

中国材料大会 2024
暨第二届世界材料大会
CMC 2024 & WMC 2024

July 8-11, 2024
Guangzhou, China

D02-多铁性材料
D02-Multiferroic Materials

Organized by

Chinese Materials Research Society

Website: <https://cmc2024.scimeeting.cn>

D02. 多铁性材料

分会主席：董帅、殷月伟、马静、张金星、刘俊明

D02-01**多铁氧化物中的自旋传输特性及调控**

易迪*

清华大学

以自旋波作为信息处理载体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技术之一。然而，如何实现电场对自旋波传输的有效调控，是发展相应的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。本次报告将重点介绍多铁材料 BiFeO_3 异质结中的自旋传输特性及调控。我们发现 BiFeO_3 可以有有效的传输自旋波，并通过自旋轨道力矩实现对磁性存储层磁矩的确定性翻转；在此基础上，利用电场改变铁电极化方向，可以有效地调控自旋波传输的特性，具备非易失特点。此外，报告还将介绍如何通过设计反铁磁序及自旋源材料提升器件的核心性能。

D02-02**极性磁体 $\text{Fe}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ 中的线性磁电耦合与调控**

陆成亮*

华中科技大学

$\text{Fe}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ 展现出丰富的物理性质，如强磁电耦合、非互易输运、巨大的热 Hall 效应等，是磁电研究领域的新关注点。我们利用脉冲强磁场技术，在 $\text{Fe}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ 中观测到巨大的线性磁电效应。结合第一性原理以及模型计算，揭示了其中自旋交换伸缩、以及磁子格之间不同的磁晶各向异性是产生巨大线性磁电的关键物理因素。在此基础上，我们利用化学掺杂，实现了对 $\text{Fe}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ 中的磁性、磁电耦合等物性的有效调控，其中掺杂离子本身特性以及在材料中的化学占位特征等是关键因素。

D02-03**新型铁基多铁材料设计与磁电调控研究**

刘美风*

湖北师范大学

采用高温固相法合成了准一维混合自旋链 $\text{LiCuFe}_2(\text{VO}_4)_3$ 化合物，系统的研究了它的结构、磁性、比热以及磁电耦合效应。研究结果表明： $\text{LiCuFe}_2(\text{VO}_4)_3$ 具有两个连续的磁相变 $\text{TN}_1 \sim 9.95 \text{ K}$ 和 $\text{TN}_2 \sim 8.17 \text{ K}$ ，在 TN_1 和 TN_2 附近发现了两个符号相反的热释电电流峰施加磁场能够明显调控 TN_1 和 TN_2 两相变区域中间的铁电态，具有显著的磁电耦合效应。

D02-04**Linear magnetoelectric effects in the van der Waals antiferromagnets $\text{A}_5(\text{TeO}_3)_4\text{X}_2$ ($\text{A} = \text{Co}, \text{Ni}$; $\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}$)**Lin Lin^{*1}, Bing Yu², V. Ovidiu Garlea³, Qiang Zhang³, Jiasheng Li¹, Yongsen Tang⁴, Zhibo Yan², Shuai Dong⁵, Jianguo Wan², Junming Liu²

1. Nanjing Forestry University

2. Nanjing University

3. Oak Ridge National Laboratory

4. Nanjing University of Posts and Telecommunications

5. Southeast University

The van der Waals (vdW) layered multiferroics, which host simultaneous ferroelectric and magnetic orders, have attracted attention not only for their potentials to be utilized in nanoelectric devices and spintronics, but also offer alternative opportunities for emergent physical phenomena. To date, the vdW layered multiferroic materials are still very rare. Herein, we report remarkable magnetoelectric (ME) effects in the vdW $A_5(\text{TeO}_3)_4X_2$ ($A = \text{Co}, \text{Ni}$; $X = \text{Cl}, \text{Br}$) single crystals. The neutron-powder diffraction reveals that the noncoplanar antiferromagnetic (AFM) state with preferred Néel vector along the c axis is established below $T_N \sim 18$ K in $\text{Co}_5(\text{TeO}_3)_4\text{Cl}_2$, while $\text{Ni}_5(\text{TeO}_3)_4\text{Br}_2$ shows a noncollinear spin arrangement in the ac plane below $T_N \sim 29$ K. It is found that $\text{Co}_5(\text{TeO}_3)_4\text{Cl}_2$ is one of the best vdW multiferroics studied so far in terms of the multiferroic performance. The measured linear ME coefficient exhibits the emergent oscillation dependence of the angle between magnetic field and electric field, and the maximal value is as big as 45 ps/m. The present study suggests that $A_5(\text{TeO}_3)_4X_2$ is an unusual class of vdW materials hosting linear ME behaviors, and is an appreciated platform for exploring the emergent multiferroicity in vdW layered compounds.

D02-05

Flexoelectricity and piezoelectricity in epitaxial hafnia

Yurong Yang*, Peijie Jiao, Hao Cheng, Di Wu

Nanjing University

HfO_2 -based thin films exhibit robust ferroelectric properties even for nanometric thicknesses, are compatible with current Si technology and thus have great potential for the revival of integrated ferroelectrics. Phase control and reliability are core issues for their applications. Here we show that, the flexoelectric effect in (111)-oriented HfO_2 -based thin films, arising from the strain gradient along the film's normal, induces a rhombohedral distortion in the otherwise Pca21 orthorhombic structure. This rhombohedral distortion greatly improves the fatigue endurance of HfO₂ thin films by further stabilizing the metastable ferroelectric phase against the transition to the thermodynamically stable non-polar monoclinic phase during repetitive cycling.

On the other hand, piezoelectricity of HfO_2 -based thin films have been reported and can be positive or negative. Here, we show that the sign of the longitudinal linear piezoelectric coefficient of HfO_2 -based thin films can be tuned from positive to negative via epitaxial strain. Nonlinear and even parabolic piezoelectric behaviors are further found at tensile epitaxial strain. This parabolic piezoelectric behavior implies that the polarization decreases when increasing the magnitude of either compressive or tensile longitudinal strain, or, equivalently, that the strain increases when increasing the magnitude of electric field being either parallel or antiparallel to the direction of polarization.

D02-06

四方 $\text{Sr}_4\text{Al}_2\text{O}_7$: 一种用于制备高质量自支撑氧化物薄膜的新型水溶性牺牲层材料

王凌飞*

中国科学技术大学

基于过渡金属氧化物的异质界面处自旋、电荷、轨道和晶格自由度的耦合带来了一系列界面衍生物理现象和丰富的功能特性，但薄膜/基底界面上的强共价键在很大程度上限制了它们与其他低维材料系统的集成，从而限制了它们在电子器件应用上的潜力。针对这一短板，近年来，自支撑氧化物膜的剥离和转移技术发展迅速，特别是 2016 年 Hwang 提出的立方 $\text{Sr}_3\text{Al}_2\text{O}_6$ 外延牺牲层的水辅助剥离技术的发现极大地推动了 ABO₃ 钙钛矿氧化物异质结、范德华尔斯材料和硅基半导体的集成研究，在下一代电子/自旋电子

器件方面展现出的巨大潜力。此外，立方 $\text{Sr}_3\text{Al}_2\text{O}_6$ 外延牺牲层还协助发掘了一系列自支撑氧化物薄膜中的新奇物态，包括超弹性、准二维铁电性、极端拉伸应变下的关联电子相、高密度可调极性斯格明子等。

尽管有这些令人兴奋的进展，但相比于典型的范德瓦尔斯材料（如石墨烯和过渡金属硫属化物），自支撑氧化物膜的结晶性和完整性仍有较大差距。特别是对于非铁电氧化物薄膜，水辅助释放过程常常伴随着高密度裂纹的产生。针对这一自支撑氧化物薄膜中的普遍性问题，我们开发了一种水溶性牺牲层材料： $\text{Sr}_4\text{Al}_2\text{O}_7$ 。双轴应变下的 $\text{Sr}_4\text{Al}_2\text{O}_7$ 具有四方结构对称性和与立方 $\text{Sr}_3\text{Al}_2\text{O}_6$ 完全不同的原子结构。 $\text{Sr}_4\text{Al}_2\text{O}_7$ 能够在外延应变下轻松发生晶格畸变，并与 ABO_3 钙钛矿形成强化学键，从而实现高质量 $\text{ABO}_3/\text{Sr}_4\text{Al}_2\text{O}_7$ 外延异质结生长。因此，从 $\text{Sr}_4\text{Al}_2\text{O}_7$ 牺牲层剥离出的自支撑氧化物薄膜的结晶性和完整性显著提高。我们验证了镍酸盐、锰酸盐、钛酸盐、钨酸盐和锡酸盐等一系列钙钛矿氧化物（晶格常数范围 $3.85\sim 4.04\text{ \AA}$ ）的剥离效果，发现从 $\text{Sr}_4\text{Al}_2\text{O}_7$ 上释放的自支撑薄膜的无裂纹区域可以扩展到毫米级，且其功能性可以与外延薄膜相当。此外， $\text{Sr}_4\text{Al}_2\text{O}_7$ 独特的原子结构导致其具有高水溶性，显著缩短了水辅助剥离过程的时间。这些引人注目的优势使 $\text{Sr}_4\text{Al}_2\text{O}_7$ 成为一种应用广泛，性能出色的水溶性牺牲层，可用于制造一系列高质量自支撑氧化物薄膜，为开发新型电子学器件提供了丰富的可能性。

D02-07

面向类脑计算的压电神经元

樊贞*

华南师范大学

受人脑启发的类脑计算具有高度并行、超低功耗等优势，被认为是打破传统计算机局限性、实现新一代人工智能的理想途径之一。类脑计算的硬件实现依赖于人工神经元和人工突触两种器件，其中人工神经元负责信息处理，其重要性不言而喻。然而，目前仍缺乏结构简单且性能优异的人工神经元。本次报告将介绍一种基于逆压电效应的新型压电神经元。它结构简单，仅由压电悬臂梁、并联电容、串联电阻构成。它基于逆压电效应和电容充放电效应协同工作，能够实现完整的泄露-积分-点火 (LIF) 神经元功能。该工作原理也赋予了压电神经元高可靠性，其循环间差异性低至 $\sim 1.9\%$ ，循环次数高达 10^7 。此外，压电神经元的积分/发放时间短至 $\sim 9.6\sim 0.4\text{ }\mu\text{s}$ ，能耗低至 $\sim 13.4\text{ nJ/spike}$ 。上述结果表明压电神经元是一种同时具备结构简单、高可靠性、高速、低能耗等优点的人工神经元。进一步地，我们构建了基于压电神经元的脉冲神经网络，并演示了其模式识别功能。本工作为人工神经元的硬件实现提供了一种新方案，也将助力于高性能类脑计算系统的构建。

