

Título do Subprojeto

Estudo Teórico das Propriedades Magnéticas em Monocamadas de $\text{Br}_3\text{Cr}_2\text{I}_3$

Identificação:

Grande área do CNPq: Ciências Exatas e da Terra

Área do CNPq: Física

Título do Projeto: Estudo de Nanomateriais via Simulação Computacional Atomística

Professor Orientador: Wanderlã Luis Scopel

Estudante PIBIC/PIVIC: Filipe Gonçalves Jacinto

Resumo: Neste trabalho investigou-se uma monocamada janus de $\text{Br}_3\text{Cr}_2\text{I}_3$ e sua respectiva estrutura eletrônica, atômica e magnética. Os cálculos mostram que o sistema possui ordem Ferromagnético no estado fundamental e um caráter semicondutor de Bandgap indireto (1.15 eV). Além disso, explorou-se defeitos de monovacâncias de átomos de Br, Cr e I onde foram também determinados as suas estruturas eletrônicas e as respectivas energias de trocas entre os estados Antiferromagnético (AFM) e Ferromagnético (FM). Os resultados obtidos mostram que existe uma redução no Bandgap para cerca de 0.3 eV e que os três sistemas mantêm a ordem FM na temperatura de 0 K. Contudo, para o defeito de Cr a energia de troca é próxima da energia térmica na temperatura ambiente ($T = 300 \text{ K}$) o que indica uma possível transição de ordem magnética desse sistema de $\text{FM} \rightarrow \text{AFM}$.

Palavras chaves: Monocamada, Janus, Estrutura Eletrônica, Superfícies, Semicondutor, Propriedades Magnéticas.

1 Introdução

Desde o isolamento de folhas de Grafeno (Novoselov et al. (2004)) um grande avanço no estudo de materiais bidimensionais estes vem se mostrando cada vez mais promissores com diversas aplicabilidades, desde memórias magnéticas ultrafinas até a construção de painéis solares mais eficientes. Neste contexto, um cristal de Van der Waals denominado de CrI_3 (Trióxido de Cromo) foi obtido experimentalmente com fase Romboédrica (grupo de simetria espacial-R3) a uma temperatura de 61 K e ordem ferromagnética (FM) na monocamada e entre camadas (Ubrig et al. (2019)). Dado suas características, o CrI_3 vem sendo foco de interesse de estudos teóricos de forma a entender mais a fundo as propriedades físicas de materiais bidimensionais magnéticos prístinos e com defeitos intrínsecos. Recentemente, Wang e colaboradores (Wang

et al. (2020)) mostraram que, defeitos pontuais (vacâncias, interstícios, substitucionais) podem alterar propriedades magnéticas de uma monocamada de CrI_3 podendo até induzir a transição de Ferromagnética (FM) para Antiferromagnética (AFM).

Disto isto, é imprescindível entender como defeitos alteram as propriedades físicas desses materiais bidimensionais para permitir o seu uso no desenvolvimento de novas tecnologias. Por outro lado, estruturas atômicas cristalinas com a forma $X_3\text{Cr}_2Y_3$ ($X, Y = \text{Br}, \text{Cr}, \text{I}$) são conhecidas como monocamadas janus, que é um termo utilizado pela comunidade científica para designar materiais com propriedades diferentes em lados opostos. Além disso, outro material chamado de *MoSSe* um dicalcogeneto de metal de transição de monocamadas Janus foi recentemente demonstrado experimentalmente (Albaridy et al. (2020)). É importante ainda ressaltar, que ao sintetizar monocamadas em geral é praticamente inevitável a formação de defeitos, e portanto é ainda mais necessário entender como vacâncias podem modificar as propriedades estruturais, eletrônicas e magnéticas de monocamadas Janus.

Então, a partir da discussão anterior, este subprojeto investigou de forma teórica utilizando a teoria do funcional densidade(DFT), defeitos pontuais em monocamadas Janus de $\text{Br}_3\text{Cr}_2\text{I}_3$ verificando a sua estabilidade energética, propriedades estruturais, eletrônicas e uma possível transição de ordem magnética. Dessa forma, observou-se que o $\text{Br}_3\text{Cr}_2\text{I}_3$ é um semicondutor de *Gap* indireto igual à 1.24 eV e possui ordem ferromagnética no estado fundamental. A partir da célula unitária, foi construída à supercelula $2 \times 2 \times 1$ onde foram criados três defeitos diferentes, sendo um para cada geometria, à citar: (i) uma única vacância de Bromo, (ii) uma vacância de Cromo e uma única vacância de Iodo. Em seguida, a estrutura foi relaxada onde foram calculados as estruturas de bandas e a densidade de estados projetada(pDOS) mostrando que o *Bandgap* de forma geral, diminui se existem vacâncias no sistema e que o sistema se mantém com ordem ferromagnética mesmo com a presença de monovacâncias.

2 Objetivos

Investigar utilizando a teoria do funcional densidade(DFT), defeitos pontuais de Br , Cr e I em monocamadas Janus de $\text{Br}_3\text{Cr}_2\text{I}_3$. A partir de cálculos de primeiros princípios pretende-se calcular a estabilidade energética, propriedades estruturais, eletrônicas e uma possível transição de ordem magnética na estrutura de $\text{Br}_3\text{Cr}_2\text{I}_3$ com e sem vacâncias.

