

四型二维共线磁体中的异常霍尔效应

Ling Bai,^{1,2} Run-Wu Zhang,^{1,2} Wanxiang Feng,^{1,2,*} and Yugui Yao^{1,2,†}

¹Key Lab of Advanced Optoelectronic Quantum Architecture and Measurement (MOE),
Beijing Key Lab of Nanophotonics and Ultrafine Optoelectronic Systems,
and School of Physics, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China

²International Center for Quantum Materials, Beijing Institute of Technology, Zhuhai, 519000, China

(10Dated: 2025 年 4 月 15 日)

我们识别出了一类之前未被认识的二维共线磁相，这类相超越了已知的铁磁体、反铁磁体和交替磁体等分类。这种 IV 型二维共线磁体在非相对论极限下表现出自旋简并能带，但支持破缺时间反演对称性的响应，如异常霍尔效应 (AHE)，尽管其净磁化强度为零。基于自旋层群分析，我们推导出了该相的对称性标准，并进行了从头计算以筛选二维数据库中的候选材料。使用单层 Hf_2S 作为原型，我们证明了在没有自旋轨道耦合的情况下，能带是自旋简并的，而它的引入则诱导出由自旋极化甚至自旋中性的电流驱动的 AHE，并伴随有对称性保护的真正全空间持久自旋纹理。这些发现扩展了磁相分类，并拓宽了实现非常规二维自旋电子功能的道路。

磁性，一个历史悠久但不断发展的固态物理学领域，涵盖了丰富的物理现象和持久的挑战。在磁性固体中，局部磁矩之间的交换相互作用决定了自旋平行或反平行排列，这历史上定义了两种典型的磁有序形式：铁磁体 (FMs) 和反铁磁体 (AFMs)。反铁磁体以其不存在杂散场和超快太赫兹自旋动力学为特征，已成为超高密度和高速自旋电子应用的有吸引力的候选者，可能在性能上超过传统的基于 FM 的系统。因此，在过去十年中，反铁磁性 [1–4] 吸引了相当大的关注。然而，AFMs 缺乏宏观磁化强度带来了显著的障碍，特别是在通过奈尔有序切换实现有效电读出和操纵二进制“0”和“1”状态方面。这一固有限制促使追求非常规磁相，在这些相中，交替磁体 (AMs) [5, 6] 最近被提出作为第三种磁性原型，统一了 FMs 和 AFMs 的功能优势。虽然没有净磁化强度，AMs 展示了一系列类似铁磁的现象，包括非相对论带自旋分裂和反常霍尔效应 (AHE) [7, 8]，为电信号控制提供了有希望的机制。

对于实际设备应用，二维磁性系统由于其出色的可扩展性、更高的调谐性和更好的集成兼容性而特别具有优势，相比块体材料。在实现单层和少数几层

$\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ [9] 和 CrI_3 [10] 的稳定长程磁序的突破之后，通过化学合成和从块体晶体机械剥离建立了一个快速增长的二维铁磁性和反铁磁性原子薄材料库 [11–13]。相比之下，二维非磁性系统的开发仍处于起步阶段。至今，仅有限数量——大约两打——这样的候选物已被理论预测，在与已识别的三维拓扑磁体 [14] 超过 200 种相比，形成了鲜明对比，这主要归因于在降低维度时更加严格的对称性要求。此外，二维交替磁性的实验实现仍然难以捉摸。这凸显了亟需识别新的非常规二维磁体类别，为未来高性能自旋电子设备提供更广泛的选择和更好的实验可行性。

在这封信中，通过自旋层群分析，我们识别出了一类之前被忽视的 IV 型二维共线磁体，超越了已知的铁磁体 (FMs)、反铁磁体 (AFMs) 和亚铁磁体 (AMs)。这一新相位表现出非相对论性的自旋简并能带结构，类似于传统的反铁磁体，同时支持破时间反演对称性响应，如异常霍尔效应 (AHE)，通常被认为是铁磁体和亚铁磁体的标志。通过第一性原理计算，我们从全面的二维材料数据库中筛选出可行的材料候选者，涵盖了所有允许的非平凡自旋红群。以单层 Hf_2S 为例，我们展示了非相对论性的自旋简并能带的出现，这些带在

