

Research Paper

2D Janus MnSX (X= Cl, Br, I) Monolayers with Intrinsic Ferromagnetism and Half-Metallicity ¹

Maral Azmoonfar^{*2}, Mahmood Rezaei Roknabadi³ and Seyyed Mohsen Modarresi⁴

Received: 2023.09.09

Revised: 2024.01.25

Accepted: 2024.03.07

Abstract

Using the first-principles calculations, we have investigated the structural, electronic, and magnetic properties of the two-dimensional Janus MnSX (X= Cl, Br, I) monolayers. The dynamical stability for the 2D Janus monolayers has been confirmed by phonon spectrum calculation. Also, all manganese sulfide halide monolayers show half-metal with 100% spin polarization and a wide half-metallic gap. The noncollinear DFT calculations indicate that the two-dimensional Janus monolayers are ferromagnetically ordered systems and the preferred direction of magnetization lies in-plane of Janus manganese sulfide halide monolayers. The magnetic anisotropy energy increases from MnSCl to MnSI, related to the strong spin-orbit coupling at the I atom and the increased asymmetry between the sulfide and halide planes. The dispersion relation of magnetic excited states is obtained by applying the linear order Holstein–Primakoff transformation to the anisotropic Heisenberg Hamiltonian. We estimated Curie temperature for the monolayers by a self-consistent calculation of magnetization as a function of temperature. Our study presents a new class of 2D magnetic materials for future spintronics and valleytronics.

Keywords: *Mn Sulfide Halide Monolayers, Ferromagnetic, Magnetic Anisotropy, Curie Temperature.*

¹ <https://doi.org/10.22051/ijap.2024.44911.1350>

² PhD Graduated, Department of Physics, Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad, Iran. (Corresponding Author) Email: ma.azmoonfar@mail.um.ac.ir

³ Professor, Department of Physics, Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad, Iran. Email: roknabad@um.ac.ir

⁴ Assistant Professor, Department of Physics, Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad, Iran. Email: m.modarresi@um.ac.ir



تک‌لایه‌های دوبعدی $MnSX$ ($X= Cl, Br, I$)

با فرومغناطیس ذاتی و نیمه‌فلزی^۱

مارال آزمونفر*^۲، محمود رضایی رکن آبادی^۳ و سید محسن مدرس‌سی سیریدی^۴

تاریخ دریافت: ۱۴۰۲/۰۶/۱۸

تاریخ بازنگری: ۱۴۰۲/۱۱/۰۵

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۲/۱۲/۱۷

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران

دانشکده فیزیک، دانشگاه الزهرا

سال چهاردهم، پیاپی ۳۷، تابستان ۱۴۰۳

صص ۷-۲۲

چکیده:

ویژگی‌های ساختاری، پایداری، ویژگی‌های الکترونی و مغناطیسی تک‌لایه‌های دوبعدی $MnSX$ ($X= Cl, Br, I$) با استفاده از محاسبات اصول اولیه قطبش اسپینی به کمک نظریه تابعی چگالی مورد مطالعه قرار گرفت. با محاسبه طیف فونونی تک‌لایه‌های $MnSX$ منگنز سولفید هالید پایداری دینامیکی آن‌ها تأیید شد. همچنین با مطالعه ساختار الکترونی این تک‌لایه‌های $MnSX$ نشان داده شد که این تک‌لایه‌ها نیمه‌فلز با شکاف نیمه‌فلزی کمابیش بزرگی می‌باشند، که سبب قطبش اسپینی صددرصد در این تک‌لایه‌ها می‌شود. همچنین با محاسبات تابعی چگالی غیرخطی نشان داده شد که تک‌لایه‌های $MnSX$ منگنز سولفید هالید دارای حالت پایه فرومغناطیس می‌باشند و محور آسان مغناطش آنها درون صفحه تک‌لایه‌ها قرار دارد. شدت ناهمسانگردی مغناطیسی تک‌لایه‌های $MnSX$ با افزایش جرم اتمی اتم‌های هالید، به دلیل قوی‌تر شدن جفت-شدگی اسپین-مدار و نامتقارن‌تر شدن ساختار، افزایش می‌یابد. همچنین با معرفی هامیلتونی ناهمسانگرد اسپینی هایزنبرگ و تبدیلات مرتبه اول هولشتین-پریماکوف، دمای کوری این تک‌لایه‌ها به وسیله محاسبات خودسازگار مغناطش به عنوان تابعی از دما تخمین زده شد. یافته‌های نظری بدست آمده در این پژوهش، گروه جدیدی از مواد مغناطیسی دو بعدی برای کاربرد در زمینه اسپین ترونیک را ارائه می‌دهند.

واژگان کلیدی: تک‌لایه‌های منگنز سولفید هالید، فرومغناطیس، ناهمسانگردی مغناطیسی، دمای کوری.

^۱ <https://doi.org/10.22051/ijap.2024.44911.1350>

^۲ دانش آموخته دکتری، گروه فیزیک، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد، ایران (نویسنده مسئول). Email: ma.azmoonfar@mail.um.ac.ir

^۳ استاد، گروه فیزیک، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد، ایران. Email: roknabad@um.ac.ir

^۴ استادیار، گروه فیزیک، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد، ایران. Email: m.modarresi@um.ac.ir



۱. مقدمه

از زمان کشف گرافن تک لایه، مواد وان دروالس دو بعدی مختلفی به دلیل ویژگی‌های منحصر به فرد آنها مورد کاوش قرار گرفته‌اند. از بین انواع رفتار مواد که در مواد دو بعدی مشاهده و مطالعه شده است، تا مدت‌ها نظم مغناطیسی دور برد ذاتی غایب بود. تحقق نظم فرومغناطیس دور برد در بلورهای واندروالس دو بعدی، همراه با ویژگی‌های الکتریکی و نوری قوی‌شان، می‌تواند منجر به کاربردهای مغناطیسی، مغناطوالکتریکی و مغناطونوری جدید شوند. پیش‌بینی می‌شود، طیف گسترده‌ای از ویژگی‌هایی که پیش از این غیرقابل دستیابی بودند، در بلورهای مغناطیسی دو بعدی کشف شوند، که می‌تواند منجر به کاربردهایی چون اسپین ترونیک کم‌مصرف، ارتباطات نوری روی تراشه و محاسبات کوانتومی شوند [۱].