3 Metodologia

Para a realização dos cálculos, foram utilizados o formalismo *ab-initio*, que se vale apenas dos números atômicos e das constantes fundamentais da natureza. Em particular, foram utilizados cálculos de primeiros princípios baseados em Teoria do Funcional de Densidade(DFT), sendo utilizado como funcional de troca e correlação GGA-PBE (Generalized Gradient Approximation

(GGA-PBE+U) levando em consideração o termo de interação coulombiana dos elétrons localizados ($U = 2.65 \text{ eV}$) e considerando as interações de Van der Waals através do métodos Vdw-DF Dion et al. (2004) implementados no código computacional Quantum Espresso (Giannozzi et al. (2009)). A região de vácuo considerada foi de 20 \AA na direção perpendicular aos planos de átomos na direção z (veja Figura 1) visando diminuir a interação entre camadas. O sistema foi relaxado até diferenças de energias de 10^{-4} eV . A energia de troca entre a ordem antiferromagnética (AFM) e ferromagnética (FM) foi determinada a partir da equação 1:

$$E_{troca} = E_{AFM} - E_{FM} \quad (1)$$

em que E_{troca} é a energia de troca do sistema, E_{AFM} , E_{FM} é a energia total do sistema na configuração antiferromagnético e ferromagnético, respectivamente.

4 Resultados

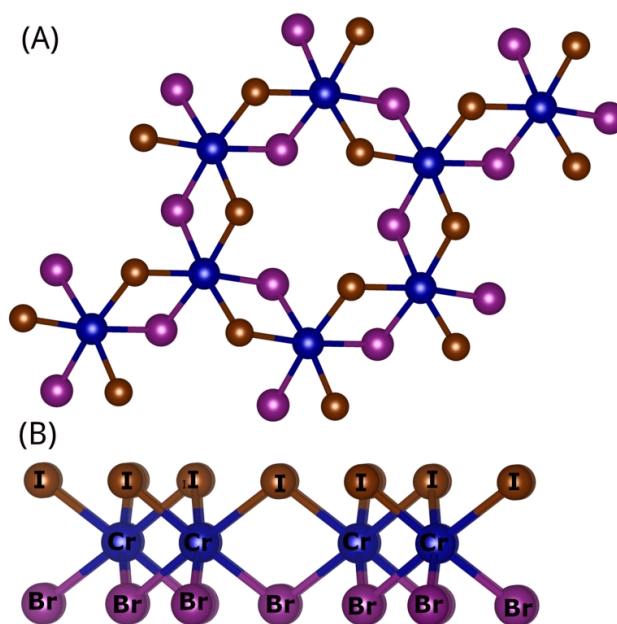


Figura 1: Geometria da supercelula de $\text{Br}_3\text{Cr}_2\text{I}_3$ onde (A) é vista superior e (B) vista lateral, e a esfera de cor azul, rosa e marrom representa átomos de Cr , Br e I , respectivamente.

A partir da célula unitária do CrI_3 foi construída a célula de $\text{Br}_3\text{Cr}_2\text{I}_3$ substituindo átomos de Iodo por Bromo, como mostrado na Figura 1. Assim, na Figura 1 pode-se verificar que o plano superior aos átomos de Cromo é composto por apenas átomos de Iodo e o plano inferior apenas por átomos de Bromo. A partir da estrutura atômica do sistema, foram realizados os testes de convergência para o sistema utilizando o funcional GGA-PBE+U mostrado na Figura 2 (D), (E) e

(F). O mesmo procedimento foi realizado para o sistema considerando as interações de van der Waals através do método vdW-DF (Dion et al. (2004)), como mostrado na Figura 2 (A), (B) e (C). Os resultados que estão dispostos na Figura 2 (A) e (D) mostram o comportamento da energia total em função do E -cut e nota-se a convergência da energia total a partir da energia de corte de 45 Ry para ambos os funcionais. Seguindo essa análise, a Figura 2 (B) e (E) mostra que o mesmo ocorre com a convergência da energia total em função dos números de pontos k à partir de k -points igual a $3 \times 3 \times 1$. Contudo, ao compararmos os parâmetros de rede (a) determinado a partir da inclusão vdW-DF, nota-se um valor maior do que o obtido sem inclusão do vdW. Os resultados encontrados foram de 7,0 Å (inclusão de vdW) e 6,87 Å (sem inclusão de vdW). É importante ainda ressaltar que para o funcional utilizando somente GGA-PBE o parâmetro de rede está de bom acordo com Albaridy et al. (2020).

