

华南师范大学

In this study, we investigate the construction of efficient model potentials for perovskite heterostructures by transferring relevant dynamic quantities from bulk systems and short-period superlattices. Through first-principles calculations, we provide a comprehensive analysis and comparison of the dynamical properties of different perovskite-based superlattice structures, including (PbTiO₃)_n/(SrTiO₃)_m superlattices, (ATiO₃)_n/(AO)₂ superlattices, and A_{n+1}Ti_nO_{3n+1} Ruddlesden-Popper phases, where A can be Sr, Ba, or Pb. We demonstrate that as the thickness of these structures increases, the dynamical properties of the perovskite blocks converge rapidly towards their bulk counterparts. We discuss this convergence in terms of phonon density of states in reciprocal space and inter-atomic force constants in real space. Our findings suggest a straightforward strategy for developing transferable model potentials that accurately capture the dynamics of layered oxide compounds with progressively thicker layers.

D02-43

堆叠双层交错磁体中的铁谷物理

李运琴, 童文旖, 段纯刚*

华东师范大学

交错磁体是近年来发现的一类新型磁性材料，其独特的补偿磁序和非相对论性自旋分裂特性引发了广泛研究兴趣。尽管应变工程被认为是在这些材料中实现谷极化的有效途径，但实验上要通过应变精确调控谷极化仍然是一个巨大的挑战。尽管应变工程理论上可用于调控此类材料的谷极化，但其实际精确操控仍面临巨大挑战。本研究创新性地提出层间滑移策略，结合紧束缚模型与第一性原理计算，成功实现了交错磁体中谷极化的高效诱导与精准调控。以 Fe₂MX₄ (M = Mo, W; X = S, Se, Te) 体系为例，我们发现层间滑移可诱导出铁谷态，并伴随一系列新颖物理效应，包括独立于自旋轨道耦合无关的线性光学二色性和反常谷霍尔效应。这些发现不仅揭示了自旋、谷、层间耦合与光学自由度之间的强关联性，更凸显了交错磁体

在自旋电子学、谷电子学及多功能器件集成中的巨大应用潜力。

D02-44

室温二维多铁异质结的非易失电场调控

李桃*

西安交通大学

多铁异质结由不同铁电性、铁磁性或反铁磁性材料构成，通过界面耦合实现多种序参量的协同调控，实现磁性电场调控的性质，为开发低功耗、非易失性的自旋电子器件提供了关键物理基础和材料平台。尽管近年来二维范德华（vdW）磁性和铁电材料的研究取得了重要进展，但在 vdW 多铁异质结构中，在室温下实现可靠、非易失的磁性电控仍是一项重大挑战。针对以上问题，我们制备了 $\text{Fe}_3\text{GaTe}_2/\text{CuInP}_2\text{S}_6$ 二维多铁异质结构，于常温环境下实现了稳定、可重复且非易失的铁磁性电控。该调控现象在宏观上表现为反常霍尔电压测量中磁滞回线的显著变化，在微观上则通过磁力显微镜捕捉到磁畴在电场与磁场共同作用下的原位演化过程。第一性原理计算表明 CuInP_2S_6 的极化显著调控了 Fe_3GaTe_2 中的 Dzyaloshinskii–Moriya 相互作用（DMI）。将该效应纳入微磁模拟后，成功复现了实验中观察到的磁滞行为关键特征，表明极化增强的 DMI 降低了磁畴壁形成能，并驱动磁化由协同翻转向非协同翻转行为转变。该工作不仅实现了在 vdW 体系中利用剩余铁电极化实现室温铁磁性电调控的技术瓶颈，也为高效率的斯格明子操控及 vdW 自旋电子器件的设计开辟了新路径。

D02-45

二维室温低对称性磁体

张洪瑞

宁波材料所

D02-46

二维铁电材料与晶体管器件

袁硕果*

中国地质大学（武汉）

二维铁电材料由于具有超薄厚度、无悬挂键、与半导体器件兼容性好等优点，为后摩尔时代铁电存储器件应用提供了重要途径。我们通过相转变获得了非对称中心结构且能产生自发极化的铁电相，揭示了二维材料铁电性产生的物理机制。采用铁电极化调控的垂直异质结器件，利用铁电材料的极化翻转可以调节势垒高度，获得了高性能的石墨烯/铁电晶体管器件特性。发展一种范德华转移的方法，可以构筑高质量的界面，实现了高迁移率的铁电半导体场效应晶体管器件。这些研究将促进后摩尔时代铁电存储器件的发展和应用。

D02-47

二维莫尔铁电中的边缘铁电性

关赵¹，魏鹿奇¹，范文成¹，曹伟²，万能³，童文旖¹，陈斌斌¹，向平华¹，段纯刚¹，钟妮*¹

1. East China Normal University

2. Nanjing Tech University

3. Southeast University

二维铁电材料因其原子级厚度和独特的铁电极化特性，在微型化电子器件、低功耗存储及柔性电子领域展现出重要应用潜力。相较于传统三维铁电体，二维铁电体系可避免界面退极化效应，同时兼容现代半导体工艺，为高密度集成提供了新途径。近年来，二维莫尔铁电材料通过范德瓦尔斯堆叠形成的超晶格结