نظریه مرمین-واگنر^۱ برای الگوی هایزنبرگ نشان داد که تقارن‌های پیوسته، یعنی مغناطیس در الگوی هایزنبرگ، در سامانه‌های دو بعدی در دمای بالای نقطه صفر مطلق نمی‌تواند شکسته شوند. چرا که نوسانات گرمایی هر حالت منظم که سعی می‌کند تشکیل شود را از بین می‌برند [۲]. با این حال، در عمل حتی یک ناهمسانگردی مغناطیسی بلوری کوچک، نظم مغناطیسی را در دمای پایین تثبیت می‌کند. منشأ اصلی ناهمسانگردی مغناطیسی بلوری، جفت‌شدن اسپین-مدار در حضور میدان بلوری است [۳ و ۴]. جفت‌شدگی اسپین-مدار^۲ (SOC)، برهم‌کنش الکترومغناطیسی بین اسپین و میدان مغناطیسی ایجاد شده با استفاده از حرکت مداری الکترون می‌باشد. در اتم‌های سنگین این برهم‌کنش قوی‌تر می‌باشد، زیرا میدان مغناطیسی درونی اتم قوی‌تر است. SOC همچنین نقش مهمی در ویژگی‌های الکترونی، نوری و مغناطیسی مواد دارد. از راه جفت‌شدگی اسپین-مدار می‌توان راستای اسپین را به جهت شبکه بلوری قفل کرد که منبع مهمی برای ناهمسانگردی مغناطیسی سامانه می‌باشد. از این رو، برای مشخص کردن انرژی ناهمسانگردی مغناطیسی بلوری یک ماده نیاز به ساختارهای الکترونی بسیار دقیق و رفتار مناسب هامیلتونی جفت‌شدگی اسپین-مدار $(\vec{S} \cdot \vec{\sigma} \propto H^{SOC})$ می‌باشد. بر اساس الگوی برونو^۳، ناهمسانگردی مغناطیسی بلوری متناسب با شدت جفت‌شدگی اسپین-مدار و اختلاف بین تکانه اوربیتالی مغناطیسی عمود بر صفحه و در صفحه تک‌لایه می‌باشد. بنابراین ثابت جفت‌شدگی اسپین-مدار بزرگ، که در عناصر سنگین وجود دارد، کلید بدست آوردن ناهمسانگردی مغناطیسی بلوری بزرگ می‌باشد [۵].

¹ Mermin- Wagner

² Spin- Orbit coupling

³ Bruno model



لادو^۱ و همکارش در سال ۲۰۱۷ به مطالعه منشأ ناهمسانگردی مغناطیسی در تک‌لایه دو بعدی CrI_3 پرداختند. آن‌ها بررسی کردند که انرژی ناهمسانگردی مغناطیسی چگونه با تغییر جفت‌شدگی اسپین-مدار در دو اتم کروم و ید به صورت جداگانه، تغییر می‌کند. نتایج نشان دادند که انرژی ناهمسانگردی مغناطیسی به صورت غالب از جفت‌شدگی اسپین-مدار در اتم‌های ید ناشی می‌شود [۳].

اولین بلور مغناطیسی دو بعدی که اوایل ۲۰۱۷ ساخته شد، CrI_3 با دمای ۴۵ کلوین می‌باشد [۶]. مطالعات تجربی سال‌های کنونی گزارش کرده‌اند که دو تک‌لایه VSe_2 [۷-۹] و $MnSe_2$ [۱۰] از خانواده فلزات واسطه دو کالکوژن^۲ (TMD)، نظم فرومغناطیس در دمای اتاق نشان می‌دهند. تک‌لایه‌های فلزات واسطه دو کالکوژن، دارای فرمول شیمیایی MX_2 می‌باشند. این تک‌لایه‌ها براساس پیکربندی اتمی می‌توانند به صورت همه‌جانبه در دو فاز اصلی، فاز منشوری تریگونال ($1H$) با تقارن گروه نقطه‌ای D_{3h} و فاز اکتاهدرال ($1T$) با تقارن D_{3d} تشکیل شوند [۱۱ و ۱۲]. MX_2 ها از سه صفحه اتمی تشکیل شده‌اند، یک لایه از اتم‌های فلز واسطه که بین دو لایه از اتم‌های کالکوژن پوشانده شده است. هر اتم فلز واسطه به وسیله ۶ اتم کالکوژن همسایه احاطه می‌شود، که یک واحد اکتاهدرال $[MX_6]^{4-}$ را تشکیل می‌دهند. یاخته یک‌ه‌ر دو پیکربندی شامل ۳ اتم می‌باشد. این تک‌لایه‌ها در صفحه به صورت ذاتی نامتقارن هستند و در راستای عمود بر صفحه کاملاً متقارن می‌باشند. در نتیجه ویژگی‌های الکترونی و نوری و مغناطیسی متمایزی نشان می‌دهند [۱۳ و ۱۴].

شکسته شدن تقارن ساختاری خارج از صفحه می‌تواند منجر به پدیده‌های جالبی چون انتقال فاز، فروالکتریکی و مغناطیس شود [۱۵-۱۷]. تقارن خارج از صفحه در تک‌لایه‌های TMD را می‌توان با جایگذاری اتم کالکوژن صفحه پایینی با اتم متفاوت شکست، که به این نوع ساختارها تک‌لایه های ژانوس^۳ می‌گویند. تک‌لایه‌های ژانوس TMD به کمک کنترل استوکیومتری شیمیایی دو اتم کالکوژن با موفقیت ساخته شده‌اند [۱۸-۲۳]. در سال ۲۰۱۷، یک روش مصنوعی برای رشد تک‌لایه‌های ژانوس $MoSSe$ گزارش شد، که تقارن خارج از صفحه به وسیله جایگزین کردن اتم‌های S لایه بالا به صورت کامل با اتم‌های Se، می‌شکند. ساختار ژانوس $MoSSe$ ، مستقیماً با استفاده از میکروسکوپ الکترونی روبشی^۴ و طیف سنجی فوتوالکترون اشعه ایکس وابسته به انرژی^۵ مورد

¹ J L Lado

² Transition- Metal dichalcogenide

³ Janus monolayers

⁴ Scanning transmission electron microscopy

⁵ Energy-dependent X-ray photoelectron spectroscopy



تأیید قرار گرفته است و حضور دوقطبی‌های عمودی به علت الکترون‌گاتیوی متفاوت اتم‌های کالکوژن، نیز اثبات شده است [۲۴ و ۲۵].

برخلاف تک‌لایه‌های TMD متداول، فرمول شیمیایی تک‌لایه‌های ژانوس TMD، به صورت MX_2Y می‌باشد، که M فلز واسطه، X و Y اتم‌های کالکوژن متفاوت می‌باشند. صفحه شامل فلز واسطه توسط دو لایه شامل اتم‌های کالکوژن متفاوت ساندویچ می‌شود. تقارن عمودی شکسته شده از اختلاف الکترون‌گاتیوی اتم‌های X و Y سرچشمه می‌گیرد و سبب ایجاد میدان الکتریکی عمودی می‌شود. در نتیجه موجب پدیدار شدن ویژگی‌های الکترونی، مغناطیسی و نوری جالب می‌شود و فرصت‌های جدید برای کاربردهای آینده ارائه می‌دهد [۲۶-۲۹]. معرفی تک‌لایه‌های جدید با فرومغناطیس ذاتی یکی از چالش‌های فیزیک مواد دوبعدی است. روش‌های محاسباتی مختلفی برای مطالعه ویژگی‌های الکتریکی و مغناطیسی مواد دوبعدی از جمله روش تنگ بست^۱ (TB)، نظریه تابعی چگالی^۲ (DFT) و مونت کارلوی کوانتومی^۳ (QMC) وجود دارند. در این پژوهش با استفاده از محاسبات اصول اولیه به وسیله نظریه تابعی چگالی برای اولین بار ساختار، پایداری، و ویژگی‌های الکترونی و مغناطیسی تک‌لایه‌های ژانوس منگنز سولفید هالید مورد مطالعه قرار گرفت. محاسبات نشان دادند که تک‌لایه‌های ژانوس منگنز سولفید هالید از نظر دینامیکی و انرژی پایداری می‌باشند و این تک‌لایه‌های ژانوس نیم‌فلز و دارای فرومغناطیس ذاتی با ناهمسانگردی درون-صفحه‌ای می‌باشند.