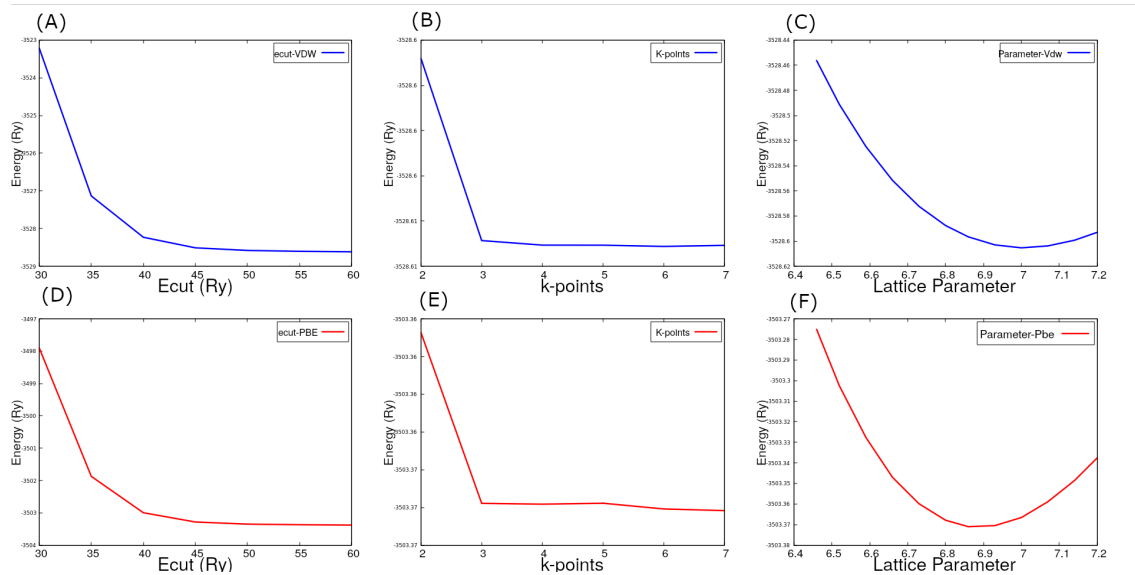


Figura 2: Gráficos obtidos a partir dos testes de convergência em relação a energia total do sistema $Br_3Cr_2I_3$ onde os gráficos com curvas de cor azul são utilizando o funcional vdW-DF e os gráficos utilizando o funcional PBE possuem curvas de cor vermelha.

A partir dos cálculos de convergência, o sistema foi relaxado considerando o funcional de troca e correlação GGA-PBE+U. Em seguida, foi determinado a energia de troca para o sistema utilizando a equação 1, sendo obtido $E_{troca} = 66,52 \text{ meV}$, assim pode-se concluir que o sistema tem ordem FM. Além disso, foi determinado a densidade de estados (DOS) que é apresentada na Figura 3 para o sistema sem e com a interação coulombiana 3(A) e (B), respectivamente. As monocamadas janus são isolantes de Mott e por isso tem as nuvens eletrônicas localizadas o que provoca uma repulsão do orbital de Cr(d) resultando numa contribuição maior dos outros orbitais pertencentes aos halogênios próximo ao nível de Fermi na banda de valência (veja 3 (b)). Esses resultados estão em bom acordo com dados da literatura Albaridy et al. (2020). A partir da Figura 3, pode-se verificar a característica de isolante de Mott do $Br_3Cr_2I_3$ ao analisar

a Figura 3 (a), onde a principal contribuição tanto para a banda de valência, tal como, para a banda de condução próximo ao nível de Fermi é associada ao orbital Cr(d). Entretanto, ao se considerar a interação coulombiana (o termo U) ocorre uma mudança na densidade de estados (DOS), conforme mostra Figura 3 (b). Em particular, logo abaixo do nível de Fermi nos orbitais de Cr(d), isto é, verifica-se que os orbitais I(p) tornam-se majoritários e os orbitais Cr(d) ficam mais localizados, o que mostra o caráter de isolante de Mott do $\text{Br}_3\text{Cr}_2\text{I}_3$.

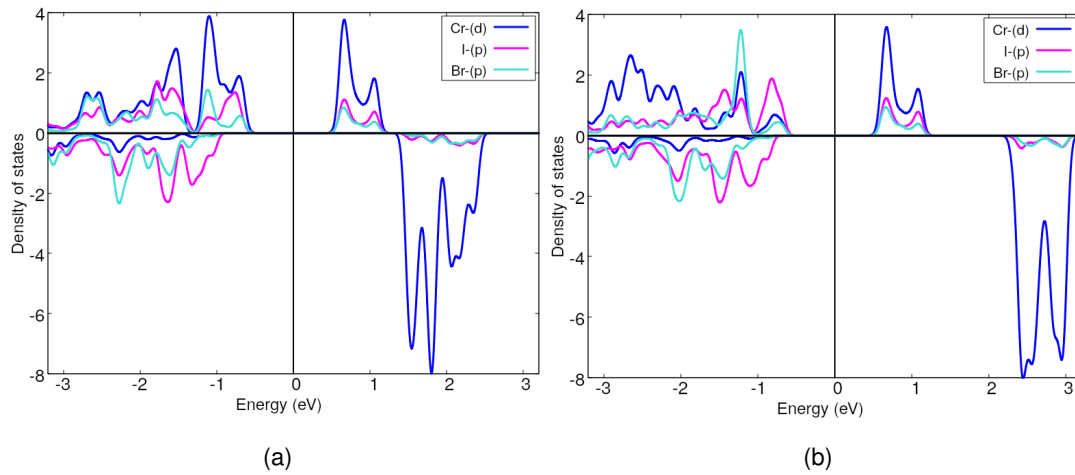


Figura 3: Densidade projetada de estados (PDOS) do $\text{Br}_3\text{Cr}_2\text{I}_3$ na fase ferromagnético (A) GGA-PBE e (B) GGA-PBE+U. O nível de Fermi foi deslocado para o valor zero de energia.

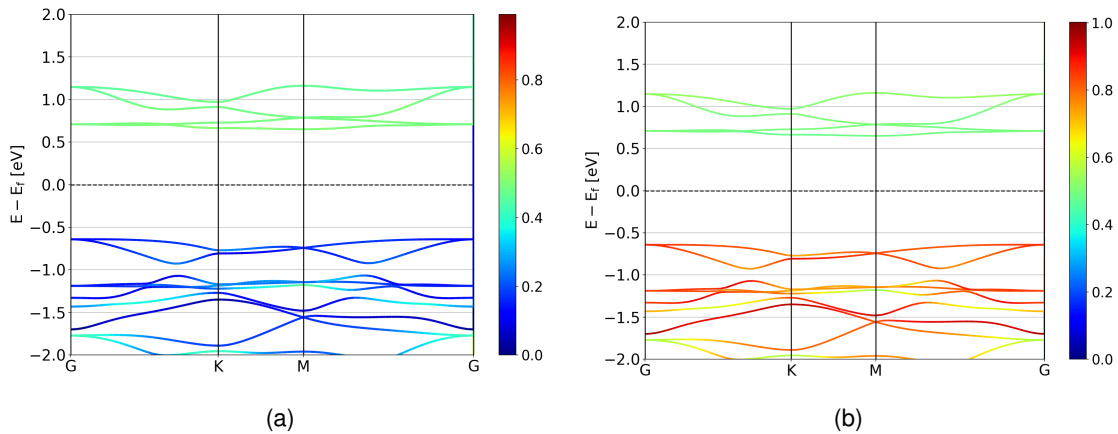


Figura 4: Estrutura de bandas da célula unitária do $\text{Br}_3\text{Cr}_2\text{I}_3$ projetada em relação à átomos particularmente selecionados. Onde, na Figura 4 (a) todos os átomos de Cromo do pristino são projetados e na Figura4 (b) os halogênios ou seja os átomos de Bromo e Iodo são projetados.

