

文章编号:0253-2328(2025)02-0143-07

# 一维受限反铁磁链 $MnSe_2$ 的结构和性质

丁 驰<sup>1</sup>, 鲁 清<sup>1</sup>, 孙 建<sup>1\*</sup>, 朱怡杰<sup>1</sup>, 王晓梦<sup>2</sup>

(1. 南京大学 物理学院, 江苏 南京 210093; 2. 宁夏大学 物理学院, 宁夏 银川 750021)

**摘要:**一维磁性体系因其显著的量子限域效应, 展现出极为丰富的量子现象和行为。探索更多新颖的一维磁性结构并深入揭示其磁性特性, 具有极为重要的科学价值。采用第一性原理计算方法, 系统研究了 Mn 和 Se 元素在 (8, 8) 碳纳米管中的相互作用能, 并分别拟合了其受限束缚势。通过晶体结构预测方法, 发现了一种新型的一维  $MnSe_2$  纳米链结构, 该结构能够在 (8, 8) 碳纳米管中稳定存在, 其对应的二维拓扑结构呈现出独特的五元环构型。动力学模拟结果表明, 该材料在常温下具有良好的热稳定性。基于束缚势的电子结构计算显示, 该材料是一种绝缘体, 其磁基态为反铁磁相。进一步地, 通过构建磁相互作用模型并进行蒙特卡洛模拟, 得到  $MnSe_2$  的磁转变温度约为 28 K。此外, 还计算了碳管与  $MnSe_2$  复合体系的晶体和电子结构, 验证了受限束缚势的可靠性。

**关键词:**反铁磁链; 受限体系; 结构预测

**分类号:**(中图)O469

**文献标志码:**A

低维材料由于具有高比表面积和显著的量子限域效应, 能够承载丰富的物理现象, 例如, 魔角超导<sup>[1]</sup>和激子绝缘态<sup>[2]</sup>等。随着纳米技术的飞速发展, 多种二维材料, 如过渡金属二硫化物(TMDs)<sup>[3-4]</sup>、MXenes<sup>[5]</sup>和单质烯<sup>[6-7]</sup>等, 已陆续被实验合成。然而, 与二维材料相比, 一维材料更容易受到热涨落的影响, 其稳定性通常较差, 难以被成功合成, 进而限制了其在科学研究和技术应用中的发展。因此, 发现和合成更多稳定的一维体系, 对于深入的理论研究以及实际技术应用具有至关重要的意义。碳纳米管因其优异的热稳定性、高化学惰性和良好的机械性能, 为一维材料的稳定存在提供了一个理想的容器平台。

已有研究表明, 多种主族元素单质以及过渡金属化合物能够在碳纳米管内部稳定存在。其中部分材料表现出拓扑特性<sup>[8]</sup>和电荷诱导的磁性相变<sup>[9]</sup>, 显示出在新一代霍尔器件和自旋电子器件中的潜在应用价值。截至目前, 已经成功合成的一维磁性体系主要包括金属纳米线阵列(如 Fe 和 CoNi)以及过

渡金属卤化物和硫属化合物(如  $VSe_3$  和  $CrCl_3$ )等<sup>[10]</sup>。

然而, 考虑到实验合成手段通常成本高且周期长, 结合第一性原理计算与受限结构预测的方法有望加速对一维受限体系的预测与筛选, 从而为后续的实验和理论研究提供有力的理论支持。过渡金属磁性元素主要包括 V, Cr, Mn, Fe, Co 等, 其中 V 和 Cr 的相关研究已有报道, 但其结构类型相对单一。因此, 本文专注于与它们相邻的磁性元素 Mn, 致力于寻找并预测其相应的硫族化合物 Mn-Se 体系的结构, 并深入研究其磁性性质。

## 1 计算方法

本文采用基于密度泛函理论(DFT)的第一性原理计算程序(VASP)<sup>[11]</sup>进行计算。在计算中, 电子之间的交换-关联泛函采用广义梯度近似(GGA)方法, 并具体使用 Perdew-Burke-Ernzerhof(PBE)参数形式<sup>[12]</sup>。受限束缚势通过 Morse 形式的势函数进行拟合。在碳纳米管与单质原子之间的相互作用计算中, 考虑了 D3 形式的范德华力<sup>[13]</sup>。为了

收稿日期: 2025-04-24

基金项目: 重点新材料研发及应用国家科技重大专项项目(2024ZD0607000); 江苏省卓越博士后项目(2024ZB002)

作者简介: 丁驰(1996—), 男, 博士, 南京大学博士后, 主要从事低维凝聚态体系的结构预测和磁性性质研究, (电子信箱) chiding@nju.edu.cn。

\* 通信联系人: 孙建(1979—), 男, 教授, 博士, 博士生导师, 主要从事高压物理、计算凝聚态物理、材料设计与模拟、行星内部物质等研究, (电子信箱) jiansun@nju.edu.cn。

引用格式: 丁驰, 鲁清, 孙建, 等. 一维受限反铁磁链  $MnSe_2$  的结构和性质[J]. 宁夏大学学报(自然科学版中英文), 2025, 46(2): 143-149.