构，成功在非极性材料体系中诱导出极化矢量，这不仅突破了三维铁电的尺寸效应，还打破了二维材料空间点群限制。二维莫尔铁电具有极强的边缘铁电性，即与铁电畴相比，铁电畴边界具有更奇异的物理特性，如拓扑等。莫尔周期与扭转角度和外场等的关联性为铁电畴结构的动态设计提供了自由度。通过施加面内外应力/应变，可有效调控莫尔超晶格的晶格对称性与层间耦合强度，从而改变铁电极化强度、翻转势垒及畴壁动力学特性。这不仅为实现高密低耗存储提供了优质平台，也为进一步深入理解莫尔铁电动力学提供了新的操控模式。

D02-48

自支撑铁电单晶薄膜的力学特性与物性调控研究

董国华

西安交通大学

D02-49

二维铁性材料的制备与性能研究

姜琦涛，薛武红，许小红*

山西师范大学

以电子自旋为主要信息载体的自旋电子器件具有体积小、速度快、功耗低等优势，是后摩尔时代信息存储器件的有力竞争者。特别是，二维磁性材料的发现为构建新功能的磁电子器件提供了材料基础。二维磁性材料在原子层厚度依然保持长程磁序，具有表面无悬挂键、弱层间耦合、可进行“原子乐高”功能异质集成、易于调控等优势，在高密度磁信息存储和自旋电子学领域具有重要应用前景，成为国际上的前沿热点。然而，二维磁性材料目前存在居里温度较低、环境不稳定、难以大尺寸可控制备等困难，极大地限制了其应用和发展。因此，探索稳定性更好的新型二维磁性材料，并用简便、经济可控的方法实现其大尺寸超薄制备，对于推动二维磁性材料的应用具有重要的意义与价值。此外，磁性二维材料的磁畴及其演变能够为相关器件的性能优化提供重要参考。基于此，我们开发了一种简单、经济、可扩展、氢修饰的化学气相沉积方法，可控合成了亚毫米级超薄高质量 Cr_5Te_8 磁性纳米片，值得一提的是，纳米片横向尺寸最大可达 $450\ \mu\text{m}$ 、空气稳定性好且居里温度较高。此外，通过对 Cr_5Te_8 纳米片的磁畴演化的直接观察，揭示了畴壁成核在控制磁化逆转过程中的主导作用。有趣的是， Cr_5Te_8 纳米片表现出非单调磁电阻特性。该工作在 CVD 法制备大尺寸二维磁性材料领域实现了重要突破，为在二维尺度理解和调控磁相关性质提供了理想平台。有望推动二维磁性材料在自旋电子学器件中的应用和发展。

D02-50

低维多铁材料磁电耦合机制研究

彭波*

电子科技大学

低维多铁材料因具有“一体多性”和“一体多能”的独特优势，是实现电磁特性智能调控、构建存算一体器件的重要材料和器件载体。针对低维多铁材料磁电“耦合弱、因未明、室温难”等关键科学难题，长期致力于探索新型低维多铁材料，开展低维多铁材料磁电耦合机理研究。近 5 年，取得系列研究成果：揭示了一种新型单相低维多铁碘化镍材料，阐明了三层碘化镍中磁性、铁电性和反铁电性“一体三性”的新现象和新机理，实现了磁序与铁电序强耦合和各向异性磁控电；提出了非线性电容串联机制，发展了微纳时空磁-光-电联合低维多铁测量新技术，实现了弱磁弱电在单层极限下的精准表征；发展了一类碘化铬异质结低维多铁材料，提出了一种“强强联合”倍增机制，实现了零磁场全电压控磁；面向国家重大需求，探索新型电磁辐射智能调控技术的发展方向。

