

## ДВУМЕРНЫЕ СПЛАВЫ ЯНУСА ДЛЯ СПИНТРОНИКИ НА ПРИМЕРЕ $\text{Fe}_2\text{I}_3\text{Br}_3$

Т.В. Мединцева<sup>1, 2, 3</sup>

medtatvl@bmstu.ru

А.И. Карцев<sup>1, 2, 3</sup>

a.kartsev@bmstu.ru

Ю.И. Тарасов<sup>2</sup>

tarasov\_yu@mirea.ru

<sup>1</sup> МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Российская Федерация

<sup>2</sup> РТУ МИРЭА, Москва, Российская Федерация

<sup>3</sup> РУДН, Москва, Российская Федерация

### Аннотация

Двумерные (2D) монослои Януса с зеркальной асимметрией обладают исключительными физическими свойствами. Это означает, что их можно применять в оптоэлектронных, электронных и электромеханических устройствах нового поколения. Проведено первопринципное исследование электронных и магнитных свойств 2D-монослоя Януса  $\text{Fe}_2\text{I}_3\text{Br}_3$  в рамках теории функционала плотности. Создана кристаллографическая модель сплава Януса  $\text{Fe}_2\text{I}_3\text{Br}_3$ , рассчитана его равновесная структура и определены электронные, магнитные и механические свойства. Показано, что 2D-монослои Януса  $\text{Fe}_2\text{I}_3\text{Br}_3$  динамически и термодинамически стабильны, о чем свидетельствуют результаты расчетов фононных спектров и энергий образования, а также демонстрируют полупроводниковую природу. Зонная структура  $\text{Fe}_2\text{I}_3\text{Br}_3$  имеет спин-поляризованное антиферромагнитное упорядочение шириной запрещенной зоны около 1 эВ. Температура Нееля составила 75 К. В материалах такого типа можно реализовать состояния, которые трудно или практически невозможно получить в объемных магнитных образцах. Полученные результаты могут внести вклад в развитие науки о двумерных функциональных материалах, которые найдут применение в различных областях nanoиндустрии

### Ключевые слова

Электронная теория твердых тел, 2D-магниты, теория функционала плотности, двумерные дихалькогениды переходных металлов, сплавы Януса

Поступила 04.06.2025

Принята 01.10.2025

© Автор(ы), 2026

*Результаты получены с использованием оборудования ЦКП «Дальневосточный вычислительный ресурс» ИАПУ ДВО РАН (<https://cc.dvo.ru>). Работа выполнена при поддержке РФФ (проект № 25-23-20239)*

**Введение.** За последние несколько лет возрос интерес к низкоразмерным функциональным материалам, особенно к тем, которые обладают уникальными физическими свойствами. Среди таких материалов выделяются двумерные (2D) ферромагнетики, мультиферроики и пьезоэлектрики, которые демонстрируют впечатляющие физические характеристики [1–3]. Ярким примером является монослой трииодида хрома  $\text{CrI}_3$ , который успешно синтезирован с помощью методов механического отслоения и является известным атомарно тонким материалом, обладающим собственным ферромагнетизмом. Современные исследования систем, подобных монослою  $\text{CrI}_3$ , в основном сосредоточены на их ферромагнитных свойствах. Ввиду уникальных магнитных характеристик, которые проявляются на наномасштабе, такие системы могут стать основой для будущих электронных и наноспинтронных устройств [4, 5]. Ключевой аспект для понимания и использования 2D-магнитов в практических применениях — исследование основных взаимодействий, которые формируют их магнитные характеристики [6–10]. Кроме того, 2D-материалы, обладающие удивительным сочетанием физических, химических и механических свойств, позволяют достичь цели применения бесконтактного сбора энергии [11–14].

Обнаружено, что 2D-монослои Януса с зеркальной асимметрией обладают исключительными физическими характеристиками. Однако 2D-сплавы Януса, обладающие собственным магнетизмом, встречаются редко, что делает поиск подобных систем одной из ключевых задач исследований 2D-магнетиков [15–20].

*Цель работы* — представить результаты исследования 2D-материалов типа Януса  $\text{Fe}_2(\text{XY})_3$  (XY: I–Br, I–Cl, I–F, Br–Cl, Br–F, Cl–F) со структурой, подобной монослою  $\text{CrI}_3$ . Для магнитного полупроводника Януса  $\text{Fe}_2\text{I}_3\text{Br}_3$  показана динамическая и химическая стабильность. Установлено, что  $\text{Fe}_2\text{Cl}_3\text{I}_3$  является 2D-антиферромагнетиком, полупроводником шириной запрещенной зоны 1 эВ с критической температурой примерно 75 К.

**Материалы и методы.** Расчеты проведены с использованием программного пакета *Vienna Ab initio Simulation Package* (VASP) в рамках стационарной теории функционала плотности. Для расчетов использован метод проекционных присоединенных волн (PAW), энергия обрезания плоских волн составила 450 эВ. Численное интегрирование по зоне Бриллюэна выполнено на сетке  $k$ -точек размером  $8 \times 8 \times 1$ , построенной по алгоритму Монкхорста — Пака [21]. Параметры решетки и атомные позиции оптимизированы с использованием метода сопряженных градиентов, критерии сходимости по энергии и силам установлены равными  $1 \cdot 10^{-8}$  эВ

и 0,01 эВ/Å соответственно. Псевдовакуумное пространство 20 Å использовано для устранения ложного взаимодействия между периодическими репликами вдоль кристаллографической оси  $c$ . Для учета сил Ван дер Ваальса применен метод Гримме (DFT-D3) с функцией демпфирования Бекке — Джонсона [22, 23]. Для расчета распределения плотности состояний системы использован метод Гаусса с размытием  $\sigma = 0,05$  эВ. Расчеты проведены для гексагональной кристаллической решетки, состоящей из 32 атомов, параметры кристаллической решетки  $a = b = 6,8$ ,  $c = 22,3$ . Методом заряда Бейдера [24] определены валентности и типы связей между атомами. Для описания электронной структуры соединения использована функция электронной локализации  $ELF = 1 + \chi_\sigma^2$  ( $\chi_\sigma$  — безразмерный индекс локализации относительно однородного электронного газа).