Em seguida, a partir da célula unitária do $\text{Br}_3\text{Cr}_2\text{I}_3$ foi construída uma supercélula $2 \times 2 \times 1$ e esta por sua vez foi relaxada até energias de 10^{-4} eV e utilizando a geometria relaxada foram calculadas as estruturas de bandas projetadas em relação à um gradiente de cores apresentado na Figura 4, onde as cores mais quentes (vermelho e laranja) indicam uma maior contribuição dos átomos projetados na banda e as cores mais frias indicam uma menor contribuição dos

Tabela 1: Tabela com as energias de troca dos sistema pristino e com o defeito de uma única vacância de cada átomo de Br, I e Cr.

Energia	Pristino	Iodo	Bromo	Cromo
$E_{afm} (Ry)$	-3503,1742054	-13461,31781389	-13561,73164567	-13764.29037562
$E_{fm} (Ry)$	-3503,17909495	-13461,33843697	-13561,75343141	-13764.30299823
E_{troca}/Cr	0.0332 (eV)	0.03507 (eV)	0.03705 (eV)	0.02453 (eV)

átomos projetados na banda. Dessa forma, a partir da Figura 4 (b) pode-se notar que, através da projeção dos átomos de Bromo e Iodo na estrutura de bandas do $Br_3Cr_2I_3$, que logo abaixo do nível de Fermi os halogênios tem a maior contribuição enquanto que pela Figura 4 (a) onde estão projetados os átomos de Cromo na banda nota-se que logo abaixo do nível de Fermi quase não há contribuição dos átomos de Cromo concordando com a densidade de estados apresentada na Figura 3 (b) mostrando o caráter de Isolante de Mott do sistema. Além disso, o *Bandgap* calculado para o sistema foi de 1.155 eV o que está em excelente acordo com resultados da literatura Albaridy et al. (2020).

Defeitos de vacâncias (Bromo, Iodo e Cromo) foram criados individualmente na supercelula do $Br_3Cr_2I_3$. Para cada defeito criado de átomo de Bromo(Br), Cromo(Cr) e Iodo(I), a estrutura atômica foi novamente relaxada. A energia de troca pode ser verificada através da Equação 1. Os resultados mostram que a ordem FM é predominante para qualquer uma das três vacâncias como se pode ver pela energia de troca positiva mostradas para cada uma das vacâncias apresentadas na Tabela 1. É importante salientar que, a energia de troca para os defeitos de Br e I são bastantes similares a energia do sistema pristino em temperaturas de até 61 K. Entretanto, para o defeito de Cr observa-se que o termo de troca é menor do que o sistema pristino e próximo ao valor da energia térmica na temperatura ambiente. Desta forma, com defeito de Cr o sistema $Br_3Cr_2I_3$ poderia apresentar uma mudança de ordem magnética de FM \rightarrow AFM na temperatura ambiente, isto é, $T = 300$ K. Diante deste resultado, foram determinads as estruturas de bandas para cada defeito criado, além de suas respectivas densidades de estados (DOS). Os resultados são semelhantes para todos os casos de defeitos estudados neste trabalho, onde nota-se que o valor do *Bandgap* diminui de 1.15 eV para cerca de 0.3 eV.

Na Figura 5 é mostrada a estrutura atômica da supercelula com defeito de Cromo, sendo o defeito denotado pela circunferência azul e os átomo vizinhos ao defeito são identificados pelas circunferências vermelhas. No caso do defeito de Cr, a Figura 6 mostra a estrutura de bandas do sistema, contendo a projeção dos átomos vizinhos do defeito, sendo que a cor vermelha indica uma maior contribuição na estrutura de bandas dos átomos vizinhos aos defeitos. Na banda de condução acima do nível de Fermi no intervalo de energia 0.15 – 0.25 eV observa-se o surgimento de bandas cuja a principal contribuição é devida aos átomos ao redor dos defeitos onde pela

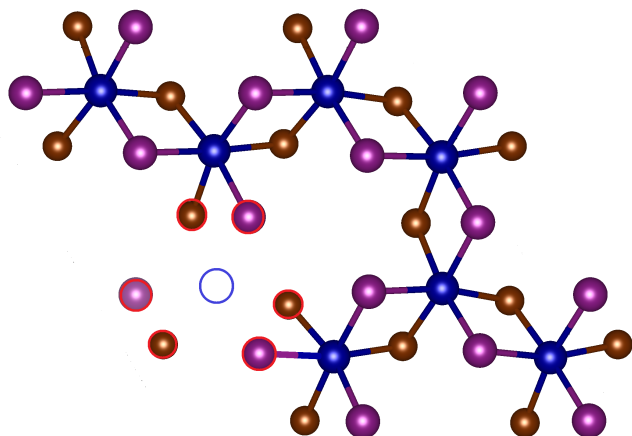


Figura 5: Geometria da supercelula de $Br_3Cr_2I_3$ onde é apresentada a vista superior do $Br_3Cr_2I_3$ com o defeito de Cromo denotado pela circunferência de cor azul. Os átomos com a circunferência vermelha representam os átomos vizinhos ao defeito que foram projetados na estrutura de bandas com defeito de Cromo apresentada na Figura 6.