D02-51

NaNbO₃ 铁电相稳定性和性能调控探索

侯莹*, 李泽锟

华东理工大学

NaNbO₃(NN)无铅铁电陶瓷, 具有较高的饱和极化强度(P_m)和压电效应, 在新型环保电子器件设计中备受关注。但其反铁电(AFE)与铁电(FE)相之间的自由能相近, 导致其铁电性不稳定, 同时较低的介电常数(ϵ_r)限制了其实际应用。本工作通过在 NN 陶瓷中引入 1 wt% 助烧剂(Bi₂O₃、CuO、MnO₂), 系统研究了其微观结构、介电以及铁电性能。结果表明, 助烧剂不仅能降低烧结温度、调控晶粒生长, 更可显著改善电学性能。其中, CuO 的引入导致铁电出现硬化效应, 而 MnO₂ 的引入则导致铁电出现软化效应。特别值得注意的是, 添加 1 wt%MnO₂ 的 NN 陶瓷展现出突破性的电学性能提升, 其铁电相激发电场(E_f)从纯 NN 的 120 kV/cm(120°C)降至 60 kV/cm, 实现了铁电相的稳定; ϵ_r 从 1982 提升至 5855(增幅 182%), P_m 从 22.4 $\mu\text{C}/\text{cm}^2$ 提升至 84.6 $\mu\text{C}/\text{cm}^2$ (增幅 282%), 这些性能指标均显著优于已报道的 NN 基陶瓷体系(早期研究中 NN 基材料的 ϵ_r 和 P_m 分别普遍小于 2000 和 40 $\mu\text{C}/\text{cm}^2$ 且 E_f 高于 90 kV/cm)。总之, 通过简单的固相法和微量助烧剂的添加, 将 NN 的最大极化值提升近 4 倍, 介电常数提高近 3 倍, 并实现铁电相稳定, 为后续 NN 基材料在高性能压电光催化、高密度能量存储器件、红外探测器和非线性光学器件等领域的应用提供了更为坚实的基础。

D02-52

基于多铁性磁电耦合实现拓扑物态的电场调控

张俊廷*, 谢禹

中国矿业大学

多铁性材料中可能存在的磁电耦合效应为实现磁电交叉调控提供了基础。多铁性与拓扑的结合不仅可能产生新奇拓扑物理现象, 而且有望实现对拓扑物态的电场调控。实空间拓扑结构磁斯格明子, 有望应用于新型磁存储器件。然而, 目前调控斯格明子所需的电流密度较大, 导致器件能耗较高。通过电场代替电流控制磁斯格明子, 可以大幅降低能耗。拓扑绝缘体材料由于其表现出的拓扑量子行为在无耗散的拓扑电子学和拓扑量子计算等领域具有重要的应用前景, 而实现电场对拓扑电子态的调控是其迈向器件应用的关键。我们将发现的多铁性磁电耦合效应与拓扑物态相结合, 以实现磁斯格明子及磁性拓扑电子态的电场调控。

D02-53

铁磁金属的铁弹控制

彭威*

University of Warwick

湖南大学

晶体常具有复杂的结构畴, 目前尚缺乏一种通用的方法来消除或可控地操纵这种局部异质性。由此产生的晶体取向不均一性会干扰我们对材料性质的理解, 并可能降低相关应用的可靠性与性能。在本研究中, 我们利用原子力显微镜探针施加的剪切应力, 在氧化物薄膜中实现了晶体取向的铁弹性写入。这种可控且可逆的方法被应用于 SrRuO₃ 和 (La_{0.7}Sr_{0.3})(Mn_{0.9}Ru_{0.1})O₃ 薄膜中, 我们实现了无孪晶的单晶结构, 并在纳米尺度上设计了特定的晶体取向畴结构。此外, 通过磁弹耦合, 我们可以使用这种方法机械性地操控局部的磁各向异性, 从而写入和抹除常规方法无法实现的功能性纳米尺度磁织构 (~20 nm)。因此, 纯机械力成为一种按需操控结构异质性的手段, 并有望实现电子和自旋电子功能的可编程调控。

D02-54

层状氮化物钙钛矿中铁电性质的第一性原理研究

唐刚*

北京理工大学

近年来, $A_3B_2X_7$ 型层状氧化物钙钛矿因其新奇的负热膨胀和杂化非本征铁电等物理特性受到了广泛关注。这些新特性的出现, 通常源于层状氧化物钙钛矿中八面体旋转、界面 rumpling 及铁电极化等多种晶格畸变之间的竞争与耦合。近期, 实验通过高压方法成功合成了三种单层 Ruddlesden-Popper (RP) 相层状氮化物钙钛矿, 为研究层状钙钛矿中不同类型晶格畸变的竞争机制提供了新的材料平台。在本工作中, 我们采用第一性原理计算, 系统研究了 A_2BN_4 ($A=La/Y$, $B=W/Mo$) 和 $La_3W_2N_7$ 两类 RP 相层状氮化物钙钛矿中八面体旋转、界面 rumpling 与铁电极化等晶格畸变之间的竞争与耦合关系。计算结果表明, 这两类层状氮化物钙钛矿展现出有别于 RP 相层状氧化物钙钛矿的铁电特性: 1) A_2BN_4 ($A=La/Y$, $B=W/Mo$) 体系在基态下呈现非中心对称的极化相, 并且界面 rumpling 与铁电极化模式之间表现为协同促进的关系; 2) $La_3W_2N_7$ 体系基态为中心对称结构, 反铁电畸变与铁电极化模态的能量极为接近。通过 A 位原子的替换, 可以利用界面 rumpling 促进铁电极化的形成, 并在一定程度上抑制反铁电畸变。综上所述, 我们的研究揭示了层状氮化物钙钛矿中以铁电极化和反铁电畸变主导的晶格畸变机制, 与层状氧化物钙钛矿中以八面体旋转为主并表现出杂化非本征铁电机理之间的显著差异。