**Результаты.** Структурные, магнитные и электронные свойства. Результаты анализа графика парциальных плотностей состояний атомов Fe, I и Br (рис. 1) в 2D-системе  $\text{Fe}_2\text{I}_3\text{Br}_3$  показали, что доминирующую роль в формировании магнитных моментов на атомах играет гибридизация  $3d$ -орбиталей железа и  $2p$ -орбиталей йода с примесью  $2p$ -орбиталей брома.

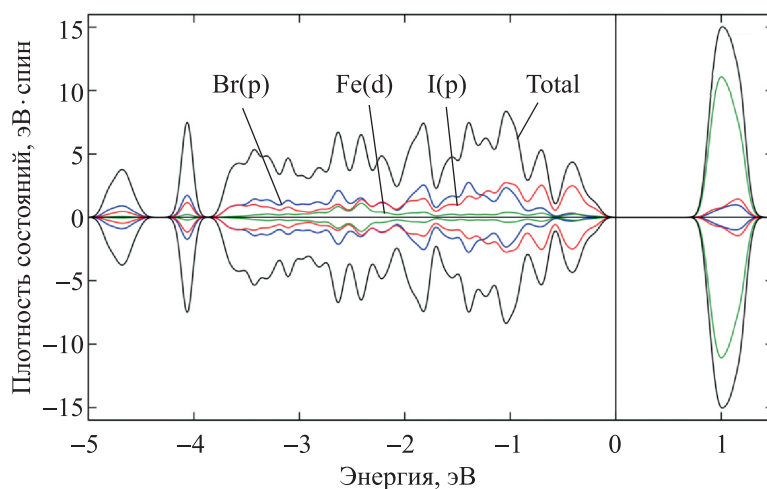
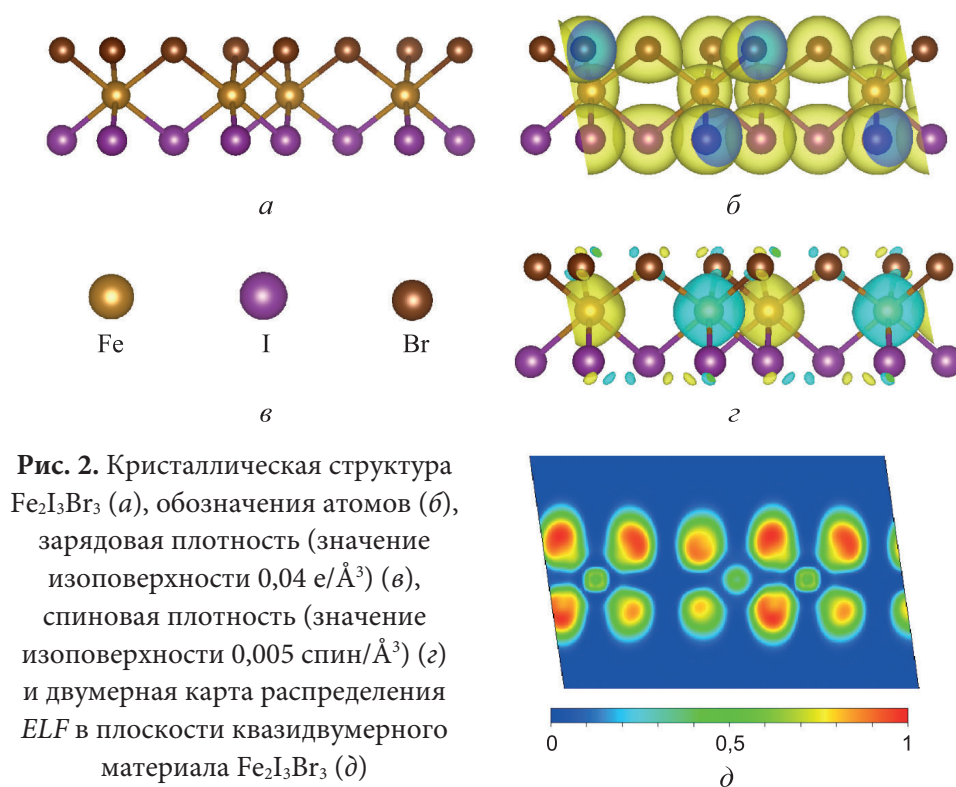


Рис. 1. Плотность состояний системы  $\text{Fe}_2\text{I}_3\text{Br}_3$  (нулевой уровень Ферми)

С использованием программного пакета VESTA смоделирована структура кристаллической решетки (рис. 2, а) исследуемого соединения  $\text{Fe}_2\text{I}_3\text{Br}_3$  с обозначениями атомов каждого элемента (рис. 2, б), а также зарядовая (рис. 2, в) и спиновая (рис. 2, г) плотности.