۲. الگو و روش محاسبات

محاسبات اصول اولیه قطبش اسپینی به وسیله نظریه تابعی چگالی با استفاده از کد کوانتوم اسپرسو^۴ [۳۰] انجام شد. برای توصیف برهم‌کنش همبستگی - تبادلی میان الکترون‌ها از تقریب شیب تعمیم یافته^۵ (GGA) با تابعی PBE^۶ استفاده شد. از آنجایی که مبنای این تقریب، تقریب گاز همگن و رفتار غیرجایگزیده الکترون‌ها می‌باشد، از این رو، این تقریب در بررسی دستگاه‌های همبسته قوی موفق عمل نمی‌کند. بنابراین برای بررسی رفتار حقیقی الکترون‌های جایگزیده در اوربیتال‌های d و f از رهیافت DFT با کمیت هابارد^۷ U (DFT+U) استفاده می‌شود [۱۳ و ۱۴]، که دافعه کولنی

¹ Tight-binding

² Density functional theory

³ Quantum Monte Carlo

⁴ Quantum ESPRESSO

⁵ Generalized gradient approximation

⁶ Perdew-Burke Ernzerhof

⁷ Hubbard



درون جایگاهی الکترون- الکترون مؤثری برای اوربیتال‌های d اعمال می‌کند. برای در نظر گرفتن اثر همبستگی قوی الکترون‌ها در اوربیتال‌های d از روش $GGA+U$ با $U=3/9$ eV برای اتم Mn که در گزارش‌های قبلی امتحان شده است [۳۱] استفاده شد. ساختارهای بهینه شده به کمک مشخص کردن تمام موقعیت‌های اتمی و پارامترهای شبکه با استفاده از الگوریتم شبه نیوتن $BFGS^1$ تا زمانی که تمام نیروهای وارده روی هر اتم کوچکتر از 0.1 eV/Å باشد، بدست آمد. شبکه‌بندی منطقه بریلوئن توسط روش مونخورست- پک^۲ انجام شد و بهینه تعداد نقاط K برای یاخته $1 \times 25 \times 25$ و برای ابر یاخته دو در دو $1 \times 9 \times 9$ در نظر گرفته شد. بهینه انرژی قطع برای بسط تابع موج بر حسب امواج تخت برابر 108 eV می‌باشد. میزان همگرایی برای به کمینه رساندن انرژی کل بین دو مرحله متوالی 10^{-9} الکترون ولت تنظیم شده است. همچنین شرایط مرزی تناوبی در دو جهت هم‌راستا با صفحه لحاظ شده و به منظور پرهیز از برهم کنش بین تصویر یاخته یک‌ه‌ای تناوبی، خلای به فاصله 15 آنگستروم در راستای عمود بر صفحه دو بعدی در نظر گرفته شده است. منحنی پاشندگی فونونی این مواد را با استفاده از نظریه اختلالی تابعی چگالی^۳ (DFPT) رسم شد [۳۲]. برهم کنش بین اسپین-ها بر اساس الگوی ناهمسانگرد هایزنبرگ بیان می‌شود:

$$H = -\frac{J}{2} \sum_{i,j} S_i \cdot S_j - \frac{\delta}{2} \sum_{i,j} (S_i^z S_j^z) - \frac{\Gamma}{2} \sum_{i,j} (S_i^x S_j^x - S_i^y S_j^y) \quad (1)$$

که J پارامتر جفت‌شدگی تبادل بین S_i و S_j است، جمله دوم ناهمسانگردی مغناطیسی عمود بر صفحه را نشان می‌دهد که $\delta > 0$ با محور آسان خارج از صفحه متناظر می‌باشد و اگر $\delta < 0$ محور آسان در صفحه واقع است، و جمله سوم ناهمسانگردی مغناطیسی در صفحه XY رو بیان می‌کند و Γ کمیت برهم کنش بین اسپین‌ها در صفحه می‌باشد. این کمیت‌ها را می‌توان با استفاده از نگاشت محاسبات غیر خطی اصول اولیه محاسبه کرد [۳۳]:

$$\begin{aligned} J + \delta &= (E_{AFM,z} - E_{FM,z}) / 4S^2 \\ \delta &= (E_{FM,y} + E_{FM,x} - 2E_{FM,z}) / 6S^2 \\ \Gamma &= 2(E_{FM,x+30^\circ} - E_{FM,x}) / 3S^2 \end{aligned} \quad (2)$$

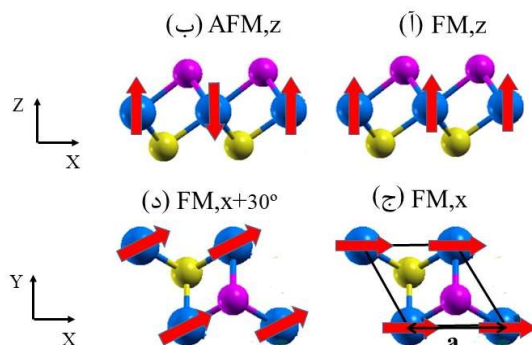
¹ Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno

² Monkhorst-Pack

³ Density functional perturbation theory



که در آن‌ها، S اسپین اتم Mn و $E_{FM,\alpha}$ و $E_{AFM,\beta}$ انرژی پیکربندی فرومغناطیس (آنتی فرومغناطیس) با گشتاور مغناطیسی در راستای α (β) می‌باشند که در شکل (۱) نشان داده شده است.



شکل ۱ پیکربندی اسپین برای تعیین کمیت‌های هامیلتونی اسپینی ناهمسانگرد. نمای جانبی (آ و ب) و بالایی (ج و د) تک لایه‌های $MnSX$ در فاز $1T$ ؛ کره‌های آبی، زرد و بنفش به ترتیب مربوط به اتم‌های S ، Mn و X می‌باشد. (ج) یاخته یکه ساختار و پارامتر شبکه نشان داده شده است.