D02-55

不可约亚铁电中电控自旋轨道耦合效应和圆形光电效应

雷蕴麟*

南方科技大学

具有长程有序磁自旋或电偶极矩的材料一直是凝聚态物理研究的焦点。其中, 具有两个不等价/非共线自旋或电偶极子晶格的亚铁性体系(ferri - systems)有望结合铁性和反铁性体系的特性, 但在单相材料中缺乏实验观测结果。这在亚铁电体系(ferrielectric system)中尤为明显, 因为电偶极子通常可以被重新定义, 从而将两个子晶格还原为一个, 使其与铁电体系难以区分。这引发了人们对于亚铁电性是否可以被视为一类独立的铁性序的质疑。在此, 我们报道了一种杂化材料(MV)[SbBr₃] (MV^{2+} : 甲基紫精阳离子)中真正亚铁电行为的观测结果。在该单晶中, 在小电场下发生净极化的翻转, 在较大电场下有机部分亚晶格和无机部分亚晶格的电偶极子发生异步翻转, 因此不能通过重新定义晶胞将其简化为铁电体系, 并由此产生铁电+两个反铁电滞回线的组合形式。此外, 复杂的偶极构型赋予了该体系对圆偏振光的敏感性。电场可以将基态亚铁电极性相转变为另一个铁电态极性相, 这个过程极大的增加了极化强度, 并显著增强了自旋轨道耦合效应, 从而调节旋度依赖的光电流的大小。本研究为真正不可约亚铁电性(一类新型极性体系)的研究开辟了新范式, 并为通过电场调控自旋轨道耦合效应和圆偏振光电效应提供了一种有效途径。

D02-56

RuO₂ 非常规磁性理论研究

钱庄, 杨雨迪, 刘仕, 吴从军*

西湖大学

本工作针对 RuO_2 中交错磁性的不同实验结果间相互矛盾这一核心科学问题展开研究。尽管 RuO_2 被理论预测为典型的 d 波交错磁体, 但实验观测存在显著冲突: 部分研究报道了反常霍尔效应与自旋极化电流等交替磁性特征, 而另一些实验(如 μ SR 谱、中子衍射和角分辨光电子能谱)却未能检测到足够强的磁矩或自旋劈裂。通过第一性原理计算与理论分析, 我们揭示了矛盾的根源: RuO_2 的交错磁性是电子关联效应诱导的量子相变临界现象, 其矛盾观测源于体系对相互作用强度 (U/t)、掺杂和应变的极端敏感性。本工作不仅深化了对 RuO_2 交错磁性起源与调控机制的理解, 指出交错磁性和偶数分波下非常规磁性的共线版本属于同一对称类, 更为探索量子相变及非常规磁性的广阔物理图景提供了理想平台。

D02-57

基于晶体对称性调控多铁氧化物中的各向异性磁振子输运

邱小芙, 易迪*

清华大学材料学院

磁振子自旋电流可以在磁有序的绝缘体中传输, 而不会产生显著的热耗散, 这使其在来自旋电子器件中具有巨大潜力。近年来, 人们希望通过电场调控磁振子, 因而铁酸铋这一铁电序与反铁磁序耦合的典型多铁材料的磁振子输运受到广泛关注。为此, 厘清在异质结中影响铁酸铋垂直磁振子输运的关键机制至关重要, 然而这方面的理解仍然十分有限。在本工作中, 我们报道了通过晶体对称性调控铁酸铋基异质结中垂直磁振子输运的研究。单畴的菱方相铁酸铋具有自旋摆线结构, 其磁振子输运各向异性较弱; 相比之下, 镧掺杂的正交相铁酸铋表现出明显的单轴磁振子输运各向异性, 仅当磁振子的自旋极化方向与奈尔矢量一致时, 才能有效传输。此外, 厚度依赖实验结果表明, 镧掺杂会加快磁振子传输的衰减。我们的研究为实现电场调控的磁振子输运提供了新路径, 为高效磁电自旋轨道耦合器件的发展奠定了基础。