D02-08

极性斯格明子的巨大电场诱导二次谐波产生效应

王思旭、李千*

清华大学材料学院

电场诱导的二次谐波发生使得通过电学手段控制非线性光-物质相互作用成为可能，这对新兴的集成光子学应用至关重要。尽管电场诱导二次谐波效应在材料中广泛存在，但其性能仍有待提高，以实现新颖的器件功能。在这里，我们展示了在 $\text{PbTiO}_3/\text{SrTiO}_3$ 铁电超晶格中自发形成的一种拓扑畴：极性斯格明子 (polar skyrmions)，它具有很高的综合电场诱导二次谐波性能。在 800 nm 非共振激励下测得的二阶非线性光学系数和调制深度分别达到 $\sim 54.2\text{ pm V}^{-1}$ 和 $\sim 664\%\text{ V}^{-1}$ ，同时还表现出较高的响应带宽（高于 10 MHz ）、较宽的工作温度范围（高达 $\sim 400\text{ K}$ ）和良好的抗疲劳性（大于 10^{10} 次循环）。通过结合原位实验和相场模拟，我们建立了极性斯格明子的独特极化构型和外加电场下的极化演化路径与其电场诱导二次谐波响应之间的微观联系。我们的研究不仅为片上器件的构建提供了一种极具竞争力的薄膜材料，而且为在光子学和光电子学领域中极性拓扑结构的应用开辟了新的途径。

D02-09

多铁薄膜中功能序参量的人工调控

耿皖荣*

Songshan Lake Materials Laboratory

作为为数不多的室温单相多铁材料，铁酸铋 (BiFeO_3) 具有丰富的结构和物理特性，在信息存储、传感器、制动器和自旋电子器件等电子器件上具有潜在的应用前景。为了满足器件小型化和高性能的发展需求，从 BiFeO_3 薄膜微观结构的设计出发实现宏观性能的有效调制，对工程应用和基础科学研究都至关重要。 BiFeO_3 薄膜的功能性是由其内部特定的功能序参量决定的，因此有必要深入研究 BiFeO_3 薄膜内功能序参量的调控机制。

通过有效结合高精密脉冲激光沉积技术，原子力显微镜和像差校正透射电镜，我们针对不同的研究问题，设计了多种 BiFeO_3 薄膜体系，分别以薄膜内部的畴/畴壁、缺陷和相结构等功能基元为研究载体，从原子结构和电子结构的层次深入讨论了不同结构基元组态内极化序参量的调控行为，探讨极化序参量调控与 BiFeO_3 薄膜宏观物理性能的联系。我们发现通过设计菱方-正交两相共存的薄膜结构，可在铁电多层膜内稳定一维有序的极性涡旋态。其次，通过借助激光、电场外部激光，我们系统研究了 BiFeO_3 薄膜内极化序参量的外场响应行为，实现了多种可逆的极化翻转过程，并进一步设计实现了室温下的磁-电-光耦合行为。此外，通过引入高密度界面失配位错，通过精细调控并分析位错应变场间的长程耦合，实现了原子尺度下可控的多种挠曲电行为。这些极化序参量的有效调控对实现多功能、高性能的 BiFeO_3 基微纳电子器件具有重要指导意义。

D02-10

基于磁-机-电耦合效应的弱磁探测技术研究

孙璇、吴金根、杜泳君、徐奕维、高杰强、林博民、王志广、胡忠强*、刘明

精密微纳制造技术全国重点实验室，西安交通大学电子科学与工程学院，电子陶瓷与器件教育部重点实验室与国际电介质研究中心，西安 710049

基于磁致伸缩/压电复合材料之间的磁-机-电耦合效应，可以开发将磁信号转换为电信号的磁电敏感元件，在电流检测、磁异探测、磁成像等方面具有重要应用。然而，磁电耦合材料体系有待进一步优化，尤其是低频弱磁探测能力亟待提升。本研究围绕三明治型磁电复合结构的材料体系和谐振模式，开展了系统的优化研究。首先，对磁致伸缩材料 Metglas (FeSiB)进行了热磁退火处理，提升了 Metglas 的初始磁化率和饱和磁化强度，同时将压磁系数从 2.41 (ppm/Oe)优化至 3.15 (ppm/Oe)；压电材料选择 X-切型石英单晶，通过镂空电极设计，降低了等效电容，并将其品质因数从 440 增至 563。结合热磁退火处理后的和镂空电极优化的石英单晶，制备出的 Metglas/石英单晶/ Metglas 三明治型磁电器件，磁电耦合系数比未优化的器件提高了 1.38 倍，且具有更低的电压噪声谱密度，在 20 kHz 至 50 kHz 的频段内，等效磁噪声均低于 5.89 pT/Hz^{1/2}[1]。其次，针对低频磁场探测难题，基于非线性磁电耦合效应的有源调制模式，通过准静态分析法确定了最佳调制频率，并揭示了调制幅值与待测信号的灵敏度、本底噪声之间的反比关系。据此得到调制场的最佳频率和幅值，以最大化低频磁场检测能力，提升信噪比[2]。此外，通过磁电器件的串并联，在有源磁调制模式下实现了低频磁场检测信噪比 22.68 dB 的提升，并将高灵敏度检测带宽扩展至 1000 Hz，与单一磁电器件相比扩展了一个量级。在此基础上提出双工作模式：1 Hz- 1 kHz 磁场利用有源调制模式检测，1 kHz 至 100 kHz 磁场利用线性磁电耦合效应检测，使得 100 kHz 以内的磁场检测极限均达到 pT 量级[3]。本研究提升了磁电传感器的弱磁探测能力，拓宽了其工作带宽和信噪比，可望用于高精度磁场测量领域。

[1] X. Sun, J. Wu, Y. Xu, J. Gao, B. Lin, G. Yang, B. Ge, Z. Hu, and M. Liu. Sensors and Actuators A: Physical, submitted

[2] X. Sun, J. Wu, X. Liang, Y. Du, Y. Xu, Y. Qu, M. Guan, H. Huang, F. Li, S. Liu, D. Ju, Z. Wang, Z. Hu, J. Guo,

and M. Liu. IEEE Sensors Journal 2023 Vol. 23 Issue 12 Pages 12695-12701

[3] X. Sun, J. Wu, J. Gao, G. Wang, X. Liang, F. Li, B. Lin, Y. Du, Y. Xu, H. Huang, Z. Hu, J. Guo, and M. Liu. Sensors and Actuators A: Physical 2024 Vol. 365, 114904

D02-11

Quantum fluctuation of ferroelectric order in polar metals

Fangyuan Gu¹, Jie Wang^{1,2}, Zi-Jian Lang^{1,3}, Wei Ku^{*1,3,4,5}

1. Tsung-Dao Lee Institute, Shanghai Jiao Tong University

2. Zhiyuan College, Shanghai Jiao Tong University, Shanghai

3. School of Physics and Astronomy, Shanghai Jiao Tong University

4. Key Laboratory of Artificial Structures and Quantum Control (Ministry of Education), Shanghai

5. Shanghai Branch, Hefei National Laboratory, Shanghai

The polar metallic phase is an unusual metallic phase of matter containing long-range ferroelectric (FE) order in the electronic and atomic structure. Distinct from the typical FE insulating phase, this phase spontaneously breaks the inversion symmetry without global polarization. Unexpectedly, the FE order is found to be dramatically suppressed and destroyed at moderate $\sim 10\%$ carrier density. Here, we propose a general mechanism based on carrier-induced quantum fluctuations to explain this puzzling phenomenon. The quantum kinetic effect would drive the formation of polaronic quasi-particles made of the carriers and their surrounding dipoles. The disruption in dipolar directions can therefore weaken or even destroy the FE order. We demonstrate such polaron formation and the associated FE suppression via a concise model using exact diagonalization, perturbation, and quantum Monte Carlo approaches. This quantum mechanism also provides an intuitive picture for many puzzling experimental findings, thereby facilitating new designs of multifunctional FE electronic devices augmented with quantum effects.

D02-12

氧化钪基超晶格中的杂化非常规铁电性

赵宏健*

吉林大学，物理学院，物质模拟方法与软件教育部重点实验室

近期发现的铁电氧化钪与硅基微电子工艺高度兼容，有望用于制造高集成度、低功耗铁电存储器。氧化钪具有单斜、正交、四方和立方等多个物相。常温常压下，氧化钪以非铁电的单斜物相存在；氧化钪的铁电性则源于亚稳正交相，该相合成条件较严苛。本报告将结合群论对称性分析和第一性原理计算，介绍一种在单斜氧化钪中实现铁电性的策略，即通过构筑 $(\text{HfO}_2)_1/(\text{CeO}_2)_1$ 超晶格，在钪基材料中引入杂化非常规铁电性[1,2]。

[1] L. Yu, H. J. Zhao, P. Chen, L. Bellaiche, Y. Ma, Nature Communications 14, 8127 (2023).

[2] H. J. Zhao, Y. Fu, L. Yu, Y. Wang, Y. Yang, L. Bellaiche, Y. Ma, arXiv:2309.12800 (2023).

D02-13

PMN-PT 单晶铁电畴的无电压调控

吕笑梅*、阎朔、胡雪莉、黄凤珍、朱劲松

南京大学物理学院

铁电畴结构的微观调控可以有效促进铁电材料的性能提升和功能开发。传统上，铁电畴的控制主要通过外加电场实现，而近年来，无电压的电畴调控技术因其低能耗、大规模的特点引起了广泛关注。本研究针对铁电单晶 $0.72\text{Pb}(\text{Mg}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3\text{-}0.28\text{PbTiO}_3$ (PMN-28PT)，探讨无电压调控畴结构的方法。

1. 水诱导的铁电畴自组织演变。将 PMN-28PT 单晶置于去离子水中，发现铁电畴存在成长粗化现象，并被超声振动极大增强。分析认为水中的 H^+/OH^- 离子吸附在晶体表面诱导电畴演化，而超声振动起到降低极化开关势垒的作用。

2. 紫外光诱导的铁电畴重构。在顺电-铁电降温相变过程中，用低功率紫外光照射 PMN-28PT 单晶，可诱导单晶面外极化向上排列。在微加工制成的方形岛状晶片中则同时获得中心汇聚的面内极化构型。分析揭示光极化的内在机制，即紫外光照射下单晶表面的负电荷累积以及相应的内建电场。

3. 借助铝覆盖层的铁电拓扑超畴阵列制备。在 PMN-28PT 单晶表面沉积金属铝层，由于金属铝和 PMN-28PT 单晶功函数的差异，能诱导面外极化向下排列。进一步沉积棋盘状金属铝层，结合降温相变过程中的紫外光照射，实现中心发散和中心汇聚型拓扑畴相邻排列的、二维周期性的大规模超畴阵列。

D02-14

Ferroelectric bismuth oxides: from crystal structure prediction to device implementation

Yue-Wen Fang*

University of the Basque Country

Atomic-scale ferroelectrics are of great interest for high-density electronics, particularly field-effect transistors, low-power logic, and nonvolatile memories. Herein, we designed a structure based on the bismuth-based fluorite structure by removing a whole layer of bismuth, leading to a layered structure with a framework of bismuth oxide [1]. Using high-throughput crystal structure prediction, we found some layered bismuth oxides show excellent stability. In particular, Bi_6O_9 is potentially an excellent ferroelectric material. In experiment, we find that a layered structure of bismuth oxide can stabilize the ferroelectric state down to 1 nanometer through samarium bondage. The thin films with thicknesses that range from 1 to 4.56 nanometers possess a relatively large remanent polarization from 17 to 50 microcoulombs per square centimeter. The crystal structure is cross-validated by comparing the predicted crystal structure and the experimental structural analysis. In addition, the electron localization function analysis shows that the driving force of ferroelectricity is the lone-pair electrons of Bi ions. Ab initio molecular dynamics simulation results show that Sm has a stronger oxygen binding ability than Bi, which helps maintain the polar phase of Bi_6O_9 at room temperatures. Correspondingly, our experiment shows that the main phases are Bi_6O_7 and some Bi_2O_3 phases without the Sm substitution.