برای بررسی پایداری گرمایی نظم مغناطیسی، هامیلتونی هایزنبرگ (رابطه (۱)) به وسیله تبدیلات هولشتین- پریماکوف^۱ به یک هامیلتونی بوزونی تبدیل می‌شود. برای حالتی که محور آسان در صفحه قرار دارد، عملگرهای اسپینی به این صورت نوشته می‌شود [۳۳]:

$$\begin{aligned} S_i^+ &= a_i^\dagger \sqrt{2S - a_i^\dagger a_i} \\ S_i^- &= \sqrt{2S - a_i^\dagger a_i} a_i \\ S_i^x &= a_i^\dagger a_i - S \end{aligned} \quad (۳)$$

در حالی که، عملگرهای نردبانی اسپینی است. با در نظر گفتن تقریب مرتبه اول تبدیلات هولشتین- پریماکوف، یعنی $S_i^+ \approx a_i^\dagger \sqrt{2S}$ و $S_i^- \approx a_i \sqrt{2S}$ ، و بعد از تبدیل فوریه عملگرهای خلق و فنا، هامیلتونی به صورت زیر باز نویسی می‌شود.

$$H = E_0 + \sum_k \hbar \omega_k a_k^\dagger a_k + \sum_k \Delta_k (a_k a_{-k} + a_k^\dagger a_{-k}^\dagger) \quad (۴)$$

^۱ Holstein- Primakoff transformation



که برای ساختار شش‌گوشی، $\hbar\omega_k = 6S(J + \Gamma) + S(-2J + \Gamma - \delta)f(k)$ قسمت قطری،
 قسمت غیرقطری هامیلتونی بوزونی، و $\Delta_k = -\frac{1}{2}S(\delta + \Gamma)f(k)$
 عامل ساختار شبکه هگزگونال می‌باشد. هامیلتونی $f(k) = \cos k_x a + 2 \cos(\frac{1}{2}k_x a) \cos(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a)$
 رابطه (۴) را می‌توان با تبدیلات یکانی قطری کرد، در نتیجه رابطه پراکندگی زیر برای مگنون‌ها
 بدست می‌آید [۳۳]:

$$E(k) = \sqrt{(\hbar\omega_k)^2 - 4(\Delta_k)^2} \quad (۵)$$

با توجه به رابطه (۵)، انرژی مگنون با اسپین متناسب است، اما مستقل از دما می‌باشد. برای بررسی
 رفتار گرمایی اسپین‌ها، باید دما را نیز در نظر گرفت. برای این کار مطابق با کار لادو و
 همکارش [۳]، رابطه پاشندگی مگنون را به وسیله مغناطش وابسته به دما ($M(T)$) نسبت به اسپین
 (S) بازهنجارش می‌شود،

$$E(k, T) = E(k) \left(\frac{M(T)}{S} \right) \quad (۶)$$

هر مگنون برانگیخته گشتاور اسپین کل را به وسیله یک واحد گشتاور زاویه‌ای کاهش می‌دهد،
 (یعنی اسپین کل از S به $S - \langle n_k \rangle$ کاهش می‌دهد.) که $\langle n_k \rangle$ میانگین جمعیت مگنون‌ها در تعادل
 گرمایی در یک دمای معین می‌باشد، که به وسیله تابع توزیع بوز-اینشتین داده می‌شود. وابستگی
 دمایی مغناطش به وسیله حل خودسازگار انرژی پاشندگی مگنون و مغناطش می‌تواند بدست آید
 [۳ و ۳۳]

$$M(T) = S - \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{BZ} \frac{d^2k}{\exp(\beta E(k) \frac{M(T)}{S}) - 1} \quad (۷)$$

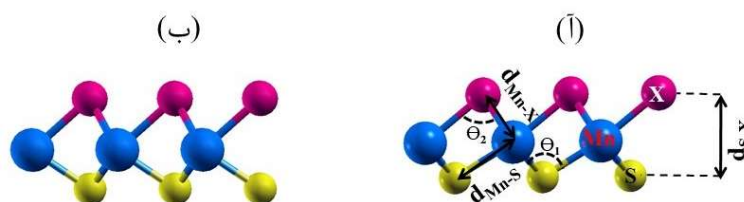
که $\beta = (k_B T)^{-1}$ است. دمای کوری به صورت دمایی که در آن $M(T) = S/2$ می‌باشد، تعریف
 می‌شود.

۳. نتایج محاسبات

در تک‌لایه‌های ژانوس منگنز سولفید هالید، لایه‌های بالا و پایین صفحه شامل اتم منگنز از اتم
 سولفید و اتم‌های هالید تشکیل شده‌اند و ساختار در راستای عمودی کاملاً نامتقارن می‌باشد. در ابتدا
 اختلاف انرژی یاخته یکه فرومغناطیس فازهای ۱T و ۱H تک‌لایه‌های ژانوس MnSX ($E = E_H -$)



(ET) که در شکل (۲) نشان داده شده است، محاسبه شد. همانطور که در جدول (۱) گزارش شده است، برای تمام تک‌لایه‌ها مقدار انرژی لازم برای گذار بین دو فاز تقریباً برابر ۹ الکترون ولت به ازای یاخته یک می‌باشد، در نتیجه فاز ۱T از نظر انرژی برتری است. همانطور که دیده می‌شود اختلاف انرژی بین این دو فاز اتمی در این ساختارها با افزایش جرم اتمی هالیدها کاهش می‌یابد. مقادیر ثابت شبکه، طول و زاویه پیوندها، و ضخامت لایه برای ساختار بهینه شده این تک‌لایه‌های ژانوس در جدول (۱) آمده است.



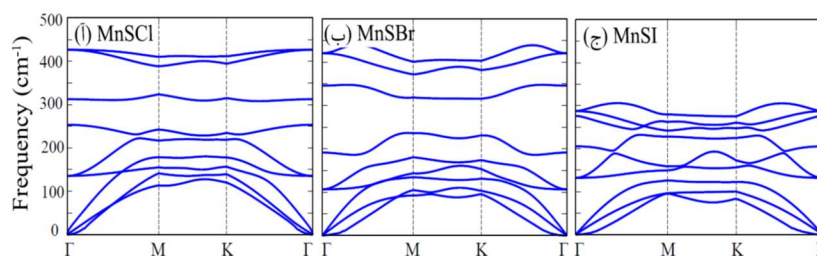
شکل ۲ نمای جانبی تک‌لایه MnSX (T) فاز ۱T و (ب) ۱H. کره‌های آبی، صورتی و زرد به ترتیب اتم‌های منگنز، سولفید و هالوژن هستند.

پایداری دینامیکی تک‌لایه‌های ژانوس MnSX در فاز T با استفاده از محاسبات فونونی بررسی شد. برای این کار فرکانس‌های مدهای نوسانی تک‌لایه MnSX بهینه شده در فاز T برای همه نقاط K در منطقه اول بریلوئن محاسبه شد. یک ساختار تنها زمانی پایدار است که فرکانس‌های محاسبه شده همه مدهای فونونی در منطقه اول بریلوئن، مثبت باشند. به عبارت دیگر فرکانس‌های موهومی نشان‌دهنده بی‌ثباتی ساختار هستند.