准确描述磁性 Mn 元素的 d 轨道,本文采用 DFT+U 方法<sup>[14]</sup>,并施加了 4.0 eV 的 U 值。

在计算过程中,采用赝势方法处理电子与离子的相互作用,价电子的处理则采用投影缀加波(PAW)方法<sup>[15]</sup>。平面波的动能截止能设置为 600 eV,以确保计算的精度。布里渊区的采样采用 Monkhorst-Pack 方法<sup>[16]</sup>,在  $k_z$  方向以  $2\pi \times 0.03 \text{ \AA}^{-1}$  的间距生成  $k$  点,以确保充分采样。

在结构优化过程中,收敛准则设定为:原子受力小于  $3 \times 10^{-4} \text{ eV/\AA}$ ,总能量变化小于  $1 \times 10^{-5} \text{ eV}$ 。分子动力学模拟采用 NVT 系综,模拟步长为 1 fs,模拟时长超过 10 ps。晶体结构预测采用机器学习与图论加速的全局预测方法(MAGUS)<sup>[17-19]</sup>。基于一维棒群对称性,随机生成 1 000 个初始晶体结构。对每个结构,使用第一性原理计算的能量加上束缚能作为总能,进行结构优化,并筛选出能量最低的结构。成键相互作用的计算采用 Chgemo1 软件包<sup>[20-21]</sup>,并根据 DDEC6 电荷分配方式进行处理。磁转变温度的计算采用 Mcsolver 软件包<sup>[22]</sup>,使用  $1 \times 1 \times 10$  的超胞,蒙特卡洛热平衡步数为 20 万次,采样步数为 40 万次。

## 2 结果和讨论

### 2.1 结构和稳定性

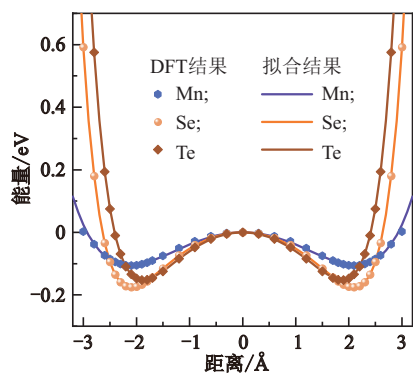
通过第一性原理计算,得到了一种一维材料,并验证了其动力学稳定性,见图 1。具体来说,首先获得了 Mn 和硫族元素(Se, Te)在(8,8)碳纳米管中的相互作用能,计算结果见图 1(a),其中散点代表第一性原理计算得到的数据。基于这些数据,拟合了下列解析形式的势函数以获得束缚势参数:

$$E(r) = d \left[ (1 - e^{-a(r_0-r)})^2 + (1 - e^{-a(r_0+r)})^2 - 2 \right]$$

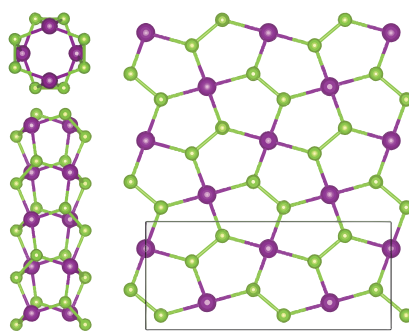
其中: $r$ 为独立变量,表示单质原子与碳管中心的距离; $d, a, r_0$ 为需要拟合的参数。不同单质元素对应的束缚势参数列于表 1,束缚势的直观表示见图 1(a)中曲线。

表 1 各种单质在(8,8)CNT中拟合受限势的参数

元素	参数 $d/\text{eV}$	参数 $a/(\text{\AA}^{-1})$	参数 $r_0/\text{\AA}$
Mn	1.141	0.423	4.987
Se	0.269	1.111	4.222
Te	0.283	1.061	3.802