Based on the above nanometer ferroelectric bismuth oxides, we have investigated the performance of ferroelectric tunnel junctions (FTJs) for memory devices [2]. It is found that the FTJs can maintain tunnelling electroresistance of 7×10^5 with the ferroelectric barrier film down to one nanometer, three orders of magnitude higher than previous reports with such thickness, owing to efficient barrier modulation by the large ferroelectric polarization. These ferroelectric tunnel junctions demonstrate up to 32 resistance states without any write-verify technique, high endurance (over 5×10^9), high linearity of conductance modulation, and long retention time (10 years). Furthermore, tunnelling electroresistance over 10^9 is achieved in ferroelectric tunnel junctions with 4.6-nanometer samarium-substituted bismuth oxide layer, which is higher than commercial flash memories. The results show high potential towards multi-level and reliable non-volatile memories.

References

[1] Q. Yang†, J. Hu†, Y.-W. Fang†, et al., Science 379 (2023) 1218.

[2] Y. Jia†, Q. Yang†, Y.-W. Fang*, et al., Nat Commun 15 (2024) 693.

D02-15

铅基铁电信息存储材料及器件探索

沈胜春*、殷月伟、李晓光

中国科学技术大学

铁电信息存储具有高速、低功耗、非易失等优势，是解决大数据时代以及国家在高性能信息存储和处理领域所面临需求挑战的优选方案之一。近年来，铅基铁电材料因其良好的 CMOS 工艺兼容性和可三维高密度集成等优势备受学术界关注和产业界青睐，有望引发存储器技术变革；但同时也面临耐久、疲劳、器件性能不稳定等诸多问题。本报告将介绍课题组近期在铅基铁电材料及器件方面的相关研究进展：1) 实现铅基铁电薄膜高耐久性调控和发展高耐久的柔性铅基铁电薄膜；2) 构筑铅基铁电场效应管的超低亚阈值摆幅和人工突触器件；3) 构筑具有超高速、低能耗的铅基铁电隧道结及人工突触器件。

D02-16

Extra hole Stabilized Ferroelectric phase of HfO₂ and Interlayer- Polarization Effects on topological transport properties of MnBi₂Te₄

曹腾飞*

西北工业大学

Ferroelectric materials have a spontaneous electric polarization that can be switched between two or more orientations with an applied electric field. They enable devices such as nonvolatile random-access memories, ferroelectric field-effect transistors, and ferroelectric tunnel junctions. The discoveries of ferroelectricity in HfO₂, and sliding ferroelectricity in Van der Waals (VDW) materials are both attractive as they can be integrated with Si relatively easily, and provide an extra avenue to tailor magnetic orders as well as topological transport properties. However, the ferroelectric phase of HfO₂ is metastable, and it can only be stabilized on proper substrates or under specific growth conditions. Here, we will show that charge redistribution in HfO₂ can efficiently modulate the relative stabilities of its polar and non-polar phases, and hole doping contributes to stabilize polar phase of HfO₂. Furthermore, we will show that out-of-plane polarization that can be achieved in VDW materials through interlayer sliding. Even the sliding polarization is relatively weak (0.01 $\mu\text{C}/\text{cm}^2$), it determines the direction anomalous hall current in even-layer MnBi₂Te₄, and can make odd-layer MnBi₂Te₄ magnetic topological insulator or trivial insulators.

D02-17

多铁材料中的体光伏效应：对称性、选择定则和隐藏模式

周健*

Xi'an Jiaotong University

传统的光生电流（光生伏打）效应通常需要异质结构的材料设计，例如半导体 p-n 结或异质界面，才可以获得单向的稳定电流。物理学家和材料学家指出在中心对称性破缺的体系中，可以通过非线性光学来获得稳定的直流电。这一过程目前已经被广泛研究和证实，并有潜力突破 Shockley–Queisser 极限。本征的体光伏电流主要由移位电流（shift current）和注入电流（injection current）组成。它们的对称性选择定则

和体系磁空间群密切相关。近年来,我们基于对称性分析和第一性原理计算,揭示了多种铁性材料中移位电流和注入电流的选择定则,包括 I 型多铁材料中的自旋流、轨道矩流、及其层分辨特征等;在手性磁结构中厘清了体光伏电流产生的对称性要求和选择定则。这些研究结果可以帮助我们更深入地认识非线性光学和自旋电子学之间的联系,为新型信息存储材料载体提供了一定理论依据。

D02-18

太阳能光伏调控界面磁性研究

周子尧*

常州大学

信息存储器是电子信息产业的核心部件,由磁场或电流驱动的自旋信息存储已经接近其存储密度和速度的极限,因此,寻找新的驱动方式以实现低功耗、快速响应和高密度的自旋存储器件,已经成为电子信息产业未来的主要发展方向。我们利用低功率电场和自然光场来调节自旋特性,开发了基于光磁电耦合功能异质结的新一代信息存储材料。通过在铁磁层和光伏层之间插入了不同中间层,实现了基于 P-N Si 体系的界面磁性调控。此外,我们使用有机光伏材料用作光伏层,实现了体自旋波临界角的可逆转变。在可见光调控磁化强度的翻转上,我们实现了在面外方向上磁场和光场的双重调控。通过合成反铁磁异质结构,实现了可见光进行反铁磁和铁磁状态之间完整的可逆磁性切换。

在近期的研究中,为了提高调控效率,我们改进了太阳能电池工艺,通过应用胍基碘化物(GAI)表面钝化技术,成功制备了具有增强的晶粒大小和优良品质的 FAPbI_3 钙钛矿薄膜。GAI 的最佳浓度显著减少了晶粒边界的存在并提高了结晶度。我们认为,GAI 中的铵基团、不饱和氮原子和碘离子的协同作用可以通过多种途径有效修复钙钛矿的表面缺陷,从而显著抑制了陷阱辅助的非辐射复合。这种改进有效提升了钙钛矿太阳能电池的光电转换效率(PCE),使其达到 23.02%。此外,研究发现设备的稳定性受 GAI 浓度的影响很大,这归因于 GA+ 中胺基团的亲水性。超过 5 mg/ml GAI 浓度处理的设备在 5 分钟内迅速降解。相比之下,以 3 mg/ml GAI 处理的设备在 25 °C 和 30-40%相对湿度条件下存储 1000 小时后,保持了初始效率的 71%,突显了在钝化过程中精确控制 GAI 应用的关键作用。

D02-19

钛酸锶外延薄膜应变诱导铁电性与电卡增强效应

张森*

国防科技大学

以磁卡(MC)、电卡(EC)、力卡(mC)为代表的环境友好型固态制冷技术是当下制冷行业发展的前沿方向之一;其中,电卡效应以其体积小、成本低、高效节能的等优势在近年来备受科学关注。目前电卡效应的研究主要集中在铁电陶瓷或铁电聚合物等材料中,通过一级相变实现较大的电卡效应;但其存在工作温区窄、材料有限、不可逆等不利因素[1-3]。在外延薄膜中利用应变工程调控材料的铁电相变温度并实现电卡效应有望破解这些问题,而目前尚未见报道。我们通过外延应变在先兆性铁电体(或称量子顺电体)钛酸锶(SrTiO_3)薄膜中诱导出铁电相,进一步在室温附近(243 K)实现了外缘增强型电卡效应,超过其在低温下(4 K)对应的本征电卡效应一个量级,且具有很宽的工作温度区间(>128 K);同时在衬底的钳位作用下,薄膜的电卡效应源自于二级铁电-顺电相变,因此具有高度可逆性。此外,我们还通过经典的 Landau 唯象理论对实验结果进行了模拟,二者高度符合。我们的工作揭示了利用应变工程可以极大地提高材料的本征电卡效应或扩充电卡材料的范畴,具有科学启发性和潜在应用前景[4,5]。

[1] X. Moya and N. D. Mathur, Caloric materials for cooling and heating. *Science* 370, 793-799 (2020).

[2] I. Takeuchi and K. Sandeman, Solid-state cooling with caloric materials. *Physics Today* 68, 48-54 (2015).

[3] X. Moya, S. Kar-Narayan and N. D. Mathur, Caloric materials near ferroic phase transitions. *Nature Materials*

13, 439-450 (2014).

[4] S. Zhang, G. G. Guzmán-Verri, X. Moya and N. D. Mathur, Electrocaloric effects at a phase transition created by strain, *Nature Materials* 23, 594-595 (2024).

[5] S. Zhang, J. Deliyore-Ramírez, S. Deng, B. Nair, D. Pesquera, Q. Jing, M. E. Vickers, S. Crossley, M. Ghidini, G. G. Guzmán-Verri, X. Moya and N. D. Mathur, Highly reversible extrinsic electrocaloric effects over a wide temperature range in epitaxially strained SrTiO₃ films, *Nature Materials* 23, 639-647 (2024).