Для дальнейшего изучения электронной структуры соединения  $\text{Fe}_2\text{I}_3\text{Br}_3$  использована специфическая характеристика связей — функция

электронной локализации *ELF*. Она может отображать локализационную природу электронов в системе [25]. Аналогично рассчитана валентность атомов Fe с использованием метода заряда Бейдера. Первопринципные методы вычислений, такие как теория функционала плотности, широко применяют для моделирования и анализа многочастичных электронных взаимодействий как в молекулярных, так и в твердотельных системах. Точное описание этих сложных взаимодействий представляет собой серьезную задачу, интерпретировать полученные энергетические данные также сложно. Один из эффективных подходов к решению этой проблемы заключается в разбиении общих свойств молекулы или материала на вклады отдельных атомов.



**Рис. 2.** Кристаллическая структура  $\text{Fe}_2\text{I}_3\text{Br}_3$  (а), обозначения атомов (б), зарядовая плотность (значение изоповерхности  $0,04 \text{ e}/\text{\AA}^3$ ) (в), спиновая плотность (значение изоповерхности  $0,005 \text{ спин}/\text{\AA}^3$ ) (г) и двумерная карта распределения *ELF* в плоскости квазидвумерного материала  $\text{Fe}_2\text{I}_3\text{Br}_3$  (д)

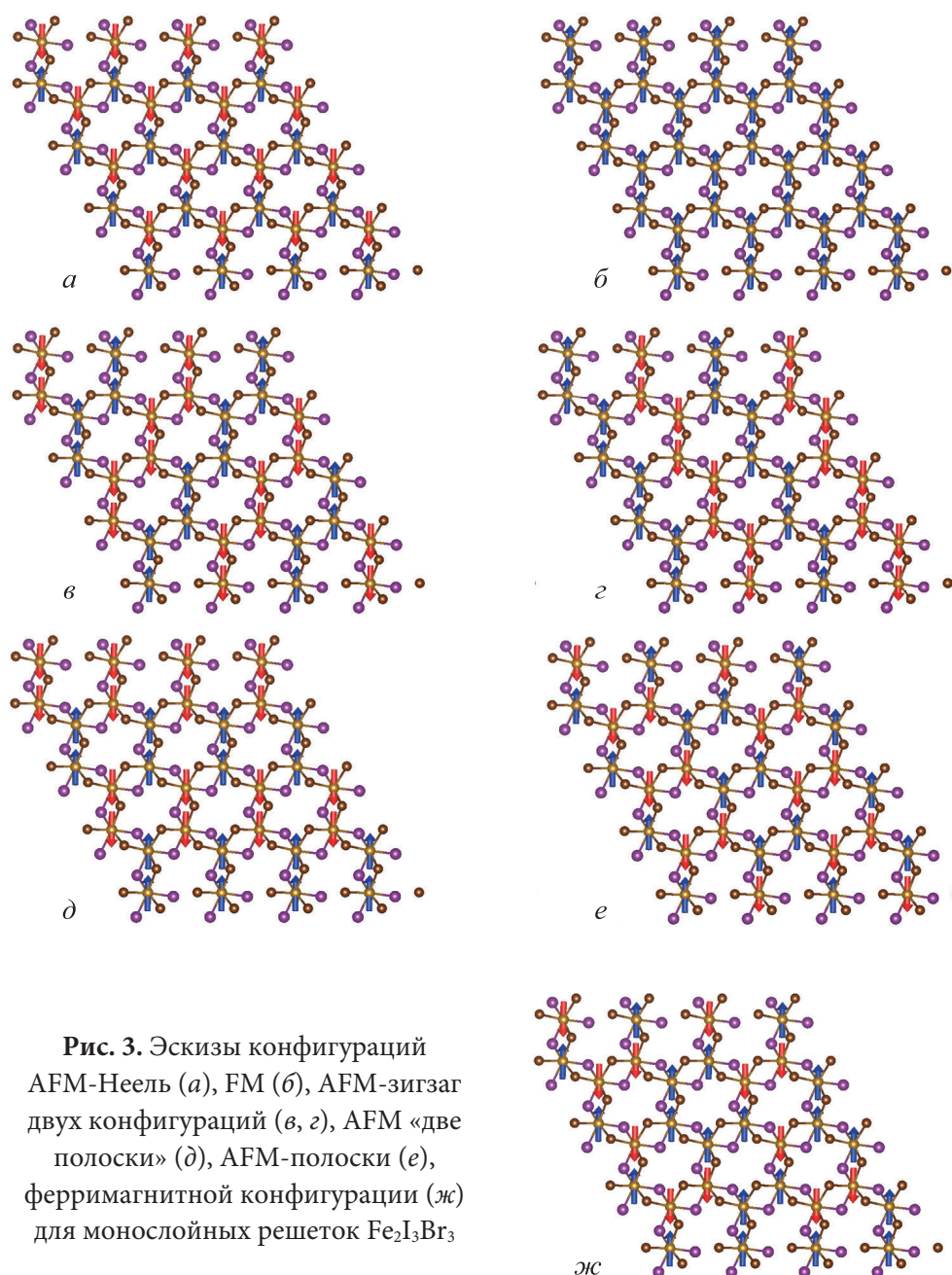
Новаторский метод разбиения предложен Р. Бейдером, который использовал плотность заряда для разделения пространственных областей внутри молекулярных систем на атомные объемы — бейдеровские объемы. Каждый объем уникален тем, что содержит единственный максимум плотности заряда, отделенный от других объемов поверхностями, где плотность заряда достигает минимума и перпендикулярна этой поверхности [26].