در شکل (۳)، شاخه‌های فونون محاسبه شده برای ساختارهای MnSX (X= Cl, Br, I) در فاز T نشان داده شده است. چون در یاخته یک قرارداد یک اتم منگنز و دو اتم سولفید و هالید وجود دارد، بنابراین طیف فونون شامل ۹ شاخه فونونی است، که ۳ شاخه صوتی (صوتی عرضی (TA)، صوتی طولی (LA) و صوتی عرضی خارج از صفحه (ZA) و ۶ شاخه نوری می‌باشند. همه ساختارها دارای فرکانس‌های مثبت در منطقه اول بریلوئن می‌باشند. در تک‌لایه‌ها با سبک‌تر شدن اتم‌های X، نوارهای Mn-X بیشتر یونی می‌شوند، در نتیجه در ساختارهای MnSX پهنای شاخه‌های صوتی از 120 cm^{-1} به 150 cm^{-1} افزایش می‌یابد، و بالاترین فرکانس مدهای نوری نیز با تغییر X از I به Cl افزایش می‌یابد. شاخه‌های صوتی طولی (LA) و عرضی (TA) در صفحه، در عدد موج‌های نزدیک به صفر دارای پراکندگی خطی می‌باشند. در حالی که مدهای عرضی خارج از صفحه (ZA)



پراکندگی سهمی وار به دلیل فروپاشی سریع ثابت‌های نیروی عرضی نشان می‌دهند که یک مشخصه از پاشندگی فونونی در بلورهای لایه‌ای است که به صورت آزمایشگاهی دیده شده است [۳۴-۳۶].



شکل ۳ پراکندگی فونونی تک‌لایه‌های MnSX.

جدول ۱ اختلاف انرژی بین فاز ۱H و ۱T ($E_H - E_T$)، انرژی پیوندی به ازای یاخته یک (E_b)، ثابت شبکه (a)، طول پیوند (d_{Mn-X})، فاصله بین دو صفحه شامل اتم‌های سولفید و هالوژن (d_{S-X})، زاویه پیوند بین $\Theta_{Mn-X-Mn}$ (Mn) تک‌لایه‌های $MnSX$ ، X نشان دهنده اتم‌های هالید می‌باشد.

	$E_H - E_T$ (eV)	E_b (eV)	a (Å)	d_{Mn-S} (Å)	d_{Mn-X} (Å)	d_{S-X} (Å)	$\Theta_{Mn-S-Mn}$ (deg.)	$\Theta_{Mn-X-Mn}$ (deg.)
MnSCL	۰/۴۲	۱۰/۲۱	۳/۵۸	۲/۴۷	۲/۵۸	۲/۸۹	۹۳	۸۸
MnSBr	۰/۴۰	۹/۵۸	۳/۶۸	۲/۴۸	۲/۷۳	۲/۹۹	۹۶	۸۵
MnSI	۰/۳۱	۸/۹۰	۳/۸۴	۲/۴۸	۲/۹۶	۳/۰۹	۱۰۱	۸۱

برای بررسی پایداری تک‌لایه‌های $MnSX$ از نظر انرژی، انرژی پیوندی این ساختارها محاسبه شد.

$$E_b = -(E(MnSX) - E(Mn) - E(S) - E(X)) \quad (۸)$$

که در آن، $E(MnSX)$ انرژی کل $MnSX$ و $E(Mn)$ ، $E(S)$ و $E(X)$ به ترتیب انرژی اتم‌های منفرد Mn ، S و X در جعبه‌ای با ابعاد $15 \times 15 \times 15$ آنگستروم می‌باشند. انرژی پیوندی تمام تک‌لایه‌ها در جدول (۱) گزارش شده است. همانطور که دیده می‌شود، همه انرژی‌های پیوندی از مرتبه ۹ الکترون ولت به ازای یاخته یک می‌باشند، که نشان‌دهنده پیوند شیمیایی قوی بین اتم‌ها در این تک‌لایه‌ها می‌باشد.

برای مطالعه ویژگی‌های الکترونی تک‌لایه‌های $MnSX$ ، ساختار نوار الکترونی این ساختارها مورد بررسی قرار گرفت، که نتایج در شکل (۴) نشان داده شده است. تمام تک‌لایه‌ها $MnSX$ نیمه فلز

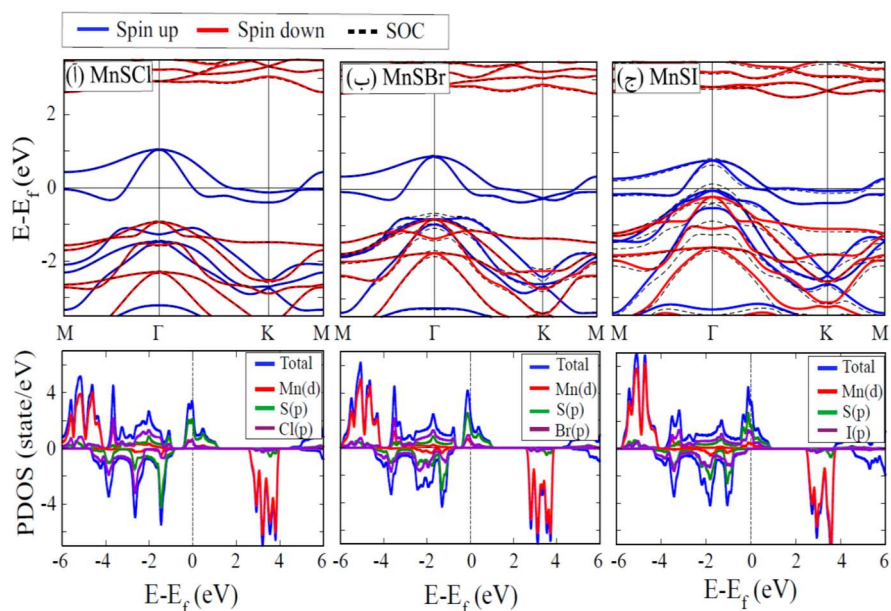
هستند و نوارهای حالت اسپین بالا انرژی فرمی را قطع می کنند، ولی یک شکاف انرژی بین نوارهای انرژی حالت اسپین پایین وجود دارد. مقادیر شکاف انرژی بین نوارهای انرژی حالت اسپین پایین برای تک لایه های MnSX در شکل (۵-آ) نشان داده شده است. همانطور که دیده می شود با کاهش جرم اتمی هالیدها این شکاف انرژی از 2.74 eV به 3.55 eV افزایش می یابد، که این شکاف انرژی بالا سبب قطبش اسپینی صد در صد در سطح فرمی می شود. همچنین ساختار نواری این تک لایه ها با در نظر گرفتن جفت شدگی اسپین-مدار (SOC) نیز مورد بررسی قرار گرفت که در شکل (۴) با نقطه چین های سیاه رنگ نشان داده شده است. جفت شدگی اسپین-مدار دو حالت اسپین بالا و پایین را با هم ترکیب می کند و حالت های الکترونی تبهگن را جدا می کند. این جدا شدگی در ترکیب شامل اتم سنگین ید با جفت شدگی اسپین-مدار قوی تر، بیشتر است. که در پژوهش های پیش از این نیز مشاهده شده است [۳۷].