D02-20

声驱动磁电天线的等效电路模型研究

杜泳君、吴金根、徐奕维、乔佳诚、胡忠强*、刘明

西安交通大学

由磁致伸缩材料和压电材料复合而成的磁电异质结可以通过应变驱动磁化波动产生电磁辐射。这种基于声波谐振的磁电天线有望突破理论极限对天线尺寸的限制，在近年来引起广泛关注[1-4]。磁电天线的工作机制涉及磁-机-电多场耦合，构建其等效电路模型可以有效简化多场耦合分析过程[2, 3]。但现有模型仍局限于针对低驱动场下磁电耦合效应的线性描述，且缺乏与磁电天线近场辐射性能的关联。本工作中，我们以三明治型层状磁电复合结构为器件原型，通过将磁-机-电耦合的本构方程与等效磁偶极子模型相结合，构建了磁电天线的全耦合等效电路模型；同时，在机电等效集总元件中引入非线性项，首次实现了高场驱动下磁电天线非线性行为的定量描述；根据构建出的非线性模型，我们提出了一种基于近场磁通量密度频响曲线拟合的半定量分析方案，通过提取磁机耦合属性参数来映射并预测磁电天线的谐振辐射特性；由所提取的材料参数随驱动场幅度的变化规律，得出了高场驱动下磁电天线辐射性能受限的潜在因素，强调了提升磁电天线功率容量时仍需解决的关键问题[4]。

参考文献：

- [1] J. Qiao, J. Wu, Y. Du, Y. Xu, Z. Hu, and M. Liu, A portable VLF magnetoelectric antenna with high communication rate based on direct antenna amplitude modulation. in 2022 IEEE MTT-S International Microwave Workshop Series on Advanced Materials and Processes for RF and THz Applications (IMWS-AMP), 2022, 1-3.
- [2] Y. Du, Y. Xu, J. Wu, J. Qiao, Z. Wang, Z. Hu, Z. Jiang, and M. Liu, Very-low frequency magnetoelectric antennas for portable underwater communication: theory and experiment. *IEEE Trans. Antennas Propag.*, 2023, 71(3): 2167-2181.
- [3] Y. Xu, J. Wu, Y. Du, J. Qiao, M. Zhao, Z. Wang, Z. Hu, and M. Liu, A portable VLF magnetoelectric transmitter with high-rate phase modulation. *IEEE Trans. Antennas Propag.*, 2024, 72(4): 3134-3149.
- [4] Y. Du, J. Qiao, J. Wu, Y. Xu, T. Nan, S. Dong, Z. Hu, and M. Liu, Performance analysis of acoustically actuated magnetoelectric antennas via equivalent circuit method. *J. Appl. Phys.*, 2024, 135(11): 114101.

D02-21

锆钛酸铅陶瓷的织构化研究

李飞*

西安交通大学

压电材料是一种能够实现机械能与电能相互转换的功能材料，广泛应用于医学超声诊断、精密驱动控制、深海通讯、无损检测等诸多重要领域。作为一类最经典的铁电固溶体，锆钛酸铅[Pb(Zr, Ti)O₃, PZT]陶瓷以优异的压电性能和较宽的温度使用范围成为了众多压电器件的关键材料。由于 PZT 陶瓷的性能直接

影响了压电器件的使用效能，因此增强 PZT 陶瓷的压电性能对于推动相关器件与系统的升级换代具有重要意义。为了实现上述目标，课题组提出了通过“钝化”模板来实现 PZT 陶瓷高质量织构化的研究思路。一方面，研制出了一种新型锆钛酸钡[Ba(Zr, Ti)O₃, BZT]模板，代替传统钛酸盐模板，提高了模板在 PZT 母体中的稳定性；另一方面，设计了 Zr⁴⁺含量非均匀分布的 PZT 母体多层结构来代替传统的均匀结构，使籽晶模板首先在 Zr⁴⁺含量较低的 PZT 母体中完成诱导晶粒定向生长的任务，在之后的晶粒生长和陶瓷致密化过程中，再通过 Zr⁴⁺和 Ti⁴⁺离子扩散获得组分均匀的 PZT 织构陶瓷。基于上述方法，课题组首次制备出了晶粒沿<001>高度择优取向的 PZT 织构陶瓷，在准同型相界附近获得了优异的压电、机电耦合性能（压电系数 d₃₃~700 pC/N、g₃₃~90 mV m/N、机电耦合系数 k₃₃~0.85）以及良好的温度稳定性（居里温度~360°C），突破了现有 PZT 陶瓷压电效应与居里温度的制约关系。本研究为诸多先进陶瓷的织构化工作提供了一种新的思路。研制出的高性能 PZT 织构陶瓷不但为高灵敏度传感器、换能器的性能提升带来了新的契机，同时也为研究 PZT 这类经典铁电体结构与性能关系提供了重要的基础材料。

D02-22

反铁电薄膜物性调控及其在热管理和电滞应变等领域的应用研究

陈祖煌*

Harbin Institute of Technology, Shenzhen

热调控材料的研发和应用有助于提高器件寿命和能源利用率，对微电子、能源和航空航天等领域具有重要意义。当前实现热调控和管理主要通过掺杂、应变和变温等手段来调控材料的热导率，难以同时满足高开关比、可逆和快速调控要求。铁性薄膜如铁电和反铁电材料在电场的作用下发生极化翻转和结构改变，可显著影响热量载流子声子的输运，从而可有效调控其导热系数。本报告主要介绍我们最近在反铁电外延薄膜热开关领域取得的一些进展，通过电场有效调控其极化结构和相结构实现对导热系数的可逆调控，并揭示相关物理机制，开发出调控方式简单、热开关比大、响应速度快和调控电压低的新型高效热调控材料。此外，我们还会介绍反铁电薄膜在电滞应变等领域的最新研究进展工作。

D02-23

高性能无铅压电材料及原型器件

吴家刚*

四川大学

压电材料能实现机械能与电能直接转换，被广泛应用于传感、驱动、换能等器件中，是重要的先进功能材料之一。出于可持续发展的需求，环保型无铅压电陶瓷愈发受到广泛的关注。对于具有“结构—性能”强关联的功能陶瓷而言，调控其结构能有效提升宏观电学性能。因此，采用组分掺杂而实现的相界调控成为当前无铅压电陶瓷提升压电性能最受欢迎的手段之一。本次报告将介绍本课题组在铌酸钾钠、钛酸铋钠、铁酸铋无铅压电陶瓷及相关原型器件的研究进展，聚焦相界构建、材料结构设计、器件设计等对材料与器件的性能的影响，并积极探索其背后的相关物理机制，最后给出对无铅压电材料及原型器件的发展展望。

D02-24

基于铁电玻璃态的无铅钙钛矿陶瓷压电及储能特性优化研究

张乐*

西安交通大学 (Xi'an Jiaotong University)

铅钙钛矿材料因其优异的压电铁电响应及环境友好特性在驱动器、换能器、水声及医用超声、脉冲电容器等领域具有广阔的应用前景。如何简便且有效地提高其压电及铁电储能特性已成为了领域重点关注的前沿热点问题。我们在这里提出了一种铁电玻璃态与准同型相界 (MPB) 多相共存概念耦合的新策略, 不仅大幅提升了无铅钙钛矿陶瓷的电致应变性能, 在 Mn 掺杂($\text{Bi}_{0.5}\text{Na}_{0.5}\text{TiO}_3$ - BaTiO_3)无铅陶瓷中获得了 0.55% 的大可逆电应变(S_{max})和 917 pm/V 的压电常数 d_{33}^* ($S_{\text{max}}/E_{\text{max}}$), 同时可将 Zr 掺杂 BaTiO_3 陶瓷的静态压电响应 d_{33} 大幅提高到约 610 pC/N。值得关注的是通过构建共存铁电玻璃态的技术路径还可以大幅降低滞后的同时提高其电致应变及铁电储能特性。以上成果表明了共存铁电玻璃态具有优化无铅钙钛矿陶瓷压电及储能特性的巨大潜力。相关数据已发表在 *Advanced Functional Materials* 2020, 2004641, *Nano Energy* 2021, 90, 106519, *ACS Appl. Mater. Interfaces* 2022, 14, 1434–1442 及 *ACS Appl. Mater. Interfaces* 2024, 16, 9, 11497-11505 等一系列论文上。

D02-25

基于磁电耦合的垂直磁隧道结的电场调控

赵永刚*

清华大学

Electric-field control of perpendicular magnetic tunnel junction via magnetoelectric coupling

Yonggang Zhao

Department of Physics and State Key Laboratory of Low-Dimensional Quantum Physics, Tsinghua

University, Beijing 100084, China

Frontier Science Center for Quantum Information, Tsinghua University, Beijing 100084, China

Magnetic tunnel junctions (MTJs) are the core elements of spintronic devices. Currently, the mainstream writing operation of MTJs mainly relies on electric current with high energy dissipation, which can be greatly reduced if an electric field is used instead. In this regard, strain-mediated multiferroic heterostructure composed of MTJ and ferroelectrics are promising with the advantages of room temperature and magnetic field-free as already demonstrated by MTJ with in-plane magnetic anisotropy. However, there is no such report on the perpendicular MTJs (p-MTJs), which have been commercialized. Here, we investigate electric-field control of resistance state of MgO-based p-MTJs in multiferroic heterostructures. A remarkable and nonvolatile manipulation of resistance is demonstrated at room temperature. Through various characterizations and micromagnetic simulation, the manipulation mechanism is uncovered. Our work provides an effective avenue for manipulating p-MTJ resistance by electric fields and is notable for high density and ultralow power spintronic devices.

D02-26

柔性自支撑铁电/磁电薄膜及其器件应用

刘明*

西安交通大学

近年来, 随着柔性电子技术和产业的迅速发展, 功能氧化物由于其各种丰富的功能特性有望成为柔性电子器件中的核心功能材料。功能氧化物本征的力学行为由于结构稳定性、晶体缺陷密度等因素, 往往表现出硬而脆的特征, 难以推广应用于柔性电子领域。随着在自支撑铁电单晶氧化物薄膜中超弹-超柔性力学特性的发现(*Science* 2019, 366, 475-479), 打破功能氧化物材料硬而脆力学行为的传统认知和结构设计限制, 为功能氧化物材料进军柔性电子领域开辟新路径。

基于前期研究成果, 通过水溶性牺牲层技术构建了新型磁电弹簧结构, 阐明了由应变梯度诱导电极化

旋转的力-电耦合作用引起的超伸缩形变特性。在自支撑氧化物单晶薄膜器件应用方面,将自支撑铁电氧化物薄膜引入介电储能薄膜体系,提出了以自支撑铁电氧化物薄膜作为击穿路径阻碍层和增强界面极化效应的新思路,实现了击穿场强和储能密度的大幅度提高;此外,在柔性能量收集器方面,自支撑铁电氧化物薄膜作为核心功能层,获得了优异的力学性能和超高输出的能量密度;该研究为开发新型高性能柔性电子器件提供了新途径。