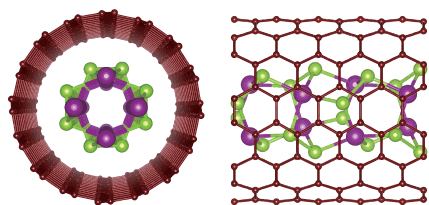


(a) 相互作用能和束缚势曲线



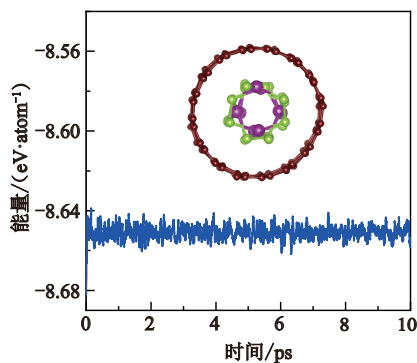
MnSe<sub>2</sub>@(8,8) 碳管束缚势

(b) 一维MnSe<sub>2</sub>结构及其二维等价拓扑构型



MnSe<sub>2</sub>@(8,8) 碳纳米管

(c) 碳管-MnSe<sub>2</sub>复合体系结构



(d) 复合体系在300 K下的动力学结果,包括能量演化曲线和最终构型

图 1 MnSe<sub>2</sub>的结构及其动力学稳定性

图 1(a)显示束缚相互作用呈现出类似双势阱的形态,碳管中心对应能量极大值点。这说明各元

素更倾向于被碳管吸引至偏离碳管中心的某个位置。对于(8,8)碳纳米管,其直径约为  $10.85 \text{ \AA}$ ,而

能量最低点与碳纳米管的距离为  $3.2 \sim 3.4 \text{ \AA}$ 。碳管对各元素的吸引作用强弱可以通过势阱深度(即束缚势极小值点的能量与碳管中心能量的差值)来判断。研究发现,碳管对不同元素的势阱深度存在显著差异:例如,对于过渡金属 Mn,其势阱深度较小,约为  $100 \text{ meV}$ ;而对于硫族元素,其势阱深度则较大,为  $170 \sim 200 \text{ meV}$ 。从计算得到的相互作用能曲线来看,碳管与各种单质之间的能量随距离变化较为平缓,未出现突变点。这表明在本文研究的距离范围内,碳管与各元素之间不会形成化学键,其相互作用仍处于范德华力或库仑静电相互作用的范畴。这种平滑的曲线也表明碳管的作用可以通过解析形式的束缚势来描述。

考虑到 Mn 的常见化合价为 +4 或者 +2,而 Se 的化合价为 -2,因此  $\text{MnSe}_2$  体系形成稳定化合物的可能性很大。基于上述束缚势场,本文通过高通量的定组分晶体结构预测,发现了一种一维的  $\text{MnSe}_2$  纳米链,其结构见图 1(b)。 $\text{MnSe}_2$  的晶格常数为  $a=b=20 \text{ \AA}$ ,  $c=6.25 \text{ \AA}$ ,具体的原子位置见表 2。在同一  $x$ - $y$  平面内有 2 个 Mn 原子,相邻两层的两个 Mn 原子对彼此垂直。最邻近的 2 个 Se 原子之间的距离约为  $2.4 \text{ \AA}$ 。与 Se 原子相比, Mn 原子更靠近碳管中心。

通过对这种管状结构沿  $c$  方向剪开并铺平,可以得到其二维对应的拓扑结构,如图 1(b)所示。在该结构中,2 个 Mn 原子与 3 个 Se 原子构成一个五元环,而二维  $\text{MnSe}_2$  体系则是由这些五元环相互堆叠而成。这种基于五元环的二维结构在一些过渡金属硫族化合物中较为常见,例如  $\text{MnS}_2$ ,  $\text{PdSe}_2$  和  $\text{PdTe}_2$  等<sup>[23-25]</sup>,其中  $\text{PdSe}_2$  和  $\text{PdTe}_2$  已经通过实验成功合成。然而,由五元环构型组成的一维结构则是

表 2  $\text{MnSe}_2$  结构的原子分数坐标

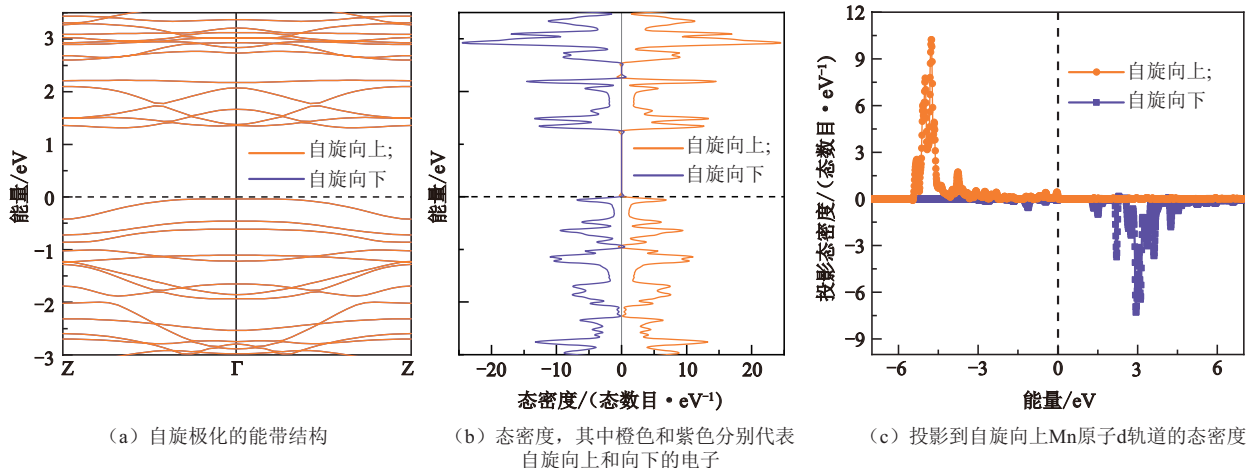
原子序号	元素	坐标 $x$	坐标 $y$	坐标 $z$
1	Mn	0.590 43	0.500 02	0.250 00
2	Mn	0.409 57	0.499 98	0.250 00
3	Mn	0.500 03	0.409 57	0.750 00
4	Mn	0.499 97	0.590 42	0.750 00
5	Se	0.614 87	0.547 16	0.868 90
6	Se	0.385 13	0.452 83	0.868 89
7	Se	0.547 16	0.385 12	0.131 11
8	Se	0.452 83	0.614 88	0.131 11
9	Se	0.385 09	0.547 09	0.631 11
10	Se	0.614 91	0.452 90	0.631 11
11	Se	0.452 90	0.385 10	0.368 89
12	Se	0.547 10	0.614 89	0.368 89