墙报

D02-P01

Y-Mn 元素掺杂 BiFeO₃ 的结构、热稳定性、可见光吸收性质、强铁电性以及磁电耦合效应

唐平*, 徐祎琳, 邱学林, 余健, 许欢, 吴俊青, 王洋, 宋国城

九江学院

采用溶胶-凝胶法制备了稀土元素钇 (Y) 和过渡金属元素锰 (Mn) 掺杂的铁酸铋纳米晶 ($\text{Bi}_{1-x}\text{Y}_x\text{Fe}_{1-y}\text{Mn}_y\text{O}_3$, $x=0, 0.05, 0.10, 0.15$; $y=0, 0.10$), 然后以纳米晶为陶瓷粉体原料, 通过固相烧结合淬工艺制备了各相应组分的陶瓷块体材料。Y-Mn 共掺杂 BiFeO₃ 具有较好的结构稳定性, 以及在 25°C~400°C 范围内具有很好的热稳定性。Mn 元素掺杂可大大降低 BiFeO₃ 的禁带宽度, 因此 Mn 掺杂 BiFeO₃ 或 Y-Mn 共掺杂 BiFeO₃ 具有很好的可见光吸收效应, 有望应用于可见光催化领域。室温下 $\text{Bi}_{0.95}\text{Y}_{0.05}\text{FeO}_3$ (BFO-5Y), $\text{Bi}_{0.95}\text{Y}_{0.05}\text{Fe}_{0.9}\text{Mn}_{0.1}\text{O}_3$ (BFMO-5Y), $\text{Bi}_{0.9}\text{Y}_{0.1}\text{FeO}_3$ (BFO-10Y), $\text{Bi}_{0.9}\text{Y}_{0.1}\text{Fe}_{0.9}\text{Mn}_{0.1}\text{O}_3$ (BFMO-10Y) 呈现明显的磁滞回线, 表明其室温下的铁磁有序性。Y-Mn 共掺杂 BiFeO₃ 陶瓷的铁电极化强度远远超过纯 BiFeO₃ 以及 Y 或 Mn 单掺杂 BiFeO₃ 陶瓷。例如 BFMO-5Y 的最大极化强度分别为 BiFeO₃ (BFO)、BiFe_{0.9}Mn_{0.1}O₃ (BFMO) 和 BFO-5Y 的 21.5 倍、16.0 倍和 83.1 倍。低温下 (10 K) 各样品表现出较强的磁电耦合效应, 约为室温下的 30 倍, 且电极化强度 P 随外加磁场强度 H 的变化呈现类似于磁滞回线状的变化关系。室温下各样品的磁电耦合效应较弱, P - H 呈线性相关。以上研究表明 Y-Mn 共掺杂在提升 BFO 多铁性方面具有出色的协同作用, 为开发先进的磁电器件和节能光催化材料提供了新的途径。

D02-P02

AlScN 极化翻转机制的机器学习模拟

郑翔宇*, 谢禹

吉林大学物理学院

$\text{Al}_{1-x}\text{Sc}_x\text{N}$ 作为 III 族氮化物中的铁电材料, 兼具高可切换极化、高矫顽场和宽禁带等优异特性。且该材料具备良好的 CMOS 工艺兼容性, 并且天然适配 III 族氮化物器件平台, 有望成为下一代非易失性存储器。然而, 受限于密度泛函理论 (DFT) 的模拟尺寸和实验表征的分辨率限制, 其微观翻转机制尚未明晰。本研究借助机器学习势, 进行万原子级 $\text{Al}_{0.75}\text{Sc}_{0.25}\text{N}$ 体系的极化翻转动力学模拟, 系统揭示热力学系综和

电场强度对翻转机制的调控规律。

D02-P03

拓扑双叶黎曼面型逆磁电性

周颖, 董帅*

东南大学

在固体中, 电场对磁性的有效控制, 即逆磁电效应, 对于应用来说是非常理想的, 但在原则上却具有挑战性, 因为它们具有不同的对称性规则。这里揭示了一种基于自旋依赖轨道杂化的奇异逆磁电效应, 可以被表述为双叶黎曼曲面。受到 1:2 绕组比率的保护, 通过旋转电场周期 (或一系列交流电脉冲) 可以精确实现 180° 自旋反转, 从而实现一个稳健且无耗散的逆磁电功能。除此之外, 实现这种双叶黎曼曲面磁电效应的一般条件也将被阐明, 同时也会提出这一类别的更多候选材料。

D02-P04

铁电 Bi_6O_9 中可调的自旋织构

黄俐祺, 邵定夫*, 李明

中国科学院合肥物质科学研究院固体物理研究所

具有强自旋轨道耦合 (SOC) 的铁电材料中存在动量依赖的自旋极化, 可以通过铁电转换进行控制, 有望在自旋电子学中的非易失性应用中得到应用。我们研究了正交晶系 Bi_6O_9 中 SOC 诱导的自旋织构, 这是一种最近实验上发现的铁电材料, 其在原子级厚度下有稳定的铁电极化强度。利用第一性原理计算, 我们揭示了 SOC 诱导的 Γ 点周围的能带劈裂和显著的自旋结构, 这可以用 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 哈密顿量很好地描述, 该哈密顿量在导带最小值处具有相当大的 Rashba 参数 $\lambda_R=0.65 \text{ eV} \cdot \text{\AA}$ 和 Dresselhaus 参数 $\lambda_D=-0.23 \text{ eV} \cdot \text{\AA}$ 。我们还发现, SOC 参数可以通过应变有效地调节, 这是由能带劈裂和能带反交叉共同引起的, 并得到了衬底和应变相关计算的支持。高度可调的自旋织构表明, Bi_6O_9 有机会用于自旋电子学中的非易失性电荷自旋转换。