densidade de estados apresentada na Figura 7 verifica-se que os halogênios (Br e I) são os contribuintes desses estados. Além disso, nota-se também que os estados ficam bem mais localizados em relação ao caso do sistema sem defeito (Figura 3(b)), e os estados que surgem acima do nível de Fermi provocam uma diminuição do *Bandgap* para 0.28 eV o que sugere que a diminuição do valor do *Bandgap* é causada pela vacância de Cromo já que a contribuição dos orbitais Cr(d) perto do nível de Fermi são bem menores indicando uma diminuição na repulsão desses orbitais e resultando na redução do caráter de isolante de Mott do $Br_3Cr_2I_3$.

Considerando o defeito de vacância de Br, onde a geometria é mostrada na Figura 8, e a circunferência de cor azul indica a remoção do átomo de Br. Em seguida, através do cálculo da estrutura de bandas, como mostrada na Figura 9, pode-se notar que, assim como o defeito de Cromo o valor do *Bandgap* para a vacância de Bromo diminui de 1.15 eV (pristino) para 0.323 eV . Além disso, a estrutura de bandas mostra duas novas bandas de energia uma acima do nível de Fermi próximo de 0.25 eV e outra abaixo do nível de Fermi em torno de -0.25 eV com uma dispersão muito pequena indicando um caráter bem localizado do estado associado. Esse resultado é corroborado com a DOS (Figura 10) que mostra que esses estados estão associados a hibridização dos orbitais do Cr(d) e I(p) majoritariamente.

Na Figura 10 é apresentada a densidade de estados do sistema com defeito de Br que juntamente com a estrutura de bandas, deixa claro que a maior contribuição próximo ao nível de Fermi são de dois estados bem localizados tanto na banda de valência quanto na banda de condução que são resultado da hibridização dos átomos de Iodo e Cromo em específico os orbitais *p* e *d* respectivamente.

O último defeito estudado no sistema $Br_3Cr_2I_3$ foi uma vacância de Iodo onde a configuração

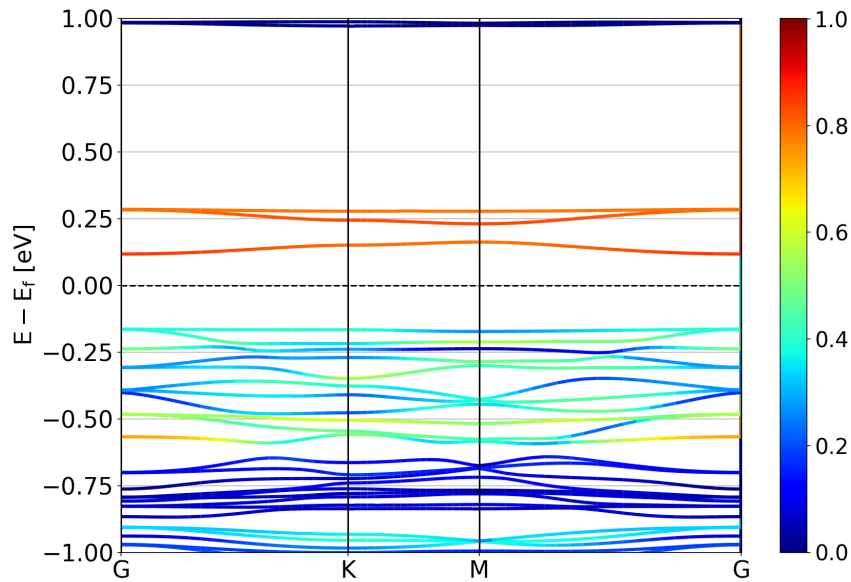


Figura 6: Estrutura de bandas do $\text{Br}_3\text{Cr}_2\text{I}_3$ com defeito de Cromo , onde a barra lateral é um gradiente de cores onde as cores mais quentes(vermelho , laranja) indicam uma maior contribuição dos átomos circutados em vermelho na figura 5 enquanto as cores mais frias (azul ,verde) representam uma contribuição menor.

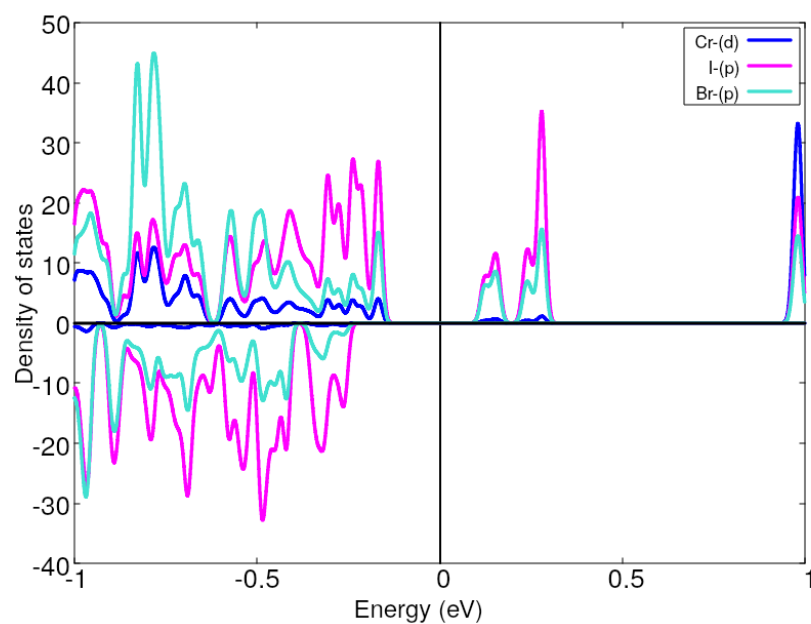


Figura 7: Densidade de estado do $\text{Br}_3\text{Cr}_2\text{I}_3$ com defeito de Cromo.