表 I. 非平凡自旋劳厄群和 IV 型二维共线磁体的代表性材料候选。第一列分组具有相同劳厄群 (\mathbf{G}) 的晶体层群。第二列列出 \mathbf{G} 的减半子群 \mathbf{H} 中的对称操作。另一个余集 $\mathbf{G} - \mathbf{H}$, 是非平凡自旋劳厄群的重要组成部分, 包含连接相反自旋亚晶格的对称操作。

Layer groups (Laue groups \mathbf{G})	\mathbf{H} (Laue group)	Material candidates
3-7 (C_{2h})	$\{E, \bar{E}\}(C_i)$	MnSH ₂ O ₄
19-48 (D_{2h})	$\{E, \bar{E}, C_{2x}, M_x\}$ or $\{E, \bar{E}, C_{2y}, M_y\}(C_{2h})$	MnSbS ₂ Cl, Co ₂ P ₄ O ₈
73-75 (C_{6h})	$\{E, \bar{E}, C_{3z}^+, C_{3z}^-, \bar{C}_{3z}^+, \bar{C}_{3z}^-\}(C_{3i})$	bilayer FeHfBr ₆
76-80 (D_{6h})	$\{E, \bar{E}, C_{3z}^+, C_{3z}^-, \bar{C}_{3z}^+, \bar{C}_{3z}^-, C_{2[100]}, C_{2[010]}, C_{2[110]}, M_{[100]}, M_{[010]}, M_{[110]}\}(D_{3d})$	BaMn ₂ S ₃ , Hf ₂ S

引入自旋轨道耦合 (SOC) 后演化为独特的异常输运行为。值得注意的是, 我们揭示了由自旋中性电流驱动的 AHE, 并伴随着一个对称保护的、真正的全空间持久自旋纹理 (TFPST)。我们的工作不仅丰富了低维磁性的概念框架, 还提供了一个强大的平台, 通过这一新发现的二维磁性材料类别来工程化下一代自旋电子功能。

我们首先通过自旋群分析对二维共线磁体进行分类。一般来说, 一个自旋群可以被视为仅含自旋的群 (\mathbf{r}_s) 和非平凡自旋群 (\mathbf{R}_s) [15, 16] 的直接乘积。对于共线自旋构型, 纯自旋群由 $\mathbf{r}_s = \mathbf{C}_\infty + \bar{C}_2\mathbf{C}_\infty$ 给出, 其中 \mathbf{C}_∞ 表示围绕共同自旋轴的任意自旋旋转, 而 \bar{C}_2 代表垂直于该轴的二重旋转 (C_2), 并伴随自旋空间中的反演, 这实际上是由时间反演操作 (T) 实现的 [17]。 \mathbf{R}_s 包含元素 $[R_i||R_j]$, 其中 R_i 和 R_j 分别是自旋空间和晶体空间中独立作用的对称操作。在铁磁体中, 允许的自旋空间操作为 $R_i \in \{E\}$ 或 $\{E, C_2\}$, 其中 E 表示恒等操作。晶体空间操作 R_j 受限于从二维层群导出的晶体学劳厄群 (\mathbf{G}) 内。这是因为反演对称性 (\bar{E}) 总是在共线磁体的非相对论能带结构中有效保持, 无论晶胞是否具有 \bar{E} [18]。

根据不同的非平凡自旋劳厄群, 二维共线磁体可以被分为四类。第一类, 用 $\mathbf{R}_s^I = [E||\mathbf{G}]$ 表示, 仅包含晶体空间变换, 在 2D 布里渊区 (BZ) 内的任何动量点都不强制自旋简并, 因此对应于 FM (或铁磁体)。第二类由 $\mathbf{R}_s^{II} = [E||\mathbf{G}] + [C_2||\mathbf{G}]$ 表示, 描述了具有零净磁化的常规共线反铁磁体。在这种情况下, 诸如 $[C_2||E]$ 或 $[C_2||\bar{E}]$ 的操作会导致整个 BZ 内的自旋简并。显