首次被发现。

对于由一维  $\text{MnSe}_2$  体系与碳纳米管组成的复合系统(见图 1(c)),采用第一性原理计算进行了结构优化。研究结果表明,一维  $\text{MnSe}_2$  在碳纳米管中能够保持较高的对称性和完整性。进一步通过分子动力学模拟,对上述复合体系在室温(约  $300 \text{ K}$ )下的演化行为进行了分析(见图 1(d)),发现  $\text{MnSe}_2$  的四方结构具有良好的热稳定性。这一结果验证了该材料在常规条件下存在的可能性。

## 2.2 电子结构

初步计算结果表明,一维  $\text{MnSe}_2$  体系的反铁磁构型能量低于铁磁构型的能量。因此,基于反铁磁构型,对该材料的电子结构进行了进一步计算,见图 2。从能带结构来看,自旋向上和自旋向下的能带结构基本重叠,具有相同的能量本征值,这种能量简并性受到平移和旋转对称性的保护。

图 2 一维  $\text{MnSe}_2$  的电子结构

态密度计算结果显示,该材料表现出明显的低维特征,存在大量的孤立峰。从能带结构和态密度的分析中可以发现,MnSe<sub>2</sub>的带隙约为 1.35 eV。此外,还研究了不同关联作用对带隙的影响。计算表明,当U值从 1 eV 增加到 6 eV 时,带隙从 0.87 eV 单调增大到 1.51 eV。虽然不同的U值对带隙有一定影响,但并不会改变体系的绝缘性能。

为了更深入地揭示该材料的电子轨道信息,对其中一个自旋朝上的Mn原子进行了态密度投影。如图 2(c)所示,所有自旋朝上的d轨道态密度均被占据,而自旋朝下的d轨道则完全未被占据。这一结果表明,MnSe<sub>2</sub>中的Mn原子处于高自旋状态。Mn单质的价电子排布为 4s<sup>2</sup>3d<sup>5</sup>,而在MnSe<sub>2</sub>中,Mn原子的d轨道仍被 5 个电子占据,因此可以推断Mn原子仅失去了 4s 轨道上的电子,表现出 Mn<sup>2+</sup> 离子的特性。

通过对Se原子的键序计算,发现最邻近的Se-Se原子对形成了单键,键序约为 1.0;而其他Se原子之间的键序接近 0,表明它们之间没有形成化学键。由于在MnSe<sub>2</sub>中,每个Se原子仅与另一个Se原子形成单键,因此每个Se原子只需再获得一个电子即可满足八隅规则。此时,Se元素表现出[Se<sub>2</sub>]<sup>2-</sup>

离子的特性,这与 Mn<sup>2+</sup> 离子的性质相匹配。因此,MnSe<sub>2</sub>纳米链可以被描述为 Mn<sup>2+</sup>[Se<sub>2</sub>]<sup>2-</sup> 的结构。

由于每个Mn原子有 5 个自旋方向一致的轨道被占据,其磁矩应为整数 5 μ<sub>B</sub>。第一性原理计算得到的投影磁矩大小约为 4.5 μ<sub>B</sub>,这一结果与轨道分析的结论较为一致。

### 2.3 磁性性质

接下来,通过海森堡模型深入揭示一维 MnSe<sub>2</sub> 体系的磁性性质,见图 3。如图 3(a)所示,模型中考虑了 3 种形式的磁相互作用:面内的磁相互作用 J<sub>1</sub>,面外的最邻近相互作用 J<sub>2</sub>,以及面外的次邻近相互作用 J<sub>3</sub>。由于相邻的两 Mn 原子对彼此垂直,面外的相互作用 J<sub>2</sub> 存在多个方向。相应的海森堡相互作用模型可以表示为

$$H = J_1 \sum_{i,j \neq j'} S_{i,j} S_{i,j'} + J_2 \sum_{i,j,j'} S_{i,j} S_{i+1,j'} + J_3 \sum_{i,j} S_{i,j} S_{i+2,j} + D \sum_{i,j} |S_{i,j}^z|^2$$

其中; $i(i=1,2,3,\dots,N)$ 表示沿 $z$ 轴的索引序列; $j$ 表示面内的索引序列,由于面内只有两个原子, $j=1,2$ ;S<sub>*i,j*</sub>表示第*i*个平面内第*j*个原子的自旋角动量;S<sub>*i,j*</sub><sup>z</sup>表示该自旋角动量的 $z$ 方向投影; $D$ 表示磁矩朝向三维不同方向时的磁各向异性参数。