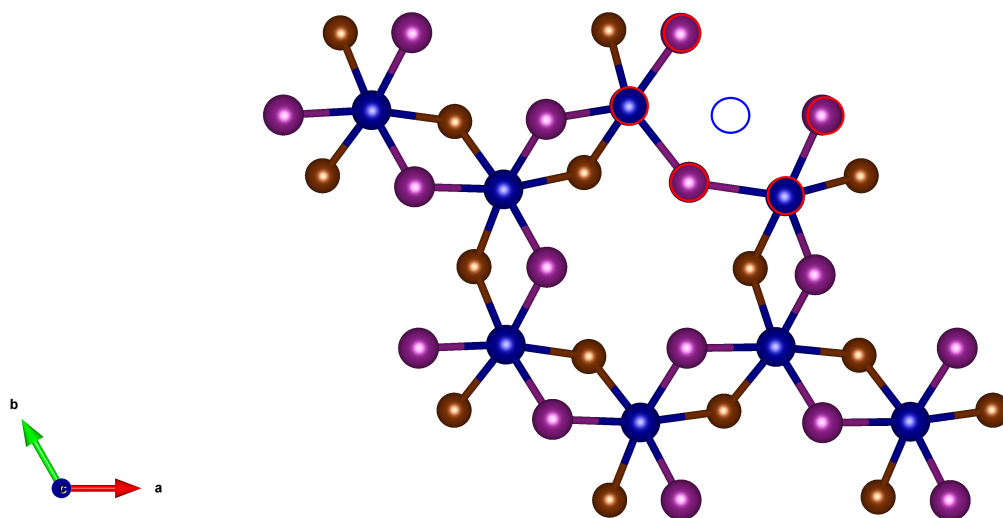


Figura 8: Geometria da supercelula de $Br_3Cr_2I_3$ onde é apresentada a vista superior do $Br_3Cr_2I_3$ com o defeito de Bromo denotado pela circunferência azul. Os átomos com a circunferência vermelha representam os átomos vizinhos ao defeito cujo os orbitais estão projetados na estrutura de bandas com defeito de Bromo.

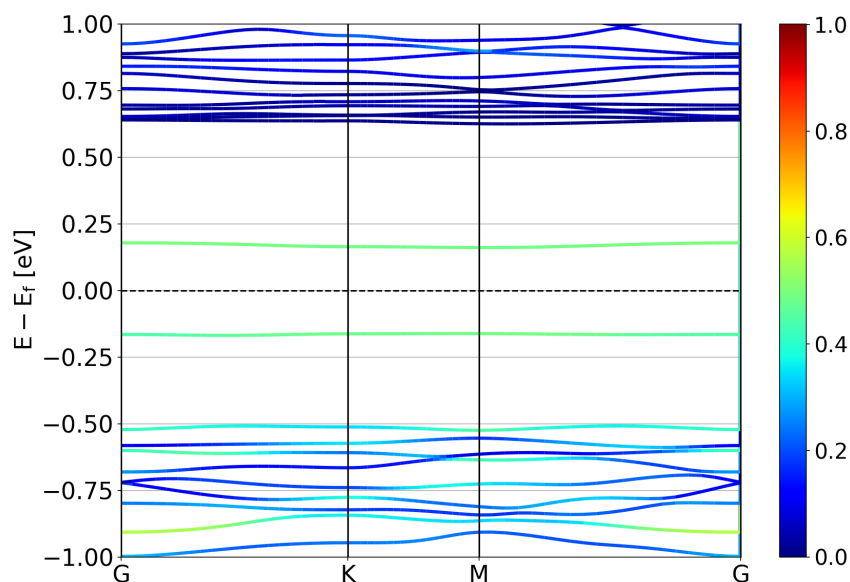


Figura 9: Estrutura de bandas do $Br_3Cr_2I_3$ com defeito de Bromo, onde a barra lateral é um gradiente de cores onde as cores mais quentes (vermelho, laranja) indicam uma maior contribuição dos átomos circundados em vermelho na figura 8 enquanto as cores mais frias (azul, verde) representam uma contribuição menor.

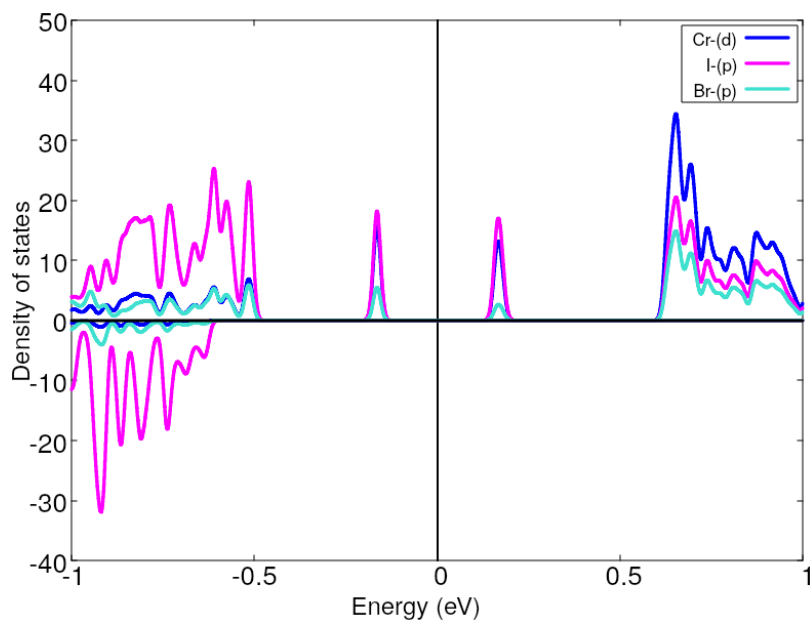


Figura 10: Densidade de estado do $\text{Br}_3\text{Cr}_2\text{I}_3$ com defeito de Bromo.