D02-P05

Investigating the Interface-Driven Lattice Distortion in Wurtzite Ferroelectrics

Yifan Wang, Tianjiao Xin, Yiwei Wang, Yong Zhu, Yonghui Zheng, Jing Yang, Yan Cheng*

East China Normal University

Wurtzite-type ferroelectrics and fluorite-type ferroelectrics represent two emerging research focuses in the field of ferroelectric materials. The most significant distinction between them is that wurtzite-type films are intrinsic ferroelectrics, whereas the fluorite polar phase lacks thermodynamic stability. Consequently, wurtzite ferroelectrics, such as AlScN, are considered highly promising candidates for next-generation non-volatile memory applications. Nevertheless, the coercive field being excessively close to the breakdown field poses a substantial challenge to enhancing the endurance and reliability of electronic devices based on wurtzite ferroelectric films. For ferroelectrics, the minimum energy required for polarization alters the potential energy surface along the ion displacement path, directly affects the height of the energy barrier associated with polarization switching. Here, AlScN films were fabricated using the magnetron sputtering technique. The impact of different interfaces on the lattice constant of AlScN ferroelectrics was systematically investigated, and the interfacial-driven lattice distortion in wurtzite ferroelectrics was explored in detail. Further, atomic-resolution characterization by Cs-corrected scanning transmission electron microscopy enabled a precise analysis of lattice distortion across the interface. A spatial transition in the lattice was clearly observed, indicating an interface-driven modulation of the local polarization landscape.

D02-P06

杂化亚铁电材料的性质研究及应用探索

雷蕴麟*

南方科技大学

具有长程有序磁自旋或电偶极矩的材料一直是凝聚态物理研究的焦点。然而相比于磁性体系中的亚铁磁体系，亚铁电的研究很少报道。为数不多的亚铁电研究主要集中在多相体系和单相体系中极化翻转和铁电体系没有区别的可约亚铁电中，暂没有发现极化翻转和铁电有区别的亚铁电材料，即真正亚铁电(不可约亚铁电)性。我们在(MV)[SbX₅] (MV²⁺:甲基紫精阳离子, X:I, Br)杂化材料体系探究了真正亚铁电行为。这些材料的共同特点是在电场下能够改变材料的结构或者对称性，从而结合了铁电和反铁电的电滞回线特征。这种电场下从基态极性相转变为另一种极性相的特征也使得电场可以调控材料的自旋轨道耦合效应，同时使得旋度依赖光电流的大小也能被电场调控。这一发现为真正不可约亚铁电性(一类新型极性体系)的研究开辟了新范式，并为通过电场调控自旋轨道耦合效应和圆偏振光电效应提供了一种有效途径。

D02-P07

二维范德瓦尔斯异质结中拓扑态的非易失性铁电调控

张泽毓¹, 黄河¹, 王守国*²

1. 北京科技大学

2. 安徽大学

多铁性材料可以在纳米尺度实现铁谷及能带拓扑性质的铁电调控，这在下一代磁电与自旋电子器件技术中展现出重大应用潜力。目前对铁谷-拓扑性质的研究主要集中于如何在铁谷材料中诱导出非平庸的拓扑态，然而对于拓扑态如何进一步应用于器件却没有深入的研究。与此同时，在具有垂直磁各向异性的纳米体系中实现铁谷-拓扑的铁电调控的研究是也仍属空白。基于此，本研究提出一类由铁磁层、铁谷层和铁电层构成的范德瓦尔斯多铁异质结构，其拓扑态可随铁电极化方向发生可逆转变。

以 In₂Se₃/RuClBr/CrI₃ 异质结构为例，我们通过第一性原理计算揭示了体系垂直磁各向异性及铁电极化调控下的能带拓扑转变机制：当铁电极化向下时，体系呈现 III 型能带排列并表现出金属特性；而当极化方向反转向向上时，则转变为 I 型能带排列并伴随量子反常霍尔效应的产生。通过铁电极化方向的可逆调控，该异质结构可在常规金属态与非易失拓扑绝缘体态之间实现动态切换。除此之外，本研究分别通过 k p 模型和二阶微扰理论详细的解释了拓扑态出现和体系易磁化轴改变的原因。本研究不仅为多铁异质结构调控拓扑态提供了新范式，更通过铁电-谷电子-拓扑态的协同调控，为开发多功能自旋电子器件开辟了新维度，在铁电存储、谷电子学与拓扑量子计算等领域具有重要应用前景^[1]。

[1]Z. Zhang, H. Huang, Y. Zhao, L. Wang, C. Liu, S. Zhou, Y. Wu, J. Zhao, G. Qiao, J. Zhang, X. Zheng, and S. Wang, ACS Nano 19, 18976 (2025).