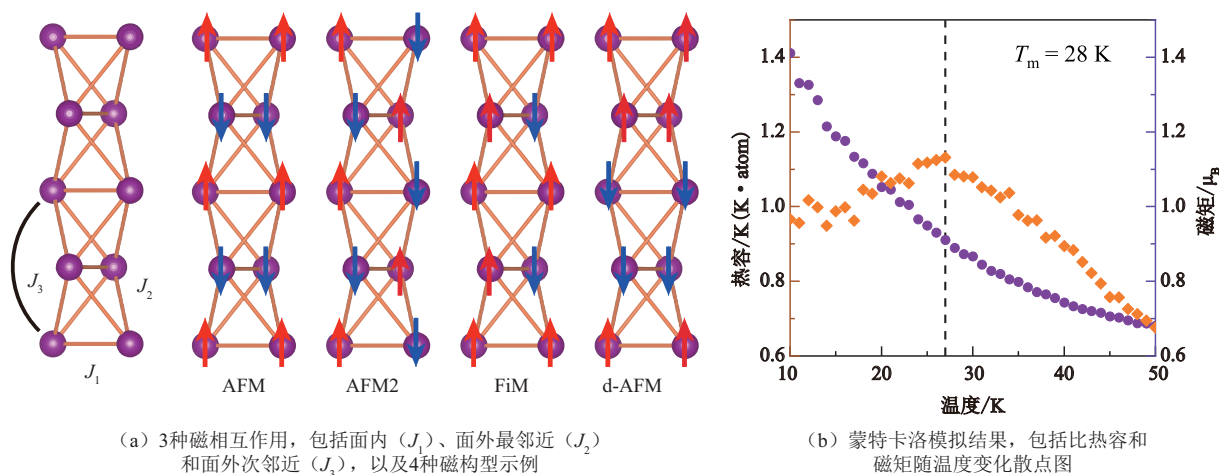


图 3 磁构型及温度效应

通过计算不同磁构型的能量,可以确定上述不同磁相互作用的系数。考虑了多种磁构型,包括面内铁磁面外反铁磁态(AFM)、面内反铁磁态(AFM2)、亚铁磁态(FiM)以及双周期反铁磁态(d-AFM)。这些磁构型的能量可以表示为

$$E_{\text{AFM}} = E_0 + (2J_1 - 8J_2 + 4J_3) S^2,$$

$$E_{\text{AFM2}} = E_0 + (-2J_1 + 0J_2 + 4J_3) S^2,$$

$$E_{\text{FiM}} = E_0 + (0J_1 + 0J_2 + 4J_3) S^2,$$

$$E_{\text{d-AFM}} = 2E_0 + (4J_1 + 0J_2 - 8J_3) S^2.$$

其中; $E_0$ 表示非磁能量; $E_{\text{AFM}}, E_{\text{AFM2}}, E_{\text{FiM}}$ 和 $E_{\text{d-AFM}}$ 分别表示对应磁构型的能量;S代表自旋角动量系数。考虑到磁矩为 5 μ<sub>B</sub>,此处S采用 5/2。根据上述公式,相应的磁相互作用系数可以表示为

$$J_1 = \frac{E_{\text{FiM}} - E_{\text{AFM2}}}{2S^2},$$

$$J_2 = \frac{2E_{\text{FiM}} - E_{\text{AFM}} - E_{\text{AFM2}}}{8S^2},$$

$$J_3 = \frac{4E_{\text{FiM}} - E_{\text{d-AFM}} - 2E_{\text{AFM2}}}{16S^2}.$$

最终计算得到的磁相互作用参数为  $J_1 = 0.850 \text{ meV}$ ,  $J_2 = 1.252 \text{ meV}$ ,  $J_3 = 0.604 \text{ meV}$ 。从这些结果可以看出,面内和面外的磁相互作用均为反铁磁形式。其中,面外最邻近相互作用  $J_2$  的强度最高,并且耦合数量最多,因此在该材料的磁性行为中占据主导地位,导致其磁基态为 AFM 构型。相比之下,  $J_1$  与  $J_3$  两种类型的相互作用不利于形成 AFM 形式的磁构型,与  $J_2$  类型的磁耦合存在一定冲突,从而引入了一定程度的磁阻挫。然而,  $J_1$  和  $J_3$  的数值相对较小,且耦合数量较少,因此它们不足以改变材料的磁基态。

此外,还通过施加自旋轨道耦合相互作用,计算了该材料的磁各向异性性能。研究发现,该材料的能量在  $x$ - $y$  平面内基本一致,更倾向于沿着  $z$  轴方向排列。最终计算得到的磁各向异性系数为  $D = -0.00752 \text{ meV}$ 。与最大的磁耦合系数  $J_2$  相比,该各向异性系数  $D$  的数值非常小,几乎可以忽略不计。