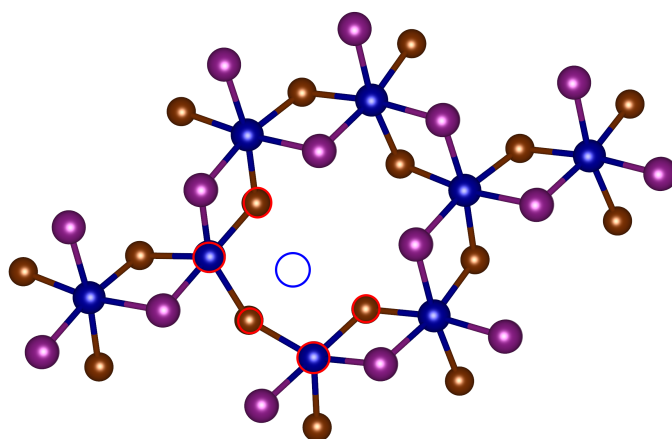


Figura 11: Geometria da supercelula de $\text{Br}_3\text{Cr}_2\text{I}_3$ onde é apresentada a vista superior do $\text{Br}_3\text{Cr}_2\text{I}_3$ com o defeito de iodo denotado pela circunferência azul. Os átomos com a circunferência vermelha representam os átomos vizinhos ao defeito cujo os orbitais estão projetados na estrutura de bandas com defeito de iodo.

atômica do defeito é mostrada na Figura 11. Da mesma forma, que nas figuras de defeito de Br e Cr anteriores, a vacância de I foi denotada por uma circunferência em cor azul e os átomos vizinhos à ela foram denotados em vermelho. Dessa forma, visando verificar a importância dos átomos vizinhos aos defeitos na estrutura de bandas próximo ao nível de Fermi foi utilizado o Gradiente de cores na estrutura de bandas como indicado na Figura 12 .

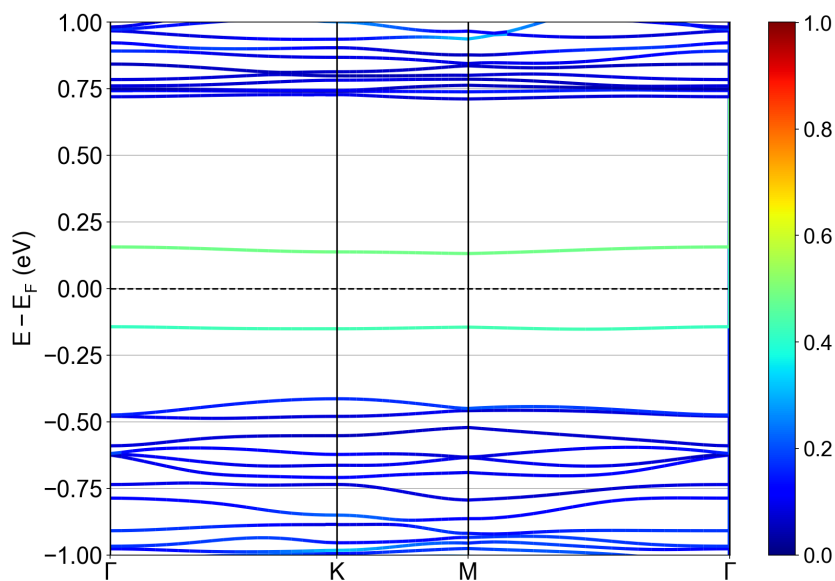


Figura 12: Estrutura de bandas do $\text{Br}_3\text{Cr}_2\text{I}_3$ com defeito de Iodo, onde a barra lateral é um gradiente de cores onde as cores mais quentes (vermelho, laranja) indicam uma maior contribuição dos átomos circundados em vermelho na figura 11 enquanto as cores mais frias (azul, verde) representam uma contribuição menor.

A Figura 12 mostra a estrutura de bandas para o defeito de vacância de Iodo, onde verifica-se o valor do *Bandgap* de 0.274 eV . Esse valor de *Bandgap* é menor do que o caso pristino, além disso, nota-se que existe o surgimento de duas novas bandas com pequena dispersão, sendo uma na banda de condução em torno de 0.125 eV e outra na banda de valência em torno de -0.125 eV . Essas bandas que surgem tem uma pequena contribuição dos átomos ao redor do defeito de Iodo. Vê-se também que os estados do sistema sem defeito sofreram uma repulsão indo para níveis mais altos de energia na banda de condução e níveis mais baixos da banda de valência. Além disso, a densidade de estados apresentada na Figura 13 mostram que os dois picos de estados que surgem próximos ao nível de Fermi são bem localizados o que concorda com as duas bandas com pouca dispersão presentes na estrutura de bandas com defeito de Iodo .