برای درک بهتر ساختار الکترونی این تک لایه ها، چگالی حالت های جزئی^۱ (PDOS) این ترکیبات نیز رسم و در شکل (۴) نشان داده شده است. برای تمام تک لایه های ژانوس، سهم اصلی نوارها در سطح فرمی ناشی از اوربیتال p نیمه پر اسپین بالا اتم سولفور می باشد، و اتم منگنز نقش غالبی در نزدیک سطح فرمی ندارد. بنابراین در تمام تک لایه های ژانوس منگنز سولفید هالید اوربیتال p اتم سولفور نقش مهمی در سطح فرمی ایفا می کند.

برای مشخص کردن نظم مغناطیسی ترجیحی در این ساختارها، پارامتر جفت شدگی تبدالی (J) که از اختلاف انرژی حالت های FM و AFM در راستای z (شکل (۱-آ و ب)) بدست می آید، محاسبه شد (رابطه (۲)). پارامتر جفت شدگی تبدالی مثبت (منفی) نشان می دهد که حالت پایه سامانه فرومغناطیس (آنتی فرومغناطیس) است. مقدار پارامتر جفت شدگی تبدالی تک لایه های ژانوس منگنز سولفید هالید در جدول (۲) گزارش شده است. همانطور که دیده می شود، تمام تک لایه ها دارای نظم فرومغناطیس می باشند، و مقدار J با افزایش جرم اتمی اتم هالید در تک لایه های ژانوس MnSX افزایش می یابد.

¹ Partial Density of States





شکل ۴ ساختارهای نواری در غیاب (خط آبی برای اسپین بالا و خط قرمز برای اسپین پایین) و حضور (نقطه چین سیاه) جفت‌شدگی اسپین-مدار (SOC) برای تک‌لایه‌های MnSX و چگالی جزئی هر تک‌لایه در زیر آن رسم شده است.

برای محاسبه پارامترهای ناهمسانگردی δ و Γ (رابطه ۲) از $DFT+U+SOC$ و روش غیرخطی گشتاور مغناطیسی تابعی چگالی استفاده شد، که در جدول (۲) گزارش شده است. پارامتر δ تمام تک‌لایه‌ها منفی می‌باشد، که بیانگر مغناطش درون صفحه‌ای آسان است. بر اساس تئوری مرمین-واگنر [۲]، فرومغناطیس دوبعدی صفحه‌ای آسان، بدون نظم مغناطیسی بلند برد در دماهای بالای صفر مطلق هست. با این وجود، اگر ناهمسانگردی درون صفحه‌ای که با آخرین جمله وابسته به Γ در رابطه (۱) بیان می‌شود، معرفی شود، می‌توان نظم مغناطیسی را تثبیت کرد. این عبارت وجود شکاف در طیف مگنون را تضمین می‌کند که برای مشاهده نظم مغناطیسی دو بعدی در دماهای محدود ضروری است [۳ و ۳۳]. مقادیر پارامتر Γ در جدول (۲) داده شده است. پارامتر Γ تمام تک‌لایه‌ها مثبت است که نشان می‌دهد محور آسان در راستای X است، که مطابق با نتایج تک‌لایه VSe_2 می‌باشد [۳۳]. اگرچه Γ بسیار کوچک است، اما برای تثبیت نظم فرومغناطیس در دماهای غیر صفر کافی است، چرا که Γ به صورت لگاریتمی با دمای کوری مقیاس می‌شود.

همانطور که در جدول (۲) دیده می‌شود، پارامترهای ناهمسانگردی δ و Γ این تک لایه‌ها با افزایش جرم اتمی اتم‌های هالید به دلیل قوی‌تر شدن جفت‌شدگی اسپین-مدار (بر اساس الگوی برونو) و نامتقارن‌تر شدن ساختار به دلیل افزایش الکترون‌گاتیوی اتم هالید و شکل‌گیری دو قطبی الکتریکی قوی‌تر، افزایش می‌یابند. این نتایج بدست آمده در مورد تأثیر اتم‌های هالید در انرژی ناهمسانگردی تک‌لایه‌های MnSX در توافق خوبی با مطالعات نظری صورت گرفته بر روی تک‌لایه‌های ژانوس MnXX' با $X' = S, Se, Te$ می‌باشد [۲۹].

جدول ۲ M_{tot} منتوم مغناطیسی کل، (J) پارامتر جفت‌شدگی تبادل، (δ) پارامتر ناهمسانگردی مغناطیسی خارج صفحه، (Γ) پارامتر برهمکنش بین اسپین‌ها در صفحه، (Tc) دمای کوری.

	M_{tot} (μ_B/cell)	J (meV)	δ (meV)	Γ (μeV)	(K) Tc
MnSCl	۴/۰۰	۲/۵۴	-۰/۰۱	۰/۰۶	۳۱
MnSBr	۴/۰۰	۳/۲۱	-۰/۰۶	۰/۱۴	۳۹
MnSI	۴/۰۰	۳/۹۸	-۰/۳۳	۶/۲۴	۴۹

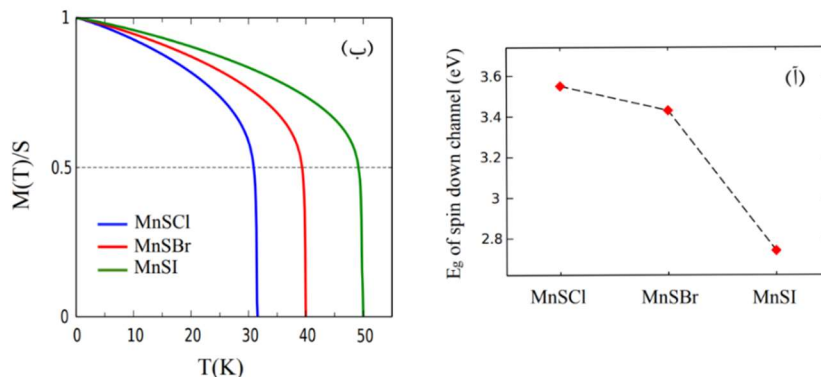
برای محاسبه دمای کوری با استفاده از رابطه (۷)، منحنی تغییرات $M(T)/S$ بر حسب تغییرات دما رسم شد که در شکل (۵-ب) نشان داده شده است. همانطور که در شکل (۵-ب) مشاهده می‌شود، در دماهای پایین مغناطش به دلیل ایجاد تعداد متناهی حالت برانگیخته یا مگنون به آرامی کاهش می‌یابد، ولی در دماهای بالاتر با توجه به کاهش مقدار مغناطش که همان ضریب در رابطه (۷) است، طیف مگنون‌ها نرم‌تر می‌شود و راحت‌تر تحریک می‌شوند. در نتیجه بعد از یک دمایی خیلی سریع افت می‌کند و به سمت صفر میل می‌کند. با توجه به اینکه، دمای کوری برابر است با دمایی که در آن مغناطش خالص به نصف اسپین کل کاهش می‌یابد. دمای کوری از روی منحنی وابستگی دمایی مغناطش (شکل (۵-ب)) تخمین زده شد، که برای تک‌لایه‌های منگنز سولفید هالید در جدول (۲) گزارش شده است.