Метод Бейдера имеет явные преимущества по сравнению с другими распространенными методами (например, анализ популяции Малликена), поскольку он основан на плотности заряда — величине, которую можно непосредственно измерить или вычислить. Кроме того, при определении стабильной электронной структуры плотность заряда практически не зависит от выбора базисного набора. В этом отношении анализ Бейдера более надежен, чем популяционные методы, основанные на волновой функции. Здесь наблюдается уменьшение валентности ионов Fe вместе с ковалентностью связей  $p-d$ . В результате валентность ионов Fe составила 1,26, а валентности ионов I и Br — 0,35 и 0,49.

Комплексный анализ зарядов Бейдера, электронной плотности и функции локализации электронов в 2D-магнетиках позволяет сделать вывод о характере и природе магнитного обмена в низкоразмерных соединениях [27, 28]. Результаты расчетов  $ELF$  для  $Fe_2I_3Br_3$  (см. рис. 2, д) указывают на преобладание ионного характера, где электроны локализуются вокруг галогенидов, образуя связи Fe–X.

*Магнитные конфигурации системы.* Для анализа магнитных конфигураций системы смоделирована суперъячейка размером  $2 \times 2$  квазидвумерного слоя  $Fe_2I_3Br_3$ . На эскизах антиферромагнитной конфигурации Нееля (AFM-Неель) (рис. 3, а), ферромагнитной конфигурации (рис. 3, б), AFM-зигзага двух конфигураций (рис. 3, в, г), AFM «две полосы» (рис. 3, д), AFM-полоски (рис. 3, е), ферримагнитной конфигурации (рис. 3, ж) для монослойных решеток  $Fe_2I_3Br_3$  красные и синие стрелки обозначают два вида магнитных моментов в противоположных направлениях. С учетом энергии рассчитанных систем определено, что конфигурации AFM-зигзаг (см. рис. 3, в, г) являются наиболее выгодными и, следовательно, наиболее вероятными.

**Обсуждение результатов.** Один из важнейших аспектов современной спинтроники — переход в методе записи информации от традиционного транспорта к квантовому [29]. Применяя 2D-магнетики, можно достичь предельно возможной плотности записи информации на один слой материала. Кроме того, использование антиферромагнитных и альтермагнитных 2D-материалов делает их пригодными для высокоплотной памяти с минимальными межбитовыми дипольными взаимодействиями и высокой частотой срабатывания. Использование новых квантовых материалов в спинтронных устройствах и изучение того, как квантовые эффекты улучшают функциональность устройства, показывают значительный потенциал для применений в спинтронике в будущем.



**Рис. 3.** Эскизы конфигураций AFM-Неель (а), FM (б), AFM-зигзаг двух конфигураций (в, г), AFM «две полосы» (д), AFM-полоски (е), ферримагнитной конфигурации (ж) для монослойных решеток  $\text{Fe}_2\text{I}_3\text{Br}_3$

**Заключение.** Проведено исследование свойств 2D-монослоев Януса, в частности 2D  $\text{Fe}_2\text{I}_3\text{Br}_3$ , обладающих зеркальной асимметрией. В рамках теории функционала плотности создана модель сплава Януса, рассчитана его равновесная структура и определены электронные, магнитные и механические свойства. Результаты показывают, что монослои  $\text{Fe}_2\text{I}_3\text{Br}_3$

являются динамически и термодинамически стабильными полупроводниковыми антиферромагнетиками шириной запрещенной зоны около 1 эВ и температурой Нееля примерно 75 К. Материалы такого типа открывают новые возможности для изучения фундаментальной взаимосвязи между структурными характеристиками и физическими свойствами магнитных 2D-систем. Это должно привести к разработке новых опто-электронных, электронных и электромеханических устройств, а также устройств наноспинтроники.

## ЛИТЕРАТУРА

- [1] Negedu S.D., Kartsev A., Palit M., et al. Energy harvesting from atomically thin  $\text{Co}_2\text{Te}_3$ . *J. Phys. Chem. C*, 2022, vol. 126, iss. 30, pp. 12545–12553. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.2c02102>
- [2] Gowda C.C., Kartsev A., Tiwari N., et al. Harvesting magneto-acoustic waves using magnetic two-dimensional chromium telluride ( $\text{CrTe}_3$ ). *arXiv:2406.15029*. DOI: <https://doi.org/10.48550/arXiv.2406.15029>
- [3] Gowda C.C., Kartsev A., Tiwari N., et al. Non-thermal magnetic deicing using two-dimensional chromium telluride. *J. Mater. Chem. C*, 2024, vol. 12, iss. 46, pp. 18691–18703. DOI: <https://doi.org/10.1039/D4TC02542C>
- [4] Rassekh M., He J., Shayesteh S.F., et al. Remarkably enhanced curie temperature in monolayer  $\text{CrI}_3$  by hydrogen and oxygen adsorption: a first-principles calculations. *Comput. Mater. Sci.*, 2020, vol. 183, art. 109820. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.109820>
- [5] Wang Z., Gutierrez Lezama I., Ubrig N., et al. Very large tunneling magnetoresistance in layered magnetic semiconductor  $\text{CrI}_3$ . *Nat. Commun.*, 2018, vol. 9, art. 2516. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41467-018-04953-8>
- [6] Yue W., Shan J., Jiao R., et al. Strain-controlled electronic and magnetic properties of Janus nitride MXene monolayer  $\text{MnCrNO}_2$ . *Appl. Sci.*, 2024, vol. 14, iss. 18, art. 8427. DOI: <https://doi.org/10.3390/app14188427>
- [7] Huynh T.P.T., Vo V.O., Guerrero-Sánchez J., et al. Effects of vacancy and Ge substitution in Janus  $\text{Si}_2\text{PAs}$  monolayer: site-dependent electronic and magnetic properties. *Appl. Phys. A*, 2024, vol. 130, no. 8, art. 571. DOI: <https://doi.org/10.1007/s00339-024-07719-w>
- [8] Trinh T.H., Ha C.V., Guerrero-Sanchez J., et al. Electronic and magnetic properties of Janus  $\text{ZrSSe}$  monolayer doped with V impurity and  $\text{VX}_3$  ( $\text{X} = \text{C}, \text{N}, \text{O}, \text{and F}$ ) clusters. *Phys. Scr.*, 2024, vol. 99, art. 105942. DOI: <https://doi.org/10.1088/1402-4896/ad7421>
- [9] Ren K., Wang K., Zhang G. Atomic adsorption-controlled magnetic properties of a two-dimensional (2D) Janus monolayer. *ACS Appl. Electron. Mater.*, 2022, vol. 4, iss. 9, pp. 4689–4697. DOI: <https://doi.org/10.1021/acsaelm.2c00740>