D02-27

铁电拓扑缺陷的力学调控

王学云*

Beijing Institute of Technology

拓扑缺陷广泛存在于宇宙学、粒子物理、超流体、液晶和冶金学等不同领域研究当中,从 2000 年开始,铁性材料中实空间的拓扑缺陷开始进入研究视野,并且在电子与信息等领域展现出潜在的应用。在本次报告中,我将简要汇报六角锰氧化物铁电体中拓扑铁电畴结构的演化规律以及力学调控的研究。首先我将从拓扑铁电畴形成的机制展开,阐述其形成机制与描述相变动力学的 Kibble-Zurek 机制的内在联系,并展示该机制在铁电体系中的应用。在了解铁电畴基本特性的基础上,我将介绍这类结构型拓扑铁电畴的力学调控方法——“马格努斯力”(Magnus Force)调控方法,该方法的思想将流体力学中流场改变旋转物体运行轨迹的概念借鉴至固体材料中,将应变场类比于流场,将涡旋的旋性类比于物体的旋转,进而产生对铁电涡旋畴的力学调控。实验上,在测量杨氏模量等关键力学性质的基础上,利用纳米压痕与划痕技术产生残余应变/应变梯度,实现力学调控,该种调控方法可以实现大面积单手性拓扑条纹畴。

D02-28

功能薄膜中铁电畴翻转动力学与极性畴壁的相场模拟

彭仁赐¹、文树斌¹、程晓行²、陈龙庆³、廖敏¹、周益春¹

1. 西安电子科技大学

2. 深圳大数据研究院

3. The Pennsylvania State University (USA)

功能铁性薄膜(例如铁电/铁弹薄膜)具有独特的电学与力学性能,引起研究者广泛地关注。(1) HfO₂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 HfO₂基铁电极化翻转和畴动力学的机制具有挑战性,这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 Hf_{0.5}Zr_{0.5}O₂薄膜时间分辨的纳米尺度铁电畴翻转过程的可视化。我们表明了无尺度的铁电畴独立翻转特性(横向尺寸为 1 nm 的极性畴仍能稳定)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,阐明了 180°极化翻转机制,它是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铁电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 HfO₂基薄膜铁电存储器方面的研究。(2) 中心对称的铁弹材料(如 BiVO₄)中的极性畴壁会产生内建电场,并通过促进电荷载流子的分离,有望用于光电能量的高效转换。然而,在介观尺度上极性畴壁的起源及其与来自相变的自发应变之间的关系仍不清楚。相场模拟表明:(i) 铁弹孪生畴的形成源于 T-M 相变的自发应变;(ii) BiVO₄薄膜极性畴壁的起源源自畴壁处应变梯度引起的挠曲电效应;(iii) 极化强度的大小主要来自剪切应变梯度的贡献。研究结果不仅为铁弹孪生畴的形成机制提供了深入的理解,而且揭示了由铁弹畴壁处应变梯度诱导的极性畴壁起源。

研究工作最近发表于:

1. Peng R-C, Wen S, Cheng X, et al. *Advanced Functional Materials*, 2024. DOI: 10.1002/adfm.202403864.
2. Peng R-C, Shao P-W, Cheng X, et al. *Acta Materialia*, 259: 119297, 2023.
3. Shao P-W, Liu H-J, Sun Y, Wu M, Peng R-C, et al. *Small*, 18(19): 2107540, 2022.

D02-29**极化拓扑畴的构筑及信息器件应用**王静^{*1}、马静²、张金星³、黄厚兵¹、南策文²

1. 北京理工大学
2. 清华大学
3. 北京师范大学

铁电拓扑畴结构具有小尺寸、稳定的特点，在存储、逻辑、光电信息器件等方面有重要应用。通过精心设计生长温度和润湿层厚度，我们实现了 200-300 纳米 BiFeO₃ 自组装纳米岛，并且构筑了所罗门极化环，中心收敛、发散等一系列拓扑畴结构。通过外加电场调控，实现了这些拓扑畴结构之间的相互、可逆转化，并且伴随着纳米岛中“中性畴壁”与“十字畴壁”的相互转化。在此基础上，我们通过电场对导电畴壁形态和电导的精准调控，进一步设计了铁电畴壁非易失存储与逻辑器件，为下一代高密度、低功耗电子信息器件提供了研究思路。

D02-30**Competing Charge Transfer and Screening Effects in Two-Dimensional Ferroelectric Capacitors**

刘仕*

西湖大学

Two-dimensional (2D) ferroelectrics hold promise for ultrathin flexible nanoelectronics, typically employing a metal-ferroelectric-metal sandwich structure. The electrodes can play a dual role in these systems - they can either contribute free carriers to screen the depolarization field, enhancing nanoscale ferroelectricity, or they can induce charge doping that disrupts the long-range crystalline order. We explore the interplay between these two roles of the electrodes in 2D ferroelectric capacitors, supported by first-principles calculations covering a range of electrode work functions. Our results reveal a volcano-type relationship between the ferroelectric-electrode binding affinity and the electrode work function, which can be further unified by a quadratic scaling between the binding energy and the transferred interfacial charge. At the monolayer limit, the charge transfer dictates the ferroelectric stability and switching properties. This general characteristic is confirmed in various 2D ferroelectrics including α -In₂Se₃, CuInP₂S₆, and SnTe. As the ferroelectric layer thickness increases, the capacitor stability evolves from a charge-transfer-dominated state to a screening-dominated state.

D02-31**准二维材料中持久铁电性和磁电耦合性的探索**

逯学曾*

东南大学

寻找高温、强磁电耦合和强铁电铁磁单相多铁材料一直备受关注，它的实现将为高密度，低功耗的记忆存储器件提供理论和材料支撑。目前的多铁领域面临着多个难点问题，其中有：（1）继续寻找更多的室温多铁材料并实现多铁材料中的强磁电耦合性；（2）寻找室温下，10nm 尺度上与现在的集成电路工艺

(CMOS)兼容的, 具有强磁电耦合的铁电薄膜材料。满足上述两点的多铁材料依然罕见。通过第一性原理计算, 我们发现了罕见的、具有面外几何铁电性的准二维钙钛矿材料, 证明了这类材料具有受对称性保护的强磁电耦合性。通过设计规律, 预言了室温的多铁材料 $\text{SrTb}_2\text{Fe}_2\text{S}_7$, 其具有面外铁电性和强磁电耦合性, 并且材料在一个晶胞厚度 ($\sim 4.5\text{nm}$) 依然具有铁电性。

D02-32

二维单质铁电性及畴界调控

陆贇豪*

Zhejiang University

铁电材料, 特别是二维系统中的铁电材料, 在过去几年引起了人们极大的兴趣。然而, 几乎所有报道的铁电材料都是由不同种类原子组成的化合物。据我们所知, 单元素材料的铁电性从未在文献中报道过。在这里, 虽然违反直觉, 但我们基于第一性原理计算揭示了二维单元素 V 族材料中的自发电极化和铁电性, 该材料具有类似于黑磷的屈曲晶格结构。同时, 我们建立了一个通用模型来理解和搜索可能的二维铁电和反铁电材料。利用这个模型, 我们发现铁电相和反铁电相也可以存在于第四族和第六族单元素二维系统中。这些单元素材料的铁电居里温度可以高于室温, 且压电系数非常反常, 因此有望实现具有广阔应用前景的超薄铁电器件。基于单材料铁电体系的研究结论, 可以在其他铁电体系中实现非传统的铁电效应, 具有良好的实验实现和实际应用前景。

D02-33

长离子位移铁电的非传统性

吴梦昊*

华中科技大学

在经典模型中, 铁电相通常是高对称顺电相在软模下的较小偏离, 只存在于属于特定十个极性点群的晶格中。报告人将介绍几类跳出该框架的非传统铁电设计, 特殊键型使其能以较低翻转势垒长离子位移, 包括提出独特的滑移铁电机理, 使多数非铁电二维材料能通过堆叠产生极低势垒的稳定铁电性, 其垂直极化可通过层间水平滑移翻转, 在层间扭角下还会产生一种铁电莫尔超晶格, 随后该预测在多种二维体系中实验证实, 相关报导目前已有近 30 篇文章发表于 Nature、Science 和子刊; 提出利用类共价离子键在高电离场体系诱导高极化铁电性, 由于库仑作用的长程特性, 也能极大降低长离子位移的翻转势垒; 一些质子/离子导体甚至可产生离子位移为多倍晶格常数的铁电性, 极化也呈量子化。上述铁电性甚至可违反诺伊曼定则, 能存在于非极性点群的晶体中, 即使在宏观尺度下其极化仍高度依赖于边界, 这些性质都迥异于以往的铁电研究。

D02-34

二维 $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$ 中的本征铁电翻转

柯昌明、白丽宜、刘仕*

westlake university

二维铁电半导体为超薄、高密度纳米电子设备的设计与集成开辟了全新路径。然而, 当前拥有面外极化的二维铁电材料仍属罕见。 $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$, 一种独特的二维铁电材料, 因其同时具备面内和面外极化特性而备受瞩目。然而, 关于其面内极化及其极化的翻转机制, 学界一直存在争议。经过压电响应力显微镜的实验分析与对称性理论的深入结合, 我们揭示了 $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$ 面内具有 C_3 对称性, 从而否定了面内极化的存在。那

么已有实验已报道的面内极化源于何处呢？为了解开 $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$ 面内极化之谜，我们利用深度学习辅助的大规模分子动力学模拟，研究了该材料在面内与面外电场下的极性响应。研究发现， $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$ 本身虽无固有极性，但在面内电场作用下，其带电畴壁会发生定向移动，呈现出极性翻转特性，从而展现了电滞回效应。值得注意的是， $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$ 畴壁的运动特性显著区别于已知的三维铁电畴壁和铁磁畴壁，其展现了一种独特的雪崩动力学行为——畴壁在间歇性连续移动与长时间休眠之间交替。通过对不同温度、电场方向和强度下畴壁行为的系统研究，我们发现其运动速度遵循蠕变因子为 2 的通用蠕变方程，这一发现与三维铁电畴壁（指数因子为 1）和铁磁畴壁的行为模式有着显著区别。

本研究不仅理清了 $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$ 的面内极性起源，同时也首次观察到了二维铁电中一维畴壁独特的雪崩运动特性和特有的蠕变指数。这些突破性的发现不仅深化了我们对二维铁电材料基本物理性质的理解，更为其在纳米电子学、传感器技术及能源存储等领域的广泛应用提供了坚实的理论基础。

D02-35

堆叠铁电、堆叠铁谷和分数量子铁电

徐长松*

复旦大学

铁性体系历久弥新，不仅蕴含着丰富的物理，还具现实的应用价值。本报告将讨论三种新型铁性：堆叠铁电、堆叠铁谷和分数量子铁电。首先，通过系统的群论分析，我们提出了堆叠铁电性的一般理论，其结论涵盖了所有堆叠铁电的可能性。该理论不仅解释了先前的研究成果，还提供了新的视角，预测了在典型的二维铁磁材料 CrI_3 中引入铁电性的可能性。其次，我将介绍一种新的实现铁谷极化的策略，即通过双层堆叠实现非易失且可切换的铁谷效应。这种堆叠铁谷策略在保持时间反演对称性的同时，通常还保持空间反演对称性。通过高通量筛选，找到了多个具有潜在铁谷效应的材料，并通过第一性原理验证了其可行性。最后，我们讨论分数量子铁电性，与普通铁电不同，其电极化来自原子的实质性位移。通过群论分析，筛选出 28 个可能实现分数量子铁电性的点群，包括极性和非极性群。该理论不仅解释了单层 $\alpha\text{-In}_2\text{Se}_3$ 的平面极化现象，还在 AgBr 的立方化合物中预测了电极化。这三个领域的探索为铁电材料的设计和应用提供了新的基础和视野。