进一步分析表明,对于不同的  $U$  值, MnSe<sub>2</sub> 体系的磁基态始终是面内铁磁、面外反铁磁的 AFM 构型。这表明,尽管  $U$  值的变化会对体系的电子结构产生一定影响,但其磁基态的性质保持稳定,始终倾向于 AFM 构型。

基于上述构建的海森堡模型以及相应的磁相

相互作用参数,采用蒙特卡洛方法,对体系在不同温度下的磁性性质进行了计算,结果见图 3(b)。研究发现,磁矩随着温度的升高呈现出线性减小的趋势,这与三维体系的行为有显著差异。通常情况下,低维体系由于其较小的维度限制,表现出更强的热涨落效应。在不存在磁各向异性的情况下,低维体系甚至无法实现长程磁有序。

对于一维 MnSe<sub>2</sub> 体系,进一步计算了热容随着温度变化的情况。结果显示,其奈尔温度约为 28 K,这一结果与文献[10]中发现的其他一维材料的特征较为一致。然而,预测并实现具有更高居里温度的一维体系仍然是低维凝聚态物理领域的一个重要课题。

### 2.4 碳管效应

最后,对碳纳米管与 MnSe<sub>2</sub> 复合体系的电子性质进行了计算。如图 4 所示,黑色线条表示能带结构,而红色和蓝色的点分别代表投影到 MnSe<sub>2</sub> 体系自旋向上和自旋向下方向上的强度。结果表明,碳纳米管的狄拉克点仍然出现在费米面附近,并且未与 MnSe<sub>2</sub> 的能带发生杂化。这表明碳纳米管与 MnSe<sub>2</sub> 之间没有形成化学键,其相互作用主要以范德华力或库仑力为主, MnSe<sub>2</sub> 的电子性质得到了很好的保持。

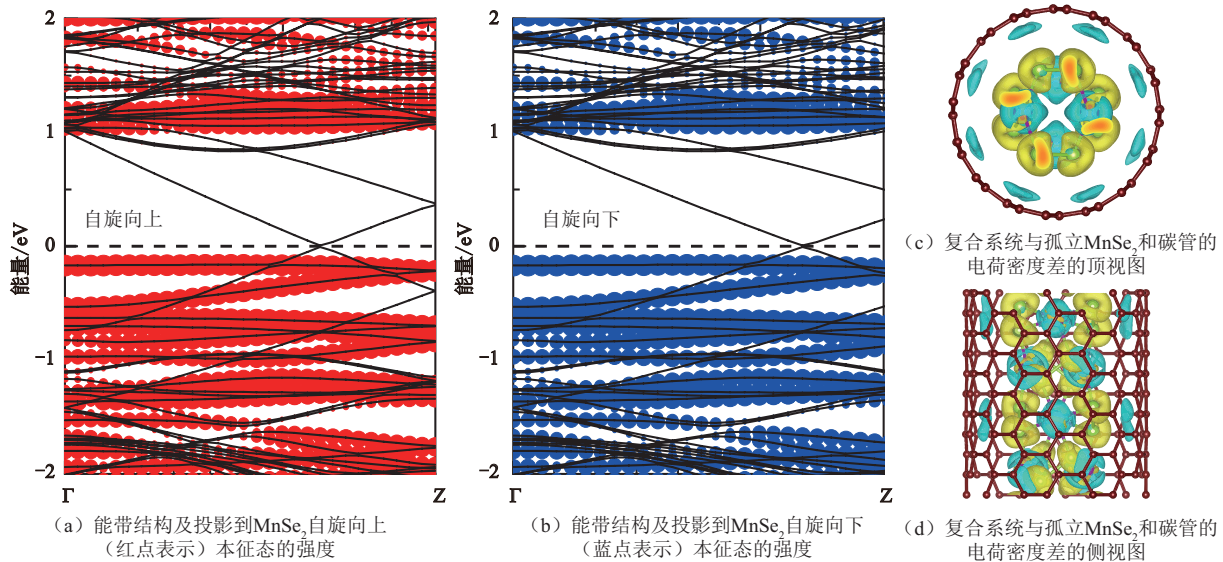


图 4 复合体系电子性质

此外,计算了复合体系与碳纳米管和 MnSe<sub>2</sub> 孤立体系相比的电荷密度差。结果显示,碳纳米管与 MnSe<sub>2</sub> 之间的电荷转移较少,仅有一小部分电子转移到受限材料中。这一结果与能带结构中费米能级位置略高于 MnSe<sub>2</sub> 体系的价带顶相一致。这种较少的电荷转移与 MnSe<sub>2</sub> 本身良好的离子性质密切相关。Mn<sup>2+</sup>[Se<sub>2</sub>]<sup>2-</sup> 的离子构型保证了该材料维持良好

的电中性,因此不需要引入额外的电子。

从能带结构中可以看出,自旋向上和自旋向下的能带能量简并性得到了很好的保持。在碳管-MnSe<sub>2</sub> 复合系统中,来自 MnSe<sub>2</sub> 的能带表现出约 1.2 eV 的带隙,这与基于束缚势优化的 MnSe<sub>2</sub> 结构得到的结果较为一致,从而验证了受限束缚势的可靠性。带隙减小的原因可能主要有以下两个方面:

1)结构形变的影响:碳管对 $\text{MnSe}_2$ 的作用并不能完全用均匀的柱状势场代替。由于碳管的库仑排斥作用在不同位置并不一致,同时碳管的变形以及碳管与 $\text{MnSe}_2$ 之间的晶格不匹配,导致 $\text{MnSe}_2$ 发生形变。这些形变最终导致了带隙的减小。

2)电荷转移的影响:碳管上的部分导电电子转移到 $\text{MnSe}_2$ 体系中,与 $\text{MnSe}_2$ 中的在位电子相互作用,增强了 $\text{MnSe}_2$ 体系的电子交换作用。这种增强的电子交换作用导致了带隙的减小。

综上所述,结构形变和电荷转移的共同作用,导致了碳管- $\text{MnSe}_2$ 复合系统中 $\text{MnSe}_2$ 带隙的减小。

近年来,众多一维过渡金属硫族和卤族化合物在碳纳米管中成功合成,例如一维磁性链 $\text{VSe}_3$ 和 $\text{CrI}_3$ 等。 $\text{MnSe}_2$ 体系与这些材料在结构和性质上并无显著区别,因此也有望在不久的将来通过实验得以实现,其结构和磁性性质值得进一步深入探索。

基于本文的相关研究数据,特别强调,只有特定尺寸的碳纳米管才能提供合适的受限空间,以满足相关材料的实验合成需求。对于一维 $\text{MnSe}_2$ 体系而言,(8,8)碳纳米管以及具有相似直径的纳米管是实验合成的首选。

### 3 总结

本文通过构建束缚势并结合结构预测方法,成功预测了一种可以在碳纳米管中稳定存在的一维受限纳米链 $\text{MnSe}_2$ 。该材料呈现出独特的五元环结构,其中Mn原子处于高自旋态,相邻的Se原子之间形成单键,整体表现出良好的离子性质,即 $\text{Mn}^{2+}[\text{Se}_2]^{2-}$ 。电子结构计算表明,该材料是一种优良的磁性绝缘体,带隙约为1.3 eV。

进一步计算了该材料不同磁构型的能量,发现其磁基态为面内铁磁、面外反铁磁的构型。基于此,构建了该体系的海森堡模型,并计算了相应的磁相互作用系数。结合蒙特卡洛模拟,预测该材料的反铁磁奈尔温度约为28 K。

此外,对比了基于束缚势的计算结果与基于碳管的计算结果,发现两者基本一致:碳管与受限 $\text{MnSe}_2$ 之间不存在能带杂化,碳管可以作为一维体系的良好容器。鉴于实验上已经成功合成了若干在碳纳米管中稳定的受限磁性体系, $\text{MnSe}_2$ 体系也有望在不久的将来被实验实现,其结构和磁性性质值得进一步探索。

### 参考文献:

- [1] CAO Yuan, FATEMI V, FANG Shiang, et al. Unconventional superconductivity in magic-angle graphene superlattices[J]. Nature, 2018, 556: 43-50.
- [2] VARSANO D, PALUMMO M, MOLINARI E, et al. A monolayer transition-metal dichalcogenide as a topological excitonic insulator[J]. Nature Nanotechnology, 2020, 15: 367-372.
- [3] XI Xiaoxiang, WANG Zefang, ZHAO Weiwei, et al. Ising pairing in superconducting  $\text{NbSe}_2$  atomic layers[J]. Nature Physics, 2016, 12: 139-143.
- [4] LI Yiwei, ZHENG Huijun, FANG Yuqiang, et al. Observation of topological superconductivity in a stoichiometric transition metal dichalcogenide  $2\text{M-WS}_2$ [J]. Nature Communications, 2021, 12: 2874.
- [5] AKHTER R, MAKTEDAR S S. MXenes: A comprehensive review of synthesis, properties, and progress in supercapacitor applications[J]. Journal of Materials, 2023, 9: 1196-1241.
- [6] VOGT P, DE PADOVA P, QUARESIMA C, et al. Silicene: Compelling experimental evidence for graphene-like two-dimensional silicon[J]. Physical Review Letters, 2012, 108: 155501.
- [7] XIE Zhongjie, ZHANG Bin, GE Yanqi, et al. Chemistry, functionalization, and applications of recent monoelemental two-dimensional materials and their heterostructures[J]. Chemical Reviews, 2022, 122: 1127-1207.
- [8] PHAM T, OH S, STONEMEYER S, et al. Emergence of topologically nontrivial spin-polarized states in a segmented linear chain[J]. Physical Review Letters, 2020, 124: 206403.
- [9] LEE Y, CHOI Y W, LEE K, et al. 1D magnetic  $\text{MX}_3$  single-chains ( $M = \text{Cr}, \text{V}$  and  $X = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$ ) [J]. Advanced Materials, 2023, 35: 2307942.
- [10] LI Yunfei, LI Alei, LI Jing, et al. Efficient synthesis of highly crystalline one-dimensional  $\text{CrCl}_3$  atomic chains with a spin glass state[J]. ACS Nano, 2023, 17: 20112-20119.
- [11] KRESSE G, FURTHMULLER J. Efficient iterative schemes for *ab initio* total-energy calculations using a plane-wave basis set[J]. Physical Review B, 1996, 54: 11169-11186.
- [12] PERDEW J P, BURKE K, ERNZERHOF M. Generalized gradient approximation made simple[J]. Physical Review Letters, 1996, 77: 3865-3868.
- [13] GRIMME S, ANTONY J, EHRlich S, et al. A consistent and accurate *ab initio* parametrization of density functional dispersion correction (DFT-D) for the 94 elements H-Pu[J]. The Journal of Chemical Phys-