- [10] Wu Y.-L., Zeng Z.-Y., Geng H.-Y., et al. Electronic structures and magnetic properties of Janus NbSSe monolayer controlled by carrier doping. *J. Appl. Phys.*, 2024, vol. 136, no. 9, art. 093904. DOI: <https://doi.org/10.1063/5.0231503>
- [11] Rimmler B.H., Pal B., Parkin S.S.P. Non-collinear antiferromagnetic spintronics. *Nat. Rev. Mater.*, 2025, vol. 10, pp. 109–127. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41578-024-00706-w>
- [12] Shi J., Arpaci S., López-Domínguez V., et al. Electrically controlled all-antiferromagnetic tunnel junctions on silicon with large room-temperature magnetoresistance. *Adv. Mater.*, 2024, vol. 36, art. 2312008. DOI: <https://doi.org/10.1002/adma.202312008>
- [13] Chen H., Liu L., Zhou X., et al. Emerging antiferromagnets for spintronics. *Adv. Mater.*, 2024, vol. 36, no. 14, art. 2310379. DOI: <https://doi.org/10.1002/adma.202310379>
- [14] Shao D.F., Tsymbal E.Y. Antiferromagnetic tunnel junctions for spintronics. *npj Spintronics*, 2024, vol. 2, art. 13. DOI: <https://doi.org/10.1038/s44306-024-00014-7>
- [15] Xu F., Dai S., Cen W., et al. Study on the piezoelectric properties and the mechanism of strain-regulated piezoelectricity in flexible Janus monolayers  $\text{Cr}_2\text{X}_3\text{Y}_3$  ( $\text{X/Y} = \text{Cl, Br, I}$ ). *Phys. Scr.*, 2024, vol. 99, no. 2, art. 025987. DOI: <https://doi.org/10.1088/1402-4896/ad1da0>
- [16] Zhang F., Mi W., Wang X. Spin-dependent electronic structure and magnetic anisotropy of 2D ferromagnetic Janus  $\text{Cr}_2\text{I}_3\text{X}_3$  ( $\text{X} = \text{Br, Cl}$ ) monolayers. *Adv. Electron. Mater.*, 2020, vol. 6, no. 1, art. 1900778. DOI: <https://doi.org/10.1002/aelm.201900778>
- [17] Ghobadi N., Gholami S., Soleimani-Amiri S. Electronic, spintronic, and piezoelectric properties of new Janus  $\text{ZnAXY}$  ( $\text{A} = \text{Si, Ge, Sn}$ ;  $\text{X, Y} = \text{S, Se, Te}$ ) monolayers. *Phys. Rev. B*, 2023, vol. 107, art. 075443. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.107.075443>
- [18] Zeng H., Jin S., Wang J., et al. Ferromagnetic half-metal with high curie temperature: Janus  $\text{Mn}_2\text{PAs}$  monolayer. *J. Mater. Sci.*, 2021, vol. 56, iss. 23, pp. 13215–13226. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10853-021-06158-9>
- [19] Xu H.-Q., Xiao G., Xiao W.-Z., et al. Piezoelectricity and optical properties of Janus  $\text{MXY}$  ( $\text{M} = \text{Sb, As}$ ;  $\text{X} = \text{Te, Se}$ ;  $\text{Y} = \text{Br, I}$ ) monolayers. *Micro Nanostruct.*, 2022, vol. 170, art. 207396. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.micrna.2022.207396>
- [20] Yang Q., Wang D., Zeng Z.-Y., et al. High-performance photocatalytic and piezoelectric properties of two-dimensional transition metal oxyhalide  $\text{ZrOX}_2$  ( $\text{X} = \text{Br, I}$ ) and their Janus structures. *Phys. Rev. B*, 2024, vol. 109, art. 035411. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.109.035411>
- [21] Monkhorst H.J., Pack J.D. Special points for Brillouin-zone integrations. *Phys. Rev. B*, 1976, vol. 13, no. 12, pp. 5188–5192. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.13.5188>
- [22] 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. Chem. Phys.*, 2010, vol. 132, iss. 15, art. 154104. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.3382344>