D02-36

二维范德华异质结自旋电子学性质的铁电调控

邵定夫*

中国科学院合肥物质科学研究院

Spintronics utilizes the spin degree of freedom in condensed matter for information processing and storage. The generation of different memory or logic states in spintronic devices usually related to the reversal of the spontaneous magnetization. “Standard” methods to reverse magnetization, such as a magnetic field or a spin torque generated by substantial electric currents, suffer from large energy dissipation. Electric control of magnetization by voltage has significant advantages for low-power spintronics. This requires strong magnetoelectric coupling, which is usually very weak in metallic systems. In this talk, I will discuss two proposals of electric field control of the spintronic properties without reversing the magnetization. We found that in Van der Waals heterostructures composed of two-dimensional magnetic metals and ferroelectric insulators, the spintronic properties, such as anomalous Hall effect and magnetic skyrmions, can emerge due to the reduced symmetry at the interfaces. In addition, the symmetry and the resulted properties in these heterostructures can be further controlled by ferroelectric switching, in spite of the weak magnetoelectric coupling. Our proposal provides an alternative direction for voltage-controlled spintronics and offers as-yet unexplored possibilities for functional devices by

D02-37

二维莫尔超晶格中的铁电及磁电耦合的理论研究

孙伟^{*1}、程振祥²

1. 济南大学

2. University of Wollongong

二维莫尔超晶格可以通过二维材料层间轻微扭转或晶格失配形成，是探究各种新奇物理现象的重要平台。由于其在界面处引入了比原始周期单元更大的超晶格莫尔势，从而可以周期性地调制其晶格结构和电子结构。在这里，我们采用 CuInP_2S_6 单层铁电材料与磁性或非磁性材料构建莫尔超晶格，通过第一性原理计算详细探究了周期性莫尔势对磁性和滑移铁电性的影响。(1) 在 $\text{MnS}_2/\text{CuInP}_2\text{S}_6$ 多铁莫尔超晶格中， MnS_2 的磁各向异性受到了莫尔势的显著影响，并且可以通过 CuInP_2S_6 的铁电极化来调节。这一现象导致承载在 MnS_2 中的斯格明子可以通过脉冲电流以固定步长和方向的运动方式在莫尔周期内驱动，并通过铁电切换控制斯格明子移动或冻结。(2) 在 $\text{GeS}_2/\text{CuInP}_2\text{S}_6/\text{GeS}_2$ 铁电莫尔超晶格中，局部位置处 CuInP_2S_6 组分的极化反转可以同时驱动滑移铁电极化的切换，揭示了超晶格中 CuInP_2S_6 单层铁电与层间滑移铁电的强烈耦合。由于其极化强度在该区域内显著提到至 11.77 pC/m ，因此在莫尔超晶格中构建了密度为 $6.55 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ 的铁电阵列。莫尔超晶格中可切换的自旋及铁电阵列为二维高密度非易失性存储器的结构设计奠定了理论基础。

D02-38

新型干涉式原子力显微镜：纳米压电铁电性质的定量测试

竺仁*

牛津仪器科技（上海）有限公司

原子力显微镜（AFM）的 PFM 模式是在微纳尺度下表征材料机电耦合特性的重要工具。然而，传统 PFM 技术的测量原理，使之容易受到形貌和静电力的影响，面内和面外的信号也可能发生串扰，因此并不擅长做定量表征。

为了提升 PFM 定量测试的能力，此次报告将会介绍一种新型的 AFM 检测技术：正交相位差分干涉（QPDI）。QPDI 能够免疫传统 PFM 测量中的干扰因素，测量样品表面真实的压电形变。它的本底噪声通常能够比传统 AFM 低 10 倍以上，适合表征弱响应的压电铁电材料。由于它基于干涉原理，因此可以通过光波长精确校准形变量。QPDI 技术的这些优点结合在一起，使得 PFM 的测量结果更加准确和可重复。

D02-39

一种关联铁磁极化金属的设计与研究

张建兵、于浦*

清华大学物理系

电极化与金属性共存的极化金属，由于其在功能物性上的潜力受到众多关注。类比于具有磁电耦合效应的多铁性金属，将磁性进一步引入到极化金属中有望带来新的功能物性，然而目前本征铁磁极化金属体系极其匮乏。在此，我们成功地设计和实现了一种由单层 CoO_4 四面体和双层 CoO_6 八面体交替堆垛构成过渡金属氧化物 $\text{Ca}_3\text{Co}_3\text{O}_8$ ，在其中实现了铁磁、电极化和金属性的和谐共存。 $\text{Ca}_3\text{Co}_3\text{O}_8$ 中的空间和时间反演对称性的同时破缺和相互耦合，使得材料产生了零磁场下的非互易电阻特性与强鲁棒性的拓扑霍尔

效应。该工作不仅为磁电耦合这一重要功能物性的研究提供了宝贵的材料体系，也为关联氧化物的设计开辟了新的研究思路。

D02-40

二维铁性材料生长及信息功能器件应用

薛武红、许小红*

山西师范大学

大数据、物联网、人工智能时代，需要开发新型的功能材料，发展下一代超快、低能耗、非易失、多态存储器 and 新的存算架构（存内运算），以解决冯诺依曼架构带来的“存储墙”和“功耗墙”问题。作为新的功能材料，二维铁性材料具有反演对称性破缺，强的自旋/电荷自发极化以及极化的双重稳定性和可逆性，易于被外场调控，能够应用于后摩尔时代下的信息存储和处理。本报告将围绕二维铁性材料展开，涉及材料生长，铁性调控，器件应用。1）利用铁电材料 CuInP_2S_6 的铁电极化和 Cu^+ 离子长程迁移，在单一材料器件中实现数字存储和突触模拟；2）构建二维全范德华铁电异质结，利用光、电诱导铁电极化翻转在单一器件中实现多态存储和感存算神经形态视觉功能；3）利用 CVD 技术在云母片上实现了二维 γ , ϵ - Fe_2O_3 的外延可控生长，且横向尺寸可达几十微米，突破其粒径增大时热力学不稳定的局限，使利用其超高居里温度，开发功能应用成为可能。

References:

1. Wenjuan Ci, Wuhong Xue(薛武红),* Peng Wang, Wenhui Yin, Xiaoling Wang, Lei Shi, Peng Zhou,* Xiaohong Xu* All-in-one Optoelectronic Neuristor Based on full-vdW Two-terminal Ferroelectric p-n Heterojunction. Adv. Func. Mater. 2305822 (2023).
2. Wenjuan Ci, Peng Wang, Wuhong Xue(薛武红),* Hongtao Yuan, Xiaohong Xu,* Engineering Ferroelectric/Ion-Modulated Conductance in 2D vdW CuInP_2S_6 for Non-Volatile Digital Memory and Artificial Synapse. Adv. Func. Mater. 2305822 (2023).
3. Peng Wang, Jie Li, Wuhong Xue(薛武红),* Wenjuan Ci, Fengxian Jiang, Lei Shi, Feichi Zhou,* Peng Zhou,* and Xiaohong Xu,* Integrated In-Memory Sensor and Computing of Artificial Vision Based on Full-vdW Optoelectronic Ferroelectric Field-Effect Transistor. Adv. Sci. 2305679 (2023).
4. Tao Wang, Zhiwei Fan, Wuhong Xue(薛武红),* Huali Yang*, Run-Wei Li, and Xiaohong Xu,* Controlled Growth and Size-Dependent Magnetic Domain States of 2D γ - Fe_2O_3 . Nano Lett. 23, 10498-10504 (2023).
5. Qitao Jiang, Huali Yang, Wuhong Xue(薛武红),* Ruilong Yang, Jianlei Shen, Xueying Zhang, Run-Wei Li, and Xiaohong Xu,* Controlled Growth of Submillimeter-Scale Cr_5Te_8 Nanosheets and the Domain Wall Nucleation Governed Magnetization Reversal Process. Nano Lett. 4, 1246-1253 (2024).

D02-41

铁谷材料与多铁耦合

童文旖*

华东师范大学

近年来以研究固体布洛赫电子的能谷为核心的“谷电子学”引起了广泛的关注。谷电子材料通过调节谷自由度编码和处理信息，在下一代信息存储器件 中极具应用潜力。谷自由度与多种铁性序参量相互耦合，可以实现非易失的信息存储，这同时促进了谷物理和多铁性物理的发展。

基于对铁性材料体系的研究经验，我们率先发现了一类具有自发谷极化的谷电子学材料，提出了铁谷体的概念，在这类二维六角晶格体系铁谷体中，存在铁磁与铁谷的耦合；在以单层 GeSe 为代表的第四主族单硫族化合物中，我们发现面内铁电性的引入可打破谷间的四重空间反演对称性，从而自发谷极化，诱导出铁谷态。正交晶格中铁电性与铁谷性耦合，为利用低能电学手段实现对谷自由度的调控提供了可能；

通过电子间交换关联作用的调节,我们实现了半谷金属态,即一个能谷处于金属态,而另一不等价能谷处于半导体特性,这一全新的物态,并发现了反常霍尔效应。拓扑与谷电子学的碰撞,对实现低耗散的谷电子传输非常关键;以往的研究表明本征铁谷体需要同时具有铁磁性或铁电性,我们证明了,谷极化可以同时存在于具有时间和空间反演对称性的体系中。特定的层间滑移可诱导铁谷性,由于铁弹性与铁谷性的耦合,可利用切应力来切换铁谷状态。

这一系列研究工作不仅契合当今电子学研究的发展潮流,即利用低能耗、非破坏性的电场控制电子的自由度,更囊括着极深的物理内涵。这些工作将帮助我们本质上去理解自发谷极化的诱导机制,并考虑铁谷性、铁电性乃至铁磁性等多重铁性之间的耦合,对于多铁性理论的发展及其与谷电子学领域的融合都具有积极的推进意义。在应用层面,也将为电控信息记录元器件、电控光学元器件等下一代新型功能器件的实现夯实理论基础。