- ics, 2010, 132: 154104.
- [14] DUDAREV S L, BOTTON G A, SAVRASOV S Y, et al. Electron-energy-loss spectra and the structural stability of nickel oxide: An LSDA+U study [J]. *Physical Review B*, 1998, 57: 1505-1509.
- [15] BLÖCHL P E. Projector augmented-wave method [J]. *Physical Review B*, 1994, 50: 17953-17979.
- [16] MONKHORST H J, PACK J D. Special points for Brillouin-zone integrations [J]. *Physical Review B*, 1976, 13: 5188-5192.
- [17] XIA Kang, GAO Hao, LIU Cong, et al. A novel superhard tungsten nitride predicted by machine-learning accelerated crystal structure search [J]. *Science Bulletin*, 2018, 63: 817-824.
- [18] GAO Hao, WANG Junjie, HAN Yu, et al. Enhancing crystal structure prediction by decomposition and evolution schemes based on graph theory [J]. *Fundamental Research*, 2021, 1: 466-471.
- [19] WANG Junjie, GAO Hao, HAN Yu, et al. MAGUS: machine learning and graph theory assisted universal structure searcher [J]. *National Science Review*, 2023, 10: nwad128.
- [20] MANZ T A. Introducing DDEC6 atomic population analysis: part 3. Comprehensive method to compute bond orders [J]. *RSC Advances*, 2017, 7: 45552-45581.
- [21] CHEN Taoyi, MANZ T A. Bond orders of the diatomic molecules [J]. *RSC Advances*, 2019, 9: 17072-17092.
- [22] LIU Liang, REN Xue, XIE Jihao, et al. Magnetic switches via electric field in BN nanoribbons [J]. *Applied Surface Science*, 2019, 480: 300-307.
- [23] LÜ Xiaodong, YU Linke, LI Fengyu, et al. PentamS<sub>2</sub> (M = Mn, Ni, Cu/Ag and Zn/Cd) monolayers with negative Poisson's ratios and tunable bandgaps as water-splitting photocatalysts [J]. *Journal of Materials Chemistry A*, 2021, 9: 6993-7004.
- [24] YU Juan, KUANG Xiaofei, LI Junzi, et al. Giant nonlinear optical activity in two-dimensional palladium diselenide [J]. *Nature Communications*, 2021, 12: 1083.
- [25] LIU Lina, JI Yujin, BIANCHI M, et al. A metastable pentagonal 2D material synthesized by symmetry-driven epitaxy [J]. *Nature Materials*, 2024, 23: 1339-1346.

## Structure and Properties of One-Dimensional Confined Antiferromagnetic Chain MnSe<sub>2</sub>

DING Chi<sup>1</sup>, LU Qing<sup>1</sup>, SUN Jian<sup>1\*</sup>, ZHU Yijie<sup>1</sup>, WANG Xiaomeng<sup>2</sup>

(1. School of Physics, Nanjing University, Nanjing 210093, China;

2. School of Physics, Ningxia University, Yinchuan 750021, China)

**Abstract:** One-dimensional (1D) magnetic systems exhibit pronounced quantum confinement effects and host a variety of intriguing quantum phenomena and behaviors. It is crucial to discover more novel 1D magnetic confined systems and explore their unique properties. This study employed first-principles calculation methods to acquire the interaction between (8, 8) carbon nanotube (CNT) and elemental Mn and Se, and others, which can be fitted by confined potentials. Through crystal structure prediction methods, a novel 1D MnSe<sub>2</sub> nanowire was identified as stable when encapsulated within a (8, 8) carbon nanotube. The corresponding two-dimensional topology of this structure exhibits a unique pentagonal ring configuration. Molecular dynamic simulations confirm the thermal stability of this structure at room temperature. Electronic band structure calculations based on confined potentials demonstrate the insulating properties of 1D MnSe<sub>2</sub>, and the magnetic ground state of the system is antiferromagnetic. Based on the Heisenberg model and Monte Carlo simulations, the magnetic transition temperature was estimated to be approximately 28 K. Finally, a combined system of MnSe<sub>2</sub> encapsulated in CNT was constructed, and its structural and electronic properties were calculated, which confirms the reliability of the confined potential model.

**Key words:** antiferromagnetic chain; confined systems; crystal structure prediction

(责任编辑 张 娣)