- [23] Grimme S., Ehrlich S., Goerigk L. Effect of the damping function in dispersion corrected density functional theory. *J. Comput. Chem.*, 2011, vol. 32, iss. 7, pp. 1456–1465. DOI: <https://doi.org/10.1002/jcc.21759>
- [24] Bader R.F.W. Atoms in molecules: a quantum theory. Oxford Univ. Press, 1991.
- [25] Becke A.D., Edgecombe K.E. A simple measure of electron localization in atomic and molecular systems. *J. Chem. Phys.*, 1990, vol. 92, iss. 9, pp. 5397–5403. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.458517>
- [26] Tang W., Sanville E., Henkelman G. A grid-based Bader analysis algorithm without lattice bias. *J. Phys.: Condens. Matter*, 2009, vol. 21, iss. 8, art. 084204. DOI: <https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/8/084204>
- [27] Kartsev A., Obraztsov K., Lega P. Magnetic properties of metal dichalcogenide in the frame of Heisenberg-like model: DFT and Monte-Carlo methods. *J. Commun. Technol. Electron.*, 2023, vol. 68, no. 10, pp. 1169–1190. DOI: <https://doi.org/10.1134/S1064226923100054>
- [28] Kartsev A., Malkovsky S., Chibisov A. Analysis of ionicity-magnetism competition in 2D-MX<sub>3</sub> halides towards a low-dimensional materials study based on GPU-enabled computational systems. *Nanomaterials*, 2021, vol. 11, iss. 11, art. 2967. DOI: <https://doi.org/10.3390/nano11112967>
- [29] Guo Y., Zhang X., Huang Z., et al. Quantum materials for spintronic applications. *npj Spintronics*, 2024, vol. 2, art. 36. DOI: <https://doi.org/10.1038/s44306-024-00038-z>

**Мединцева Татьяна Владимировна** — ассистент кафедры «Физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана (Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5, стр. 1); ассистент кафедры физики и технической механики ИПТИП РТУ МИРЭА (Российская Федерация, 119454, Москва, пр-т Вернадского, д. 78); аспирантка кафедры нанотехнологий и микросистемной техники РУДН (Российская Федерация, 117198, Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 6).

**Карцев Алексей Иванович** — канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры «Физика» МГТУ им. Н.Э. Баумана (Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5, стр. 1); доцент кафедры физики и технической механики ИПТИП РТУ МИРЭА (Российская Федерация, 119454, Москва, пр-т Вернадского, д. 78); доцент кафедры нанотехнологий и микросистемной техники РУДН (Российская Федерация, 117198, Москва, ул. Миклухо-Маклая, д. 6).

**Тарасов Юрий Игоревич** — д-р физ.-мат. наук, заведующий кафедрой физики и технической механики ИПТИП РТУ МИРЭА (Российская Федерация, 119454, Москва, пр-т Вернадского, д. 78).

**Просьба ссылаться на эту статью следующим образом:**

Мединцева Т.В., Карцев А.И., Тарасов Ю.И. Двумерные сплавы Януса для спинтроники на примере Fe<sub>2</sub>I<sub>3</sub>Br<sub>3</sub>. *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки*, 2026, № 3 (126), с. 40–52. EDN: LMUUFH

## TWO-DIMENSIONAL JANUS ALLOYS FOR SPINTRONICS ON THE EXAMPLE OF $\text{Fe}_2\text{I}_3\text{Br}_3$

T.V. Medintseva<sup>1, 2, 3</sup>

A.I. Kartsev<sup>1, 2, 3</sup>

Yu.I. Tarasov<sup>1</sup>

medtatvl@bmstu.ru

a.kartsev@bmstu.ru

tarasov\_yu@mirea.ru

<sup>1</sup> BMSTU, Moscow, Russian Federation

<sup>2</sup> RTU MIREA, Moscow, Russian Federation

<sup>2</sup> RUDN University, Moscow, Russian Federation

---

### Abstract

Two-dimensional (2D) Janus monolayers with mirror asymmetry have exceptional physical properties. This means that they can be used in next-generation optoelectronic, electronic, and electromechanical devices. The article presents a first-principles study of the electronic and magnetic properties of the 2D Janus monolayer  $\text{Fe}_2\text{I}_3\text{Br}_3$  using density functional theory. A crystallographic model of the  $\text{Fe}_2\text{I}_3\text{Br}_3$  Janus alloy has been created, its equilibrium structure has been calculated, and its electronic, magnetic, and mechanical properties have been determined. It is shown that the 2D Janus monolayers of  $\text{Fe}_2\text{I}_3\text{Br}_3$  are dynamically and thermodynamically stable, as evidenced by the results of calculations of phonon spectra and formation energies, and also demonstrate a semiconductor nature. The band structure of  $\text{Fe}_2\text{I}_3\text{Br}_3$  has a spin-polarized antiferromagnetic ordering with a band gap of about 1 eV. The Néel temperature was 75 K. In materials of this type, it is possible to realize states that are difficult or practically impossible to obtain in bulk magnetic samples. The results obtained can contribute to the development of science about two-dimensional functional materials, which will find application in various fields of the nanotechnology industry

### Keywords

*Electron theory of solids, 2D magnets, density functional theory, two-dimensional transition metal dichalcogenides, Janus alloys*

Received 04.06.2025

Accepted 01.10.2025

© Author(s), 2026

---

*The results were obtained using the equipment of Shared Resource Center “Far Eastern Computing Resource” IACP FEB RAS (<https://www.cc.dvo.ru>). The work was supported by the Russian Science Foundation (project no. 25-23-20239)*