然, $[C_2||E]\epsilon(s, k) = \epsilon(-s, k)$ 和 $\bar{C}_2[C_2||\bar{E}]\epsilon(s, k) = \epsilon(-s, k)$ 中, s 和 k 分别代表电子能带的自旋和晶格动量指标 [19, 20]。注意到, 在后一种情况下, 仅自旋操作 \bar{C}_2 起到辅助作用。III 型, 对应于 AMs, 定义为 $\mathbf{R}_s^{III} = [E||\mathbf{H}] + [C_2||\mathbf{G} - \mathbf{H}] = [E||\mathbf{H}] + [C_2||\mathbf{A}\mathbf{H}]$, 其中 \mathbf{H} 表示 \mathbf{G} 的半子群, 而 \mathbf{A} 属于 $\mathbf{G} - \mathbf{H}$, 代表实空间旋转。与三维情况不同, 其中条件为 $\mathbf{A} \notin \{\tau, \bar{E}\}$, 二维场景施加了更为严格的约束, 要求 $\mathbf{A} \notin \{\tau, \bar{E}, C_{2z}, M_z\}$ (假设二维共线磁体位于 x - y 平面内)。这种限制源于晶体动量 k 的平面性质以及以下对称操作,

$$\bar{C}_2[C_2||C_{2z}]\epsilon(s, k) = \epsilon(-s, k), \quad (1)$$

$$[C_2||M_z]\epsilon(s, k) = \epsilon(-s, k), \quad (2)$$

确保了整个二维布里渊区内的自旋简并性, 因此防止了交替自旋分裂的出现。这一基本原则已在最近二维 AMs [21–24] 的理论识别中得到应用。

剩余的第四类, 在本文中提出, 定义为

$$\mathbf{R}_s^{IV} = [E||\mathbf{H}] + [C_2||\mathbf{G} - \mathbf{H}] = [E||\mathbf{H}] + [C_2||\mathbf{B}\mathbf{H}], \quad (3)$$

具有要求 $\mathbf{B} \notin \{\tau, \bar{E}\}$ 和 $\{C_{2z}, M_z\} \subseteq \mathbf{B}\mathbf{H}$ 。如式 (1)–(2) 所示, 存在 $[C_2||C_{2z}]$ 或 $[C_2||M_z]$ 操作强制自旋简并在 2D 布里渊区中。通过对与相应的层群关联的 Laue 群进行过滤 (见补充表 S1 [25]), 我们识别出了四种属于 IV 类分类的非平凡自旋 Laue 群, 如表 I 所总结。这个新提出的磁性相局限于单斜、正交和六方晶系, 与 III 类不同, 后者也可以在四方晶系中出现。表 I 列出了从计算二维材料数据库 (C2DB) [26, 27]、Materials Cloud 二维晶体数据库 (MC2D) [28] 和范德华双层数据库 (BiDB) [29] 中识别出的代表性材料候选者。有

有趣的是，我们发现第四类分类可以通过堆叠两个磁性单层来产生，为其实现二维异质结构提供了一种实用且可实验验证的方法。这些材料候选者的晶体和能带结构显示在补充表 S2 和图 S1 及 S2 [25] 中。

尽管在非相对论极限下存在自旋简并，当考虑自旋轨道耦合时，IV 型相可以展现出显著的 T 破缺响应，如 AHE。作为一个最简单的示例，从层群 $p11m$ (编号 4) 出发，导出的劳厄群 G 是 C_{2h} ；然后，使用半化子群 $H = C_i$ 构建非平凡自旋劳厄群，记作 $R_s = [E|\{E, \bar{E}\}] + [C_2|\{C_{2z}, M_z\}]$ ，这确保了在整个二维布里渊区内的自旋简并。在包含 SOC 并将尼尔矢量置于 x - y 平面后，磁性层群为 $p11m(4.1.12)$ ，其中对称性 M_z 允许非零异常霍尔电导率 (AHC) σ_{xy} 。这一发现挑战了先前持有的观念，即非相对论带交换分裂是 AHE 出现的先决条件 [30]。

第四类相的特征使其与第一至第三类相明显区分。在第二类中，即使包括自旋轨道耦合 (SOC)，反常霍尔效应 (AHE) 仍然不存在，而在第一类和第三类中，在没有自旋轨道耦合的情况下，自旋简并被消除。尽管非共面反铁磁体 [31–33] 中可以同时出现自旋简并与反常霍尔效应，但这些系统中的 AHE 并不需要 SOC，并且起源于实空间贝里相位效应，将其归类于拓扑霍尔物理学领域。与线性配置相比，非共面自旋纹理的探测和操控本质上更为复杂，而非共面反铁磁体超出了本研究的范围。因此，我们将第四类相识别为二维线性磁体的一个独特类别，并在图 1 中说明了其与其他三类的关系。