D02-42

氮化物半导体铁电性质的第一性原理研究

唐刚*、王世豪、宋思宇、洪家旺
北京理工大学

氮化物半导体材料因其在通信和信息领域的重要性而备受关注。与氧化物半导体相比,氮化物半导体具有以下优势:一是氮的电负性和混合离子共价化学键特性使得氮化物半导体的带隙通常较小;二是氮阴离子(金属阳离子)的高负(正)价态有利于产生较大的极化值。因此,开发新型氮化物半导体铁电体并揭示其铁电机理,以拓展其在铁电光伏、存储、传感器等器件领域的应用,具有重要的科学意义。我们对三类氮化物材料进行了研究,包括二元 SbN、三元纤锌矿型氮化物半导体和 A 位有序的四元氮化物钙钛矿。我们对它们的铁电性能进行了全面分析和铁电机理研究,并与传统的氧化物钙钛矿和卤化物钙钛矿进行了对比。计算结果表明,这些材料表现出显著的大铁电极化值,并且具有不同于氧化物钙钛矿体系的铁电机理。我们的研究为未来新型氮化物半导体在铁电应用方面提供了有价值的理论指导。

D02-43

铁电极化拓扑畴的构筑及调控

高兴森*
华南师范大学

铁电极化拓扑畴(如流量闭合的涡旋畴、中心畴、斯格明子等)蕴含着丰富的新兴效应和新功能(小尺度、拓扑保护、可外场调控、导电性),在未来纳米电子器件具广泛的应用潜力,也因此衍生出极化拓扑电子学这一领域。为了开发新型极化拓扑器件,需要实现拓扑畴的可控制造,以及拓扑构型和及其功能的精准调控。这里将汇报课题组近年在铁电纳米岛和薄膜中极化拓扑畴的制备与调控工作。包括,在高质量 BiFeO₃ 纳米岛阵列内的中心型和涡旋型拓扑畴的形成及调控, PbTiO₃ 纳米岛内复杂性拓扑以及气氛退火诱导拓扑畴构型的改变,以及电荷、挠曲电等效效应竞争及协同作用从而影响拓扑畴构型的机制。此外,还展示了极化拓扑畴的导电态与拓扑构型的构效关系,并用于构筑新概念极化拓扑信息器件的例子。

D02-44

多铁性薄膜中的拓扑畴研究

陈德杨*
华南师范大学

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 BiFeO_3 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，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。这些研究为基于畴壁器件的研发提供了材料基础。

D02-45

低维铁电极化与多序参量耦合的理论研究

张俊杰*

东南大学

铁电材料具有自发的电极化，并在外加电场的作用下可以被反转。由于其多场响应的特性，铁电材料在信息存储、通讯、自旋电子学、驱动、等领域有广泛的应用前景。近年来，铁电领域的发展逐渐突破传统，在二维和一维体系下实现了稳定的铁电极化，并且涌现了一批新型的低维铁电材料。我们基于物理模型分析和第一性原理计算，探讨了铁电极化与多序参量间的耦合与调控，极大丰富了铁电材料的应用场景。在本报告中，我将重点讨论：1) 二维铁电异质结中电子拓扑和铁电极化之间的耦合[1]；2) 二维铁电材料中应力梯度和铁电极化之间的耦合与调控[2]。

参考文献：

[1] Heterobilayer with ferroelectric switching of topological state, Nano Lett. 21, 785–790 (2021)

[2] Flexo-Ferroelectricity and a Work Cycle of a Two-Dimensional-Monolayer Actuator', ACS nano 17, 5121-5128 (2023)

D02-46

准一维滑移铁电

丁宁*

东南大学

滑移铁电的概念最初用于揭示非极性范德华层状材料中特殊堆叠方式诱发的面外铁电极化。然而，这一概念可以拓展到其他维度。我们理论预测 NbI_4 范德华块体为准一维滑移铁电体，极化大小为 $0.11 \mu\text{C}/\text{cm}^2$ ，极化垂直于 Nb-Nb 链的方向。研究表明沿着链方向的链间滑移是能量最低的铁电翻转路径，并且其他路径例如改变 Nb 离子之间的皮尔斯畸变的相位也能实现铁电极化翻转。并且，当静水压达到 10 GPa 时， NbI_4 的极化可以扩大 82%，超过这个压强，体系变为极性金属。当压强进一步增大，超过 16 GPa，体系变为非极性反铁磁金属态。另外，负压电特性也被理论预测。

墙报

D02-P01

罗马面型拓扑多铁性的第一性原理验证

王子文、董帅*

东南大学物理学院

近年来, 研究者们发现拓扑学与凝聚态物理有着广泛的联系, 许多新型的效应和概念也被相继提出。例如, 量子霍尔效应, 拓扑绝缘体, 拓扑半金属等。此外, 实空间中的自旋分布与电极化分布也被证实可以形成拓扑实体或者缺陷, 如磁斯格明子, 半子, 极性斯格明子等。最近, 在四倍体钙钛矿 $\text{TbMn}_3\text{Cr}_4\text{O}_{12}$ 这类多铁性材料当中, 研究者提出了一种新型的拓扑物理性质——拓扑多铁性。多铁性材料 $\text{TbMn}_3\text{Cr}_4\text{O}_{12}$ 中的极化起源于其特殊的双 G 型反铁磁结构, 当自旋结构在空间中转动, 其极化也会随之变化, 并且当自旋转动遍历整个空间时, 极化演变的轨迹会构成一种具有几何拓扑属性的二维流形曲面——罗马面。然而, 困于当前单晶样品的制备以及极小的极化值 ($\sim 33 \text{ uC/m}^2$ 对于多晶样品), 实验验证罗马面型拓扑多铁性较为困难。基于此, 我们从第一性原理计算 (DFT) 出发, 验证了 $\text{TbMn}_3\text{Cr}_4\text{O}_{12}$ 当中的罗马面型的拓扑多铁性, 并且分析了其极化弱的原因, 预测了一种具有相似的罗马面拓扑多铁性并且极化显著增大的 $\text{BaMn}_3\text{Re}_4\text{O}_{12}$ 结构。我们的工作为拓扑多铁性这一全新的概念提供了有力的支撑。

D02-P02

Fe 掺杂 CuCrP_2S_6 单晶的磁性和极性的研究

邢瑜*

东南大学

金属硫族 (硒族) 磷酸盐, $\text{MIMIIIP}_2\text{X}_6$ ($\text{MI}=\text{Ag, Cu}$, $\text{MIII}=\text{V, Cr, In, Sc}$), 由于其优异的物理性质近年来受到了广泛的研究, 相比于过渡金属硫化物, 这类磷酸盐样品具有更宽的带隙, 更好的光吸收和独特的本征磁性。二维金属硫代磷酸盐 CuCrP_2S_6 是在低温下同时具有反铁电性和反铁磁性的多铁材料, 它的电磁各向异性, 自旋诱导的铁电性等都得到了广泛的研究。这种材料的另一个优点是掺杂提供了更多的位置, 为了调控磁性, 我们利用化学气相运输的方法, 生长出一系列铁掺杂的 $\text{CuCr}_{1-x}\text{Fe}_x\text{P}_2\text{S}_6$ 单晶样品, 并研究了该体系样品的磁性和二次谐波信号的变化。铁元素的掺杂, 改变了样品的磁矩大小, 使样品从最初的反铁磁态转变为亚铁磁态, 并增强了各向异性。室温二次谐波表明, 当 Fe 掺杂比例小于 0.5 时, 有明显的信号产生, 说明样品具有极性, 且对于薄层样品, 信号随着层数奇偶的变化交替出现。单晶 X 射线衍射结果显示, 铁掺杂比例在 0.5 以上和以下属于不同的空间群。我们的工作首次研究了掺杂 CuCrP_2S_6 样品的磁性和对称破缺引起的二次谐波信号的变化, 这将为多铁材料低功耗, 高灵敏, 非易失的存储提供更多的可能。

D02-P03

层状反铁磁单层 MXene 材料的电磁调控

杨鑫雨、丁宁、陈军、王子文、安明、董帅*

东南大学

具有面内铁磁与层间反铁磁耦合 (A-AFM) 的层状磁性材料, 在借助场效应实现电控磁方面具有显著优势。目前, 大部分 A 型反铁磁都是在人为构建的异质结构中发现的, 其电控磁研究受限于微弱的层间范德华作用以及敏感的堆垛构型影响。然而, 在实际材料中天然的且稳定的低维磁性材料极其罕见。本文预测单层的 Cr_2CCl_2 MXene 材料具有稳定的层状反铁磁序, 其磁转变温度 ($\sim 1300 \text{ K}$) 高于室温。基于第一性原理计算, 我们发现 Cr_2CCl_2 单层可以与场效应发生很好的耦合。在电场作用下, 电子云发生畸变, 破坏了 Cr_2CCl_2 中上层和下层铬原子反演对称性, 进而诱导出能带结构的塞曼式劈裂。此外, 电场被近邻的具有非易失性的铁电层取代, 也可以实现磁电效应。更有趣的是, 本文首次在这种零磁化的共线反铁磁单层中发现了磁光克尔信号, 这为反铁磁材料的电调控和磁光研究提供了有效途径。

D02-P04

双叶黎曼面型逆磁电效应

周颖、叶浩桑、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的 $p-d$ 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-P05**二维非共线反铁磁 $MM'X_6$ 材料的磁光克尔效应**

周迪*

东南大学

磁光克尔效应 (MOKE) 表征光与磁性介质作用时偏振态的变化，被广泛地用于探测材料的磁性。MOKE 信号的出现依赖于磁对称性，通过打破 TI 对称性可以在反铁磁中激活 MOKE，然而现阶段对二维单层材料中的反铁磁 MOKE 研究十分有限。我们通过密度泛函理论计算了具有三角晶格结构的 $MM'X_6$ ($M=\text{Hf, Zr}$, $M'=\text{Fe, Mn}$) 单层，确定了其磁基态为 Y 型非共线反铁磁。在 HfFeCl_6 单层中可以观察到明显的 Kerr 信号，其物理起源为 HfFeCl_6 单层中的非共线反铁磁序破坏了时间、空间联合反演对称性 (TI)，使光导率张量的非对角项 σ_{xy} 非零，从而产生 MOKE 信号。通过镜面操作 M_x 实现晶格手性、自旋手性同时翻转，Kerr 角也发生翻转。 M_x 操作可以等效于 $C_{2z}M_zT$ 联合操作，实现与时间反演操作下相同的 Kerr 角翻转。晶格手性与自旋手性排列组合构成四种手性构型，可以产生四种不同的 MOKE 信号，表明非磁性原子对 MOKE 产生影响。我们的研究表明，净磁化强度为零的 Y 型非共线反铁磁材料 $MM'X_6$ 单层中存在 MOKE，并受到非磁性原子的影响，突破了 MOKE 的传统认知。

D02-P06**Interfacial coupling-induced multiple phase transition in LSMO**

Zhaoyang Wang*, Zihao Zhu, Hui Yang, Bangmin Zhang, Yue Zheng

School of Physics, Sun Yat sen University

In functional oxide heterostructures, asymmetric engineering can serve as an effective means to regulate the performance of thin films. Especially at the interface of heterostructures, asymmetric structures can affect the crystal structure, electronic structure, and orbital occupancy of thin films. In this work, different types of asymmetric interfaces were introduced into the BTO/LSMO heterostructure through different growth sequence. It was found that different types of films both have magnetic phase transition points in three temperature ranges. And, attribute it to the differences in interface, bulk, and surface of LSMO. By changing the thickness of the LSMO layer and adjusting the contribution of the interface in the thin film, the high-temperature phase transition can be attributed to the bulk phase. Through XPS testing, it was found that the effect of BTO on LSMO only stays within the interface range. Based on the variation of T_c value, the phase transition in the middle temperature range is attributed to the surface phase of LSMO, while the phase transition in the low temperature range is attributed to the interface phase of LSMO. Finally, a model was established to investigate the effects of structure and charge on LSMO. The study of magnetic phase transitions through asymmetric structures is of certain significance for

understanding the influence of interfaces and surfaces on magnetism.