## REFERENCES

- [1] Negedu S.D., Kartsev A., Palit M., et al. Energy harvesting from atomically thin  $\text{Co}_2\text{Te}_3$ . *J. Phys. Chem. C*, 2022, vol. 126, iss. 30, pp. 12545–12553. DOI: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.2c02102>
- [2] Gowda C.C., Kartsev A., Tiwari N., et al. Harvesting magneto-acoustic waves using magnetic two-dimensional chromium telluride ( $\text{CrTe}_3$ ). *arXiv:2406.15029*. DOI: <https://doi.org/10.48550/arXiv.2406.15029>
- [3] Gowda C.C., Kartsev A., Tiwari N., et al. Non-thermal magnetic deicing using two-dimensional chromium telluride. *J. Mater. Chem. C*, 2024, vol. 12, iss. 46, pp. 18691–18703. DOI: <https://doi.org/10.1039/D4TC02542C>
- [4] Rassekh M., He J., Shayesteh S.F., et al. Remarkably enhanced curie temperature in monolayer  $\text{CrI}_3$  by hydrogen and oxygen adsorption: a first-principles calculations. *Comput. Mater. Sci.*, 2020, vol. 183, art. 109820. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.109820>
- [5] Wang Z., Gutierrez Lezama I., Ubrig N., et al. Very large tunneling magnetoresistance in layered magnetic semiconductor  $\text{CrI}_3$ . *Nat. Commun.*, 2018, vol. 9, art. 2516. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41467-018-04953-8>
- [6] Yue W., Shan J., Jiao R., et al. Strain-controlled electronic and magnetic properties of Janus nitride MXene monolayer  $\text{MnCrNO}_2$ . *Appl. Sci.*, 2024, vol. 14, iss. 18, art. 8427. DOI: <https://doi.org/10.3390/app14188427>
- [7] Huynh T.P.T., Vo V.O., Guerrero-Sánchez J., et al. Effects of vacancy and Ge substitution in Janus  $\text{Si}_2\text{PAs}$  monolayer: site-dependent electronic and magnetic properties. *Appl. Phys. A*, 2024, vol. 130, no. 8, art. 571. DOI: <https://doi.org/10.1007/s00339-024-07719-w>
- [8] Trinh T.H., Ha C.V., Guerrero-Sanchez J., et al. Electronic and magnetic properties of Janus  $\text{ZrSSe}$  monolayer doped with V impurity and  $\text{VX}_3$  ( $\text{X} = \text{C}, \text{N}, \text{O}$ , and  $\text{F}$ ) clusters. *Phys. Scr.*, 2024, vol. 99, art. 105942. DOI: <https://doi.org/10.1088/1402-4896/ad7421>
- [9] Ren K., Wang K., Zhang G. Atomic adsorption-controlled magnetic properties of a two-dimensional (2D) Janus monolayer. *ACS Appl. Electron. Mater.*, 2022, vol. 4, iss. 9, pp. 4689–4697. DOI: <https://doi.org/10.1021/acsaelm.2c00740>
- [10] Wu Y.-L., Zeng Z.-Y., Geng H.-Y., et al. Electronic structures and magnetic properties of Janus  $\text{NbSSe}$  monolayer controlled by carrier doping. *J. Appl. Phys.*, 2024, vol. 136, no. 9, art. 093904. DOI: <https://doi.org/10.1063/5.0231503>
- [11] Rimmler B.H., Pal B., Parkin S.S.P. Non-collinear antiferromagnetic spintronics. *Nat. Rev. Mater.*, 2025, vol. 10, pp. 109–127. DOI: <https://doi.org/10.1038/s41578-024-00706-w>
- [12] Shi J., Arpacı S., López-Domínguez V., et al. Electrically controlled all-antiferromagnetic tunnel junctions on silicon with large room-temperature magnetoresistance. *Adv. Mater.*, 2024, vol. 36, art. 2312008. DOI: <https://doi.org/10.1002/adma.202312008>