۴. نتیجه‌گیری

ویژگی ساختاری، الکترونی و مغناطیسی تک‌لایه‌های منگنز سولفید هالیدها با استفاده از محاسبات اصول اولیه به وسیله تابعی چگالی الکترونی مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان می‌دهد که تمام



این تک‌لایه‌های ژانوس از نظر دینامیکی پایدار و نیم‌فلز با قطبش اسپینی صد در صد هستند و دارای نظم فرومغناطیس با محور آسان درون صفحه‌ای در راستای X می‌باشند. بزرگی پارامترهای ناهمسانگردی از $MnSBr$ به $MnSI$ به دلیل قوی‌تر شدن جفت‌شدگی اسپین-مدار و نامتقارن‌تر شدن ساختار در راستای عمود بر صفحه تک‌لایه‌ها، با افزایش جرم اتمی در هالیدها، افزایش می‌یابند. دمای کوری منگنز سولفید هالیدها به وسیله محاسبات خودسازگار مغناطش در دماهای مختلف تخمین زده شد.



شکل ۵ (آ) اندازه شکاف انرژی بین نوارهای حالت اسپین پایین و (ب) وابستگی دمایی مغناطش $M(T)/S$ محاسبه شده برای تک‌لایه‌های $MnSX$.

منابع

- [1] Gong, C., and Zhang, X., "Two-dimensional magnetic crystals and emergent heterostructure devices", *Science*, 363, 706-717, 2019. <https://doi.org/10.1126/science.aav4450>.
- [2] Mermin D., and Wagner H., "Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic heisenberg models", *Phys. Rev. Lett.*, 17, 1133-1136, 1966. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.17.1133>.
- [3] Lado J. L., and Fernández-Rossier J., "On the origin of magnetic anisotropy in two dimensional CrI_3 ", *2D Mater*, 4, 35002- 35011, 2017. <https://doi.org/10.1088/2053-1583/aa75ed>.
- [4] Wang D.-s., Wu R., and Freeman A. J., "First-principles theory of surface magnetocrystalline anisotropy and the diatomic-pair model", *Phys. Rev. B*, 47, 14932, 1993. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.47.14932>.
- [5] Bruno P., "Tight-binding approach to the orbital magnetic moment and magnetocrystalline anisotropy of transition-metal monolayers", *Phys. Rev. B*, 39, 865-868, 1989. <https://doi.org/10.1103/physrevb.39.865>.
- [6] Huang B., Clark G., Navarro-Moratalla E., Klein D. R., Cheng R., Seyler K. L., Zhong D., Schmidgall E., McGuire M. A., Cobden D. H., and et al., "Layer-dependent

- ferromagnetism in a van der waals crystal down to the monolayer limit", *Nature*, 546, 270-273, 2017. <https://doi.org/10.1038/nature22391>.
- [7] Bonilla M., Kolekar S., Ma Y., Diaz H.C., Kalappattil V., Das R., Eggers T., Gutierrez H.R., Phan M.-H., Batzill M., "Strong room-temperature ferromagnetism in VSe₂ monolayers on van der Waals substrates", *Nature Nanotechnology*, 13, 289-293, 2018. <https://doi.org/10.1038/s41565-018-0063-9>.
- [8] Yu W., Li J., Heng T.S., Wang Z., Zhao X., Chi X., Fu W., Abdelwahab I., Zhou J., Dan J., Chen Z., Chen Z., Li Z., Lu J., Pennycook S.J., Feng Y.P., Ding J., Loh K.P., "Chemically exfoliated VSe₂ monolayers with room-temperature ferromagnetism", *Adv. Mater.*, 31,1903779-1903787, 2019. <https://doi.org/10.1002/adma.201903779>.
- [9] Liu Z.-L., Wu X., Shao Y., Qi J., Cao Y., Huang L., Liu C., Wang J.-O., Zheng Q., Zhu Z.-L., Ibrahim K., Wang Y.-L., Gao H.-J., "Epitaxially grown monolayer VSe₂: An air-stable magnetic two-dimensional material with low work function at edges", *Sci. Bull.*, 63, 419-425, 2018. <https://doi.org/10.1002/adma.201605407>.
- [10] O'Hara D. J., Zhu T., Trout A. H., Ahmed A. S., Luo Y. K., Lee C. H., Brenner M. R., Rajan S., Gupta J. A., McComb D. W., and Kawakami R. K., "Room temperature intrinsic ferromagnetism in epitaxial manganese selenide films in the monolayer limit", *Nano Lett.*, 18, 3125-3131, 2018. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.8b00683>.
- [11] Chhowalla M., Shin H., Eda G., Li L., Loh K., Zhang H., "The chemistry of two-dimensional layered transition metal dichalcogenide nanosheets", *Nature Chem*, 5, 263-267, 2013. <https://doi.org/10.1038/nchem.1589>.
- [12] Qian Z., Jiao L., Xie L., "Phase engineering of two-dimensional transition metal dichalcogenides", *Chin. J. Chem.*, 38, 753-760, 2020. <https://doi.org/10.1002/cjoc.202000064>.
- [13] Cao T., Wang G., Han W., Ye H., Zhu C., Shi J., and et al, "Valley-selective circular dichroism of monolayer molybdenum disulphide", *Nat. Commun.*, 887, 1-4, 2012. <https://doi.org/10.1038/ncomms1882>.
- [14] Xiao D., Liu G. B., Feng W., Xu X., Yao W., "Coupled Spin and Valley Physics in Monolayers of MoS₂ and Other Group-VI Dichalcogenides", *Phys. Rev. Lett.*, 108, 196802-196821, 2012. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.108.196802>.
- [15] Zhang K., Bao C., Gu Q., Ren X., Zhang H., Deng K., Wu Y., Li Y., Feng J., Zhou S., "Raman signatures of inversion symmetry breaking and structural phase transition in type-II Weyl semimetal MoTe₂", *Nature Commun.*, 7, 13552-13558, 2016. <https://doi.org/10.1038/ncomms13552>.
- [16] Zhou Y., Wu D., Zhu Y., Cho Y., He Q., Yang X., Herrera K., Chu Z., Han Y., Downer M.C., Peng H., Lai K., "Out-of-plane piezoelectricity and ferroelectricity in layered α -In₂Se₃ nanoflakes", *Nano Lett.*, 17, 5508-5513, 2017. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.7b02198>.
- [17] Zhou X., Sun X., Zhang Z., Guo W., "Ferromagnetism in a semiconducting Janus NbSe hydride monolayer", *J. Mater. Chem. C*, 6, 9675-9681, 2018. <https://doi.org/10.1039/C8TC03016B>.
- [18] Duan X., Wang C., Fan Z., Hao G., Kou L., Halim U., Li H., Wu X., Wang Y., Jiang J., Pan A., Huang Y., Yu R., Duan X., "Synthesis of WS_{2x}Se_{2-2x} alloy nanosheets with composition-tunable electronic properties", *Nano Lett.*, 16,264-269, 2016. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.5b03662>.
- [19] Gong Y., Liu Z., Lupini A.R., Shi G., Lin J., Najmaei S., Lin Z., Elías A.L., Berkdemir A., You G., Terrones H., Terrones M., Vajtai R., Pantelides S.T., Pennycook S.J., Lou J., Zhou W., Ajayan P.M., "Band gap engineering and layer-by-layer mapping of selenium-doped molybdenum disulfide", *Nano Lett.*, 14, 442-449, 2014. <https://doi.org/10.1021/nl4032296>.
- [20] Lin Z., Thee M., Elías A., Feng S., Zhou C., Fujisawa K., Perea-Lopez N., Carozo V., Terrones H., Terrones M., "Facile synthesis of MoS₂ and Mo_xW_{1-x}S₂ triangular