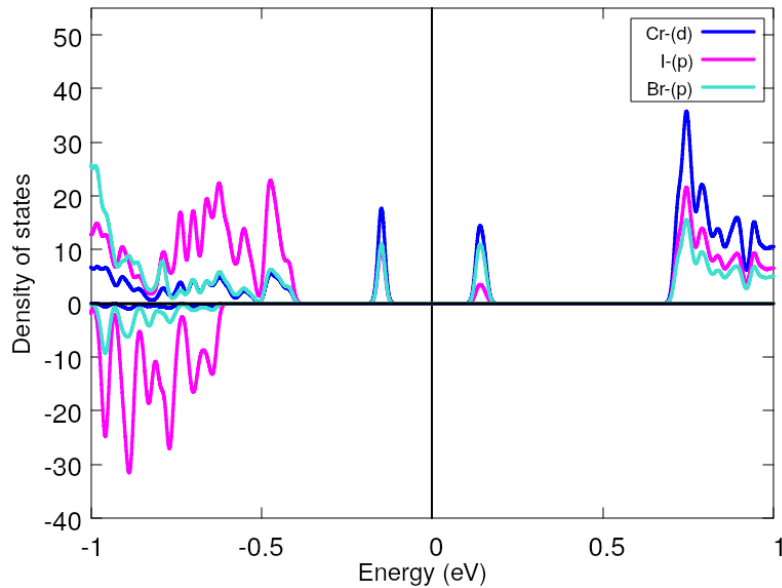


Figura 13: Densidade de estado do $\text{Br}_3\text{Cr}_2\text{I}_3$ com defeito de Iodo.

5 Discussão e Conclusões

A partir de cálculos de energia total foi investigado uma monocamada janus de $\text{Br}_3\text{Cr}_2\text{I}_3$ sem defeitos e defeitos de monovacâncias de Bromo, Cromo e Iodo.

Nossos resultados de estrutura eletrônica para o sistema $\text{Br}_3\text{Cr}_2\text{I}_3$ sem defeitos, mostrou ser um semiconductor ferromagnético de bandgap direto, com características de um isolante de Mott, e em acordo com resultados anteriores Albaridy et al. (2020). Por outro lado, visando estudar uma possível transição de fase magnética, assim como, observado a transição na monocamada de CrI_3 por Xu & Zou (2020) devido ao campo elétrico externo, foram criados monovacâncias de Cr, I e Br no $\text{Br}_3\text{Cr}_2\text{I}_3$.

Analisando a ordem magnética foi possível observar que o sistema se mantém ferromagnético com presença de qualquer uma das três monovacâncias consideradas. Contudo é ainda importante ressaltar que, para o defeito de Cr a energia de troca é próxima da energia térmica na temperatura ambiente (0.024 eV), ou seja, o sistema pode sofrer uma mudança de ordem magnética apenas devido à temperatura ambiente. Nossos resultados para o sistema $\text{Br}_3\text{Cr}_2\text{I}_3$ com defeitos de monovacância de Cr com concentração de $\sim 3\%$, mostra que é possível uma mudança de fase magnética em $T = 300 \text{ K}$ Wang et al. (2020)

Do ponto de vista de estrutura eletrônica, as estruturas de bandas das três configurações de monovacâncias sofrem uma redução do valor do *Bandgap* devido a criação de novos estados próximos ao nível de Fermi. A diminuição do valor do *Bandgap* ocorrem por causas diferentes em cada defeito, portanto, se faz necessário analisar caso a caso.

Ao se tratar o defeito da monovacância de Cr, por exemplo, a redução da contribuição do orbital Cr(d) próximo ao nível de Fermi sugere que o seu caráter de isolante de Mott diminui e essa redução provoca também uma diminuição do valor *Bandgap* e o surgimento de novos estado

acima do nível de Fermi, onde os principais orbitais que contribuem nessa faixa de energia são o Br(p) e I(p).

Por fim, para o defeito de monovacância de Br e I, observa-se uma repulsão dos estados perto nível de Fermi, isto é, os estados do $\text{Br}_3\text{Cr}_2\text{I}_3$ pristino são deslocados para níveis de energia mais baixos na banda de valência e para níveis mais altos de energia nas bandas de condução. Essa repulsão, implica no surgimento de novas bandas tanto acima quanto abaixo do nível de Fermi para o defeito de Bromo e Iodo reduzindo o valor do *Bandgap*.

Referências

- Albaridy, R., Manchon, A., & Schwingenschlögl, U. (2020). Tunable magnetic anisotropy in cr-trihale janus monolayers. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 32(35):355702.
- Dion, M., Rydberg, H., Schröder, E., Langreth, D. C., & Lundqvist, B. I. (2004). Van der waals density functional for general geometries. *Physical review letters*, 92(24):246401.
- Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., Ceresoli, D., Chiarotti, G. L., Cococcioni, M., Dabo, I., et al. (2009). Quantum espresso: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *Journal of physics: Condensed matter*, 21(39):395502.
- Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S. V., Grigorieva, I. V., & Firsov, A. A. (2004). Electric field effect in atomically thin carbon films. *science*, 306(5696):666–669.
- Ubrig, N., Wang, Z., Teyssier, J., Taniguchi, T., Watanabe, K., Giannini, E., Morpurgo, A. F., & Gibertini, M. (2019). Low-temperature monoclinic layer stacking in atomically thin cri3 crystals. *2D Materials*, 7(1):015007.
- Wang, R., Su, Y., Yang, G., Zhang, J., & Zhang, S. (2020). Bipolar doping by intrinsic defects and magnetic phase instability in monolayer cri3. *Chemistry of Materials*, 32(4):1545–1552.
- Xu, R. & Zou, X. (2020). Electric field-modulated magnetic phase transition in van der waals cri3 bilayers. *The journal of physical chemistry letters*, 11(8):3152–3158.