- [13] Chen H., Liu L., Zhou X., et al. Emerging antiferromagnets for spintronics. *Adv. Mater.*, 2024, vol. 36, no. 14, art. 2310379.  
DOI: <https://doi.org/10.1002/adma.202310379>
- [14] Shao D.F., Tsymbal E.Y. Antiferromagnetic tunnel junctions for spintronics. *npj Spintronics*, 2024, vol. 2, art. 13. DOI: <https://doi.org/10.1038/s44306-024-00014-7>
- [15] Xu F., Dai S., Cen W., et al. Study on the piezoelectric properties and the mechanism of strain-regulated piezoelectricity in flexible Janus monolayers  $\text{Cr}_2\text{X}_3\text{Y}_3$  ( $\text{X/Y} = \text{Cl, Br, I}$ ). *Phys. Scr.*, 2024, vol. 99, no. 2, art. 025987.  
DOI: <https://doi.org/10.1088/1402-4896/ad1da0>
- [16] Zhang F., Mi W., Wang X. Spin-dependent electronic structure and magnetic anisotropy of 2D ferromagnetic Janus  $\text{Cr}_2\text{I}_3\text{X}_3$  ( $\text{X} = \text{Br, Cl}$ ) monolayers. *Adv. Electron. Mater.*, 2020, vol. 6, no. 1, art. 1900778. DOI: <https://doi.org/10.1002/aelm.201900778>
- [17] Ghobadi N., Gholami S., Soleimani-Amiri S. Electronic, spintronic, and piezoelectric properties of new Janus  $\text{ZnAXY}$  ( $\text{A} = \text{Si, Ge, Sn}$ ;  $\text{X, Y} = \text{S, Se, Te}$ ) monolayers. *Phys. Rev. B*, 2023, vol. 107, art. 075443. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.107.075443>
- [18] Zeng H., Jin S., Wang J., et al. Ferromagnetic half-metal with high curie temperature: Janus  $\text{Mn}_2\text{PAs}$  monolayer. *J. Mater. Sci.*, 2021, vol. 56, iss. 23, pp. 13215–13226. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10853-021-06158-9>
- [19] Xu H.-Q., Xiao G., Xiao W.-Z., et al. Piezoelectricity and optical properties of Janus  $\text{MXY}$  ( $\text{M} = \text{Sb, As}$ ;  $\text{X} = \text{Te, Se}$ ;  $\text{Y} = \text{Br, I}$ ) monolayers. *Micro Nanostruct.*, 2022, vol. 170, art. 207396. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.micrna.2022.207396>
- [20] Yang Q., Wang D., Zeng Z.-Y., et al. High-performance photocatalytic and piezoelectric properties of two-dimensional transition metal oxyhalide  $\text{ZrOX}_2$  ( $\text{X} = \text{Br, I}$ ) and their Janus structures. *Phys. Rev. B*, 2024, vol. 109, art. 035411.  
DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.109.035411>
- [21] Monkhorst H.J., Pack J.D. Special points for Brillouin-zone integrations. *Phys. Rev. B*, 1976, vol. 13, no. 12, pp. 5188–5192. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.13.5188>
- [22] 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. Chem. Phys.*, 2010, vol. 132, iss. 15, art. 154104.  
DOI: <https://doi.org/10.1063/1.3382344>
- [23] Grimme S., Ehrlich S., Goerigk L. Effect of the damping function in dispersion corrected density functional theory. *J. Comput. Chem.*, 2011, vol. 32, iss. 7, pp. 1456–1465. DOI: <https://doi.org/10.1002/jcc.21759>
- [24] Bader R.F.W. Atoms in molecules: a quantum theory. Oxford Univ. Press, 1991.
- [25] Becke A.D., Edgecombe K.E. A simple measure of electron localization in atomic and molecular systems. *J. Chem. Phys.*, 1990, vol. 92, iss. 9, pp. 5397–5403.  
DOI: <https://doi.org/10.1063/1.458517>
- [26] Tang W., Sanville E., Henkelman G. A grid-based Bader analysis algorithm without lattice bias. *J. Phys.: Condens. Matter*, 2009, vol. 21, iss. 8, art. 084204.  
DOI: <https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/8/084204>

[27] Kartsev A., Obraztsov K., Lega P. Magnetic properties of metal dichalcogenide in the frame of Heisenberg-like model: DFT and Monte-Carlo methods. *J. Commun. Technol. Electron.*, 2023, vol. 68, no. 10, pp. 1169–1190.

DOI: <https://doi.org/10.1134/S1064226923100054>

[28] Kartsev A., Malkovsky S., Chibisov A. Analysis of ionicity-magnetism competition in 2D-MX<sub>3</sub> halides towards a low-dimensional materials study based on GPU-enabled computational systems. *Nanomaterials*, 2021, vol. 11, iss. 11, art. 2967.

DOI: <https://doi.org/10.3390/nano11112967>

[29] Guo Y., Zhang X., Huang Z., et al. Quantum materials for spintronic applications. *npj Spintronics*, 2024, vol. 2, art. 36. DOI: <https://doi.org/10.1038/s44306-024-00038-z>

**Medintseva T.V.** — Assistant, Department of Physics, BMSTU (2-ya Bauman-skaya ul. 5, str. 1, Moscow, 105005 Russian Federation); Assistant, Department of Physics and Technical Mechanics, Institute of Advanced Technologies and Industrial Programming, RTU MIREA (Vernadskogo prospekt 78, Moscow, 119454 Russian Federation); Post-Graduate Student, Department of Nanotechnology and Microsystems Engineering, RUDN University (Miklukho-Maklaya ul. 6, Moscow, 117198 Russian Federation).

**Kartsev A.I.** — Cand. Sc. (Phys.-Math.), Assoc. Professor, Department of Physics, BMSTU (2-ya Bauman-skaya ul. 5, str. 1, Moscow, 105005 Russian Federation); Assoc. Professor, Department of Physics and Technical Mechanics, Institute of Advanced Technologies and Industrial Programming, RTU MIREA (Vernadskogo prospekt 78, Moscow, 119454 Russian Federation); Assoc. Professor, Department of Nanotechnology and Microsystems Engineering, RUDN University (Miklukho-Maklaya ul. 6, Moscow, 117198 Russian Federation).

**Tarasov Yu.I.** — Dr. Sc. (Phys.-Math.), Head of the Department of Physics and Technical Mechanics, Institute of Advanced Technologies and Industrial Programming, RTU MIREA (Vernadskogo prospekt 78, Moscow, 119454 Russian Federation).

**Please cite this article in English as:**

Medintseva T.V., Kartsev A.I., Tarasov Yu.I. Two-dimensional Janus alloys for spintronics on the example of Fe<sub>2</sub>I<sub>3</sub>Br<sub>3</sub>. *Herald of the Bauman Moscow State Technical University, Series Natural Sciences*, 2026, no. 3 (126), pp. 40–52 (in Russ.).

EDN: LMUUFH