D02-P08

利用 ZrO₂ 中间层构筑具有优异铁电性能的 HZO/ ZrO₂ 超晶格结构

张亚静, 王凌飞*

中国科学技术大学

氧化铪(HfO₂)基铁电存储器由于与 CMOS 工艺完全兼容、超强尺寸微缩及低功耗等特性，已成为未来最具市场竞争力的新型存储器之一。然而，HfO₂ 基铁电薄膜长期面临着唤醒效应、易疲劳甚至击穿以及铁电性随厚度的增加而变差等挑战。为了应对上述挑战，使用 PLD 方法在 STO(110)衬底上制备了多组具有 LSMO 覆盖层和 LSMO 缓冲层的 HZO/ ZrO₂ 超晶格样品，探究具有 ZrO₂ 中间层的结构相对于纯 HZO 结构

是否具有更优异的铁电性能及良好的耐久性。

D02-P09

弛豫铁电单晶 PMN-PT 中多尺度调控与介电弹性响应机制

韩娟, 帅文君, 黄夏敏, 庄鑫*

中国科学院空天信息创新研究院

钙钛矿(ABO_3)弛豫铁电单晶(如 PMN-PT)由于其卓越的压电性能在传感器与能量转换器件等领域占有重要地位,其压电性能的增强与结构相变具有很强的内在关联。现有理论聚焦于极化旋转、相界软化及微纳尺度区域的相互作用,但对于原子尺度的电子结构如何驱动晶体的宏观性能的演变尚不明确。本研究通过第一性原理计算以及对介电和弹性性能表征,讨论了 A 位 Pb(II)中孤对电子效应与 B 位 Nb(V)中“d⁰特性”(空 d 轨道)的相互作用对 PMN-PT 多尺度结构与性能的调控机制。

基于密度泛函理论计算表明, Pb-O-Nb 基元在基态 PMN-PT 晶体中呈三方畸变, Nb 与赤道氧(O_E)通过 d-p π 键结合,而 Pb 6s-O 2p 反键作用诱导孤对电子呈现稳定的四方相晶格畸变。外场激励下, Nb- O_E 的 π 键断裂, O_E 与 Pb 形成 s-p 杂化的 σ^* 反键态,电子从 Nb(V)向 Pb(II)转移,易于三方-四方相变。Nb 中的“d⁰特性”抑制了 d-p 杂化轨道电子的填充,使 Pb-O 键的稳定成为可能,而 Pb 6s 与 O 2p 能级相近性强化了孤对电子对局部结构的稳定作用,形成混合纳米区域结构。

我们测量了准同型相界组份附近的(001)-Mn:PMN-PT 单晶的介电与弹性性能随温度变化曲线。实验数据显示,室温极化与外场冷却极化两种条件下处理的样品,在三方相温区(小于 90 °C),谐振频率随温度升高而下降,对应 B-O 键弹性常数的软化。室温极化样品在到达三方-四方相变温度(90 °C)时机械谐振频率突然增加,形成“天鹅头”样曲线,而外场冷却极化样品因高温极化所导致的<001>方向的择优取向,呈现“海鸥头”特征,反映两种情况下 Pb-O 键弹性常数的差异。介电常数在外场极化样品中呈现较宽的相变区间(90 °C-98 °C),这可以归因于 Nb-O d-p π 键对系统总体能量的稳定作用。机电耦合系数的平方(k^2)与介电品质因数($\tan^{-1}\delta$)的乘积(优值, $k^2 \times \tan^{-1}\delta$)显示,室温极化样品在四方相区的优值高于场极化样品,这也印证了孤对电子效应与“d⁰特性”协同作用所导致的结构软化对压电性能的优化机制。本研究通过将理论计算与宏观性能关联,阐明了局域电子结构竞争如何通过化学键的重构与微纳区域结构演变影响介电与弹性响应,为高性能铁电材料、器件的设计提供一些思路。

D02-P10

弛豫铁电单晶 PMN-PT 中局域相互作用与混合价态分布

帅文君, 黄夏敏, 韩娟, 庄鑫*

中国科学院空天信息创新研究院

钙钛矿(ABO_3)弛豫铁电单晶(如 PMN-PT)凭借优异的压电性能在传感器、换能器等功能器件领域备受关注,但对于原子尺度的局域相互作用如何驱动宏观压电性能的增强仍缺乏统一的认识。过往研究聚焦于极化旋转、相界软化及微纳区域相互作用等理论,但局域机制与宏观性能的关联仍不明确。本研究以 A 位 Pb(II)孤对电子效应与 B 位 Nb(V)“d⁰特性”间的竞争协同作用为切入点,结合第一性原理计算、X 射线光电子能谱表征等手段,尝试揭示 PMN-PT 晶体中局域相互作用与混合价态分布。