- monolayers", *APL Mater.*, **2**, 092514–092522, 2014. <https://doi.org/10.1063/1.4895469>.
- [21] Lu A.-Y., Zhu H., Xiao J., Chuu C.-P., Han Y., Chiu M.-H., Cheng C.-C., Yang C.-W., Wei K.-H., Yang Y., Wang Y., Sokaras D., Nordlund D., Yang P., Muller D.A., Chou M.-Y., Zhang X., Li L.-J., "Janus monolayers of transition metal dichalcogenides", *Nature Nanotechnology*, **12**, 744–749, 2017. <https://doi.org/10.1038/nnano.2017.100>.
- [22] Sant R., Gay M., Marty A., Lisi S., Harrabi R., Vergnaud C., Dau M.T., Weng X., Coraux J., Gauthier N., and et al., "Synthesis of epitaxial monolayer Janus SPTe", *NPJ 2D Mater. Appl.*, **4**, 1–8, 2020. <https://doi.org/10.1038/s41699-020-00175-z>.
- [23] Zhang F., Mi W., Wang X., "Spin-dependent electronic structure and magnetic anisotropy of 2D ferromagnetic Janus Cr₂I₃X₃ (X=Br, Cl) monolayers", *Adv. Electron. Mater.*, **6**, 1900778–1900789, 2020. <https://doi.org/10.1002/aelm.201900778>.
- [24] Lu A. Y., Zhu H., Xiao J., Chuu C.P., Han Y., Chiu M. H., et al., "Janus monolayers of transition metal dichalcogenides", *Nat. Nanotechnol.*, **12**, 744–752, 2017. <https://doi.org/10.1038/nnano.2017.100>.
- [25] Zhang J., Jia Kholmanov I., Dong S. L., Er D., Chen W., et al., "Janus Monolayer Transition-Metal Dichalcogenides", *ACS Nano.*, **11**, 8192–8200, 2017. <https://doi.org/10.1021/acsnano.7b03186>.
- [26] Dong L., Lou J., Shenoy V. B., "Large In-Plane and Vertical Piezoelectricity in Janus Transition Metal Dichalcogenides", *ACS Nano.*, **11**, 8242–8250, 2017. <https://doi.org/10.1021/acsnano.7b03313>.
- [27] Jin H., Wang T., Gong Z. R., Long C., Dai Y., "Prediction of an extremely long exciton lifetime in a Janus-MoSTe monolayer", *Nanoscale*, **10**, 19310–19351, 2018. <https://doi.org/10.1039/c8nr04568b>.
- [28] Hea J., Li S., "Two-dimensional Janus transition-metal dichalcogenides with intrinsic ferromagnetism and half-metallicity", *Comput. Mater. Sci.*, **152**, 151–152, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.05.049>.
- [29] Azmoonfar M., Roknabadi M.R., Modarresi M., Mogulkoc A., "Characterization of two-dimensional ferromagnetic binary and Janus manganese dichalcogenides", *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **556**, 169412–169421, 2022. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2022.169412>.
- [30] Giannozzi P., Baroni S., Bonini N., Calandra M., Car R., Cavazzoni C., Ceresoli D., Chiarotti G. L., and et al., "QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials", *J. Phys. Condens. Matter*, **21**, 395502–395521, 2009. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/39/395502>.
- [31] Kan M., Adhikari S., and Sun Q., "Ferromagnetism in MnX₂ (X = S, Se) monolayers", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **16**, 4990–4994, 2014. <https://doi.org/10.1039/c3cp55146f>.
- [32] Baroni S., Gironcoli S. de, Dal Corso A., Giannozzi P., "Phonons and related crystal properties from density-functional perturbation theory", *Rev. Modern Phys.*, **73**, 515–562, 2001. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.73.515>.
- [33] Memarzadeh S., Roknabadi M.R., Modarresi M., Mogulkoc A., and Rudenko A.N., "Role of charge doping and strain in the stabilization of in-plane ferromagnetism in monolayer VSe₂ at room temperature", *2D Mater.*, **8**, 035022–035036, 2021. <https://doi.org/10.1088/2053-1583/abf626>.
- [34] Ataca C., Şahin H., Ciraci H., "Stable, Single-Layer MX₂ Transition-Metal Oxides and Dichalcogenides in a Honeycomb-Like Structure", *J. Phys. Chem. C*, **116**, 8983–8999, 2012. <https://doi.org/10.1021/jp212558p>.
- [35] Torun E., Sahin H., Singh S. K., Peeters F. M., "Stable half-metallic monolayers of FeCl₂", *Appl. Phys. Lett.*, **106**, 192404–192423, 2015. <https://doi.org/10.1063/1.4921096>.
- [36] Yan J. A., Ruan W. Y., Chou M. Y., "Phonon dispersions and vibrational properties of monolayer, bilayer, and trilayer graphene: Density-functional perturbation theory",



- Phys. Rev. B, 77, 125401-125413, 2008.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.77.125401>.
- [37] Mogulkoc A., Modarresi M., and Rudenko A.N., "Two-dimensional chromium pnictides CrX(X=P,As,Sb):Half-metallic ferromagnets with high curie temperature", Phys. Rev. B., 102, 024441-024450, 2020.
<https://doi.org/10.1103/physrevb.102.024441>.



This article is an open-access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution-Noncommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0 license) (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).