D02-P07

准一维卤氧化物 NbOX₃ 中堆叠依赖 的铁电性和反铁电性

孙文聪*

东南大学

低维铁电和极性材料因其迷人的物理特性和潜在的应用前景而备受关注。目前，一些二维铁电材料已经被理论预测和实验验证，但是已知的一维(1D)铁电(FE)/反铁电(AFE)材料仍然很少。因此，迫切需要探索(准)1D FE/AFE 材料，特别是那些易于合成和操作的材料。基于第一性原理计算，本文研究了一类典型的范德华准一维铁电体：双链氧卤化物 NbOX₃ (X = Cl, Br, I)的堆叠模式和极性性质。双链几何构型允许多种链间/链内排列方式。双链间的不同堆叠方式形成了四方和单斜晶系，其中存在多种铁电相和反铁电相。这些相的能量相近，因此实际材料可能是多相共存的，并且静水压力可以有效地驱动结构相变。此外，它们铁电相的自发极化和压电性显著，分别可与商业使用的铁电 BaTiO₃ 和压电 ZnO 相媲美。本文证明了范德华 NbOX₃ 体系是研究准一维铁电性和反铁电性有前景的材料 [1]。

参考文献：

[1] W. C. Sun, N. Ding, H.-P. You, J. Peng, S.-S. Wang, S. Dong, Phys. Rev. Mater. 6, 104404 (2022).

基金项目：国家自然科学基金项目 (NO. 11834002 和 NO. 12104089) 科学基金 (NO. BK20200345)

D02-P08

磁斯格明子的多功能电调控

申中、董帅*、姚晓燕

东南大学

以节能的方式对 skyrmion 和 bimeron 这类磁拓扑结构进行多功能调控对自旋电子应用来说是至关重要的，但仍然是一个大的挑战。借助第一性原理计算和微磁模拟，在范德华磁电 CrISe/In₂Se₃ 异质结中，作为自旋电子装置中信息读写关键操作的 skyrmion/bimeron 的产生和湮灭可以通过垂直应变或电场实现，而不需要外磁场。此外，skyrmion-bimeron 转换、尺寸调控，以及磁化从面内到面外的可逆翻转也能够通过无磁场的方式实现。不仅如此，拓扑荷和形态可以被小磁场精准控制。我们发现在这种节能的多功能调控中，强的 DM 相互作用和在大窗口范围内可调的磁各向异性性能扮演着至关重要的角色，并进一步揭示了其背后的物理机制。我们的工作预测 CrISe/In₂Se₃ 异质结是解决自旋电子应用所面临挑战的理想平台，并且从理论上对磁拓扑结构的低能耗多功能调控给予指导。

D02-P09

点缺陷掺杂对弛豫铁电体形成影响的相场模拟研究

洪政凯²、柯小琴*¹

1. 西安交通大学

2. 西北有色金属研究院

相比于正常铁电体，弛豫铁电体和再进入弛豫铁电体由于其高的压电系数、优异的介电温度稳定性、小滞后下的大电致应变、高的储能密度等特性已经成为现代社会航空航天、无人驾驶等尖端技术领域高速发展的关键材料。无论是弛豫铁电体还是再进入弛豫铁电体，都是通过正常铁电体中掺杂大量的点缺陷而得到。但是点缺陷如何影响弛豫铁电体和再进入弛豫铁电体的形成尚未理清。本研究利用相场动力学模拟手段，基于点缺陷产生的纳米尺度成分不均匀所引起的三种局部效应(局部相变温度效应、局部内电场效应和局部相变路径效应)，重现了弛豫铁电体以及再进入弛豫铁电体独特的微观电畴结构和宏观性能，

揭示了点缺陷对弛豫铁电体三个特征温度(T_B 、 T^* 和 T_f)的出现以及再进入弛豫铁电体形成的影响机制。这项研究可为设计更多具有优异性能的铁电材料提供理论指导。

D02-P10

二维缺陷半导体 α -Ga₂Se₃ 铁电性的发现

姜琦涛、薛武红、许小红*

山西师范大学

二维(2D)铁电材料在原子层依然具有强的室温铁电性,加之其独特的半导体特性,在铁电器件小型化以及解决传统铁电材料面临的问题方面具有很大的潜力,成为当前的研究热点。这些材料通常具有极性点群。然而在非极性 2D 材料中引入极性使其具有铁电性,从而实现更多功能和更灵活的调控,仍然是一个挑战。

本工作通过理论和实验相结合,首次发现在立方相 α -Ga₂Se₃ 本征缺陷半导体中位于[100]方向非对称位点的 Ga 空位可以使其产生极性和稳定的自发极化。第一性原理计算发现在立方相 α -Ga₂Se₃[100]方向的非对称位点产生 Ga 空位会诱导极性产生自发极化,极化方向为[100]; Ga 空位在相邻非对称位点的位移能够使极化发生可逆反转,具有可接受的扩散势垒(~ 0.78 eV)。实验上,通过空间限域的物理气相沉积法,成功制备了超薄立方相 α -Ga₂Se₃ 纳米片。样品沿着(111)面择优生长,且具有明显的原子空位。原理上这些样品应该具有面内和面外铁电性。PFM 结果显示相反电压处理的样品区域具有明显的 PFM 相位对比度,同时,样品具有接近 180 度的相位反转和对应的蝴蝶曲线,这些结果证实所生长的 2D α -Ga₂Se₃ 纳米片具有面外铁电性,而且铁电性在 4 nm 的超薄样品中依然存在。此外,2D α -Ga₂Se₃ 基平面器件出现明显的双向整流特征和电滞回线,进一步证明样品还具有面内铁电性,变温的电滞回线和二次谐波说明该铁电材料的居里温度高达 450 K。该项研究工作不仅为 2D 本征缺陷半导体的铁电性的理论和实验研究提供了一个激动人心的主题,而且为超高密度存储以及多功能光电器件挖掘了候选材料。

D02-P11

挠曲电效应诱导的自支撑钙钛矿薄膜反常屈曲行为

王廷钧、伦应焯、洪家旺*

北京理工大学

屈曲引导的柔性电子器件由于其优异特性而受到了广泛关注。厚度仅有十几个原子层的自支撑氧化物薄膜的出现使纳米级屈曲引导的柔性电子器件成为可能。然而,自支撑钙钛矿薄膜的纳米屈曲行为的研究依旧缺乏。在本文中,我们分别制备了厚度为 7 nm 的钽酸锶(SRO)和钛酸钡(BTO)自支撑薄膜并将其转移到预拉伸的柔性基底上。在释放预拉伸应变后,自支撑薄膜会发生力学失稳从而发生屈曲变形。实验结果发现,介电 BTO 自支撑薄膜具有更好的抗失稳特性,即需要更大的预应变才能诱导屈曲变形。此外,对于屈曲 BTO 薄膜,其屈曲幅值也远小于经典力学给出的理论值。为了探究这一反常屈曲行为,我们建立了考虑挠曲电效应的机电耦合模型。结果表明,屈曲薄膜中高达 106 m⁻¹ 的应变梯度会诱导巨大的挠曲电效应。挠曲电效应显著抑制了自支撑薄膜的屈曲变形,使临界应变增加了近十倍,屈曲幅度减少了一半。同时,挠曲电效应驱动了与尺寸相关的屈曲行为,这与经典的弹性屈曲不同,尺寸较小的薄膜表现出较大的屈曲阻力。上述理论发现可以准确的描述实验结果。这项工作强调了挠曲电在纳米级屈曲薄膜中的关键作用,并为基于屈曲薄膜的挠曲电器件的设计提供了指导。

D02-P12

全可见光吸收的光敏铁电材料 Sn₂P₂S₆ 具有增强的畴壁导电性

邓建明^{*1}、龚伟平¹、王学云²、洪家旺²

1. 惠州学院
2. 北京理工大学

近年来, 光学调控成为一种重要的操纵宏观和微观铁电性能的非接触调控方式, 为光电子器件的发展奠定了基础。然而, 目前大多数功能铁电材料的光学调控都受到其本征带隙及有限的可见光吸收特性的限制。针对上述铁电材料中光学调控存在的限制, 我们报道了一种全可见光吸收(300–800 nm)的非氧化物铁电单晶材料 Sn₂P₂S₆。结合缺陷分析和第一性原理计算方法揭示了光激发 Sn 离子的歧化反应和乌尔巴赫带尾增强可见光吸收的机制, 这与 Sn₂P₂S₆ 的本征带隙并不矛盾。有趣的是, 我们在非氧化物铁电体中观测到导电的畴壁, 而且歧化反应引起光致畴壁的导电性显著增强。此外, 光照条件下相反取向的铁电畴展现出明显的导电性差异, 这是由电畴表面的异号电荷引起界面能带弯曲所致。该工作为全可见光吸收铁电材料中的电畴和畴壁的导电行为以及改善光电子学性能提供了一个全新的思路。

D02-P13

氢氧化物单层 γ -XOOH (X = Al、Ga 和 In) 的铁电和负压电性

程旭丽、任伟*

Shanghai University

Two-dimensional (2D) multiferroic materials with coexisting ferroelasticity (FA) and ferroelectricity (FE) have potential applications in high-density data storage and sonar detectors. Here, based on first-principles calculations, we predict a series of stable 2D FA-FE multiferroic structures, namely γ -XOOH (X = Al, Ga, and In) monolayers. By analyzing the lattice symmetry and orientational distribution of hydroxyls, we find that XOOH monolayers possess both in-plane ferroelastic and ferroelectric polarization, as well as antiferroelectric ordering caused by the anti-parallel alignment of hydroxyls. Interestingly, the perpendicular reorientation of in-plane FE polarization accompanies 90° ferroelastic switching. Besides, they show an unusual negative transverse piezoelectric effect originated from the clamping-ion term. The multiferroic properties of the XOOH monolayers provide an excellent platform to study electroelastic effects