基于密度泛函理论的第一性原理计算表明,在基态 PMN-PT 中, Pb-O-Nb 基元呈现三方相畸变, Nb 与赤道氧(O_E)通过 d-p π 键结合。在外场激励下, Nb- O_E 的 π 键断裂, O_E 转而与 Pb 形成稳定的 6s-2p 杂化的 s^* 反键态。Nb(V)的“d⁰特性”使其空 d 轨道无法通过 d-p 杂化方式填充电子,进而促使 Pb-O 键的重构,电子从 Nb(V)转移至 Pb(II),导致局域三方-四方相变驱动的极化方向大幅改变。同时, Pb 6s 能级与 O 2p 能级相近,这有利于更多 s 成分参与形成 s^* 反键轨道,进而通过 sp 杂化作用,稳定由孤对电子效应诱导的局域畸变。

通过对 PMN-PT 晶体不同深度进行 XPS 表征, 我们发现从表面到内部区域存在 Pb、Nb 的混合价态。Pb 4f 谱线显示其价态从表面到内部逐渐降低, 从 Nb 3d 谱线变化中也观测到 Nb (IV)特征峰随深度增加而增强。结合第一性原理计算结果, Nb-O 间较强的 d-p p 键能够稳定 Pb (II)氧化态, 减少了从 O 离子到 Pb 离子的电荷转移, 削弱了 Pb 6s-O 2p-Pb 6p 立体化学孤对效应; 而内部区域孤对效应驱动的价态变化更为显著, 可能源于表面吸附氧的减少及缺陷密度的降低所引发的配位环境的改变, 这与计算得到的局域结构演变中孤对电子效应与“d⁰特性”的协同作用机制相呼应, 从电子结构层面可以解释元素价态分布差异及其对晶体结构和性能的影响。

D02-P11

MnO₃Cl 中的非共线亚铁电

杨鑫雨, 董帅*

东南大学

共线偶极序的研究(例如铁电性和反铁电性)在最近几十年迅速发展, 而在固体中, 非共线偶极序现象却鲜有涉及。非共线偶极序为实现亚铁电性提供了一条途径。基于第一性原理计算, 本研究证明了无机分子晶体 MnO₃Cl 具有内禀的非共线亚铁电性, 这源于极性分子的立体取向。还预测了较大的负压电效应 (d₃₃ ~ -27 pC/N)。该分子晶体在紫外光窗口中展现出强光吸收和适度的光学各向异性。此外, 通过氢插层实现电子掺杂, 可以获得铁磁极性半金属。这项研究为深入探索非共线亚铁电性这一重要的物理现象及其在功能器件中的潜在应用提供了一个理想的材料研究平台。

D02-P12

滑移铁电的极化翻转: 扰动与畴壁的关键作用

王子文, 董帅*

东南大学物理学院

近来, 滑移铁电体因为低能垒和抗疲劳等优点广受关注。针对其非常规的翻转机制, 垂直方向的外电场如何驱动原子沿着水平方向移动? 这方面的研究依然较少。本文中, 我们以双层的 h-BN 为例, 采用第一性原理计算研究了它的翻转动力学。我们发现, 波恩有效电荷的非对角元导致了这种垂直滑移关系。有趣的是, 在滑移铁电体中, 矫顽场的行为在滑移过程中不同于传统的钙钛矿铁电体, 表现为雪崩式的滑移行为。此外, 能够打破面内晶格三重旋转对称性的微扰涨落在滑移过程中起到非常关键的角色。由于滑移的中间态具有较大的波恩有效电荷非对角元, 我们认为铁电畴壁在运动过程中将表现出蠕动的行为。

D02-P13

快速退火引起面外方向成分梯度诱导无场自旋轨道矩翻转

金文韬, 涂宇辰, 沈胜春*, 殷月伟, 李晓光*

中国科学技术大学

对于磁性存储与逻辑器件的应用, 实现基于自旋轨道力矩 (SOT) 的无辅助场磁化翻转至关重要。本研究展示了一种基于 Pd/PdCo 双层膜, 有良好 CMOS 兼容性的简单方案, 通过室温磁控溅射沉积结合快速热退火 (RTA) 工艺诱导面外方向成分梯度, 实现了电流诱导的无辅助场翻转。后续测试表明翻转行为与衬底取向没有显著关联, 且在 Al₂O₃ 和 Si-SiO₂ 衬底上均能实现, 表明了梯度诱导的 Dzyaloshinskii-Moriya 相互作用 (DMI) 与倾斜垂直磁各向异性 (PMA) 的协同机制。进一步研究发现快速退火工艺在增强 PMA 的同时促进了面外方向成分梯度的形成。该研究为采用工业常见材料和工艺条件实现无外场的电流诱导 SOT 磁化翻转提供了可行策略, 为开发高效率的自旋电子存储与逻辑器件开辟了新路径。