接下来，我们选取一种实际材料，单层 Hf_2S ，来描绘 IV 型磁相的关键特征。 Hf_2S 是一种具有反 TaS_2 -型晶体结构的二维范德华材料，被称为具有优异化学稳定性的电子化合物 [34]。单层 Hf_2S 属于层群 $p\bar{6}m2$ (编号 78) [图. 2(a)] 并展示了共线反平行磁序 [35, 36]。单层 Hf_2S 的自旋层群包括以下对称操作：

$$[E|\{E, C_{3z}^+, C_{3z}^-, M_{[100]}, M_{[010]}, M_{[110]}\}] + [C_2|\{\bar{C}_{6z}^+, \bar{C}_{6z}^-, C_{2[110]}, C_{2[120]}, C_{2[210]}, M_z\}], \quad (4)$$

这对应于表 I 中列出的最后一组非平凡自旋劳厄群。对

称操作 $[C_2||M_z]$ 强制整个二维布里渊区出现非相对论性自旋简并，如图. 2(b) 所示。当尼尔矢量沿 $[120]$ 方向 (y 轴) 排列时，磁层群变为 $cm'2'm$ (35.5.216)，包含四个对称操作： $\{E, M_z, C_{2[120]}T, M_{[100]}T\}$ 。如图 2(c) 所示的相对论能带结构在 BZ 内显示了完全自旋分裂。尽管某些点，例如 Γ 点上的能带看似偶然简并，实际上它们对应于一维不可约共表示 [37]。由于 M_z 保留了自旋的非零 z 分量但抑制了 x 和 y 分量，即 $s_z \neq 0$ 和 $s_{x,y} = 0$ (参见补充表 S3 和图 S3 及 S4)，自旋极化仍然沿 z 轴均匀定向。这导致了一个持久的自旋纹理 (PST) [38]，与传统的 Rashba 和 Dresselhaus 类型不同。值得注意的是，在单层 Hf_2S 中观察到的 PST 是一种真正的全空间配置，称为 TFPST，并且不同于之前报道的 FPSTs [39, 40]，在这些 FPSTs 中，自旋简并在某些动量路径上仍然存在。相比之下，TFPST 有效地抑制了自旋去相位，并由于在整个 BZ 内定义明确的自旋守恒轴而实现了极长的自旋寿命。

鉴于只有 s_z 贡献于自旋极化，能量水平 E 处的自旋状态可以量化为：

$$s = \sum_n s_{nk} = \sum_n \frac{A}{4\pi^2} \int \langle \psi_{nk} | s_z | \psi_{nk} \rangle \delta(E_{nk} - E) dk, \quad (5)$$

其中 $|\psi_{nk}\rangle$ 是带 n 在 k 处的本征态，而 A 是 2D 单元晶胞的面积。相应的自旋极化率 p 定义为：

$$p = \frac{s}{\sum_n |s_{nk}|}, \quad (6)$$

其中 $p = 1$ 或 -1 对应完全自旋极化。如图 2(c) 中间面板所示，单层 Hf_2S 中的 p 明显不为零，并且在掺杂条件下可以达到 ~ 0.5 。在其他类型的 IV 磁性材料中，如 $\text{Co}_2\text{P}_4\text{O}_8$ ， p 甚至可以达到 ± 1 的值 (参见补充图 S2)，表明完全自旋极化电流的出现。

对称性 M_z 强制 σ_{xy} 作为唯一的非零 AHC 元素。如图 2(c) 右侧所示，尽管在电荷中性点附近 σ_{xy} 几乎为零，但在电子掺杂下它增加到 $-0.52 e^2/h$ ，在 0.55eV (P_1) 处，并在空穴掺杂下达到 $0.86 e^2/h$ ，在 -0.42eV (P_2) 处。这清楚地表明，即使没有非相对论自旋劈裂能带结构，IV 型磁性材料中也可以出现 AHE。在 P_1 和 P_2 能量下， p 主要为零，表明 AHE 可以由自旋中性的电流携带，并且自旋极化可忽略不计。由于 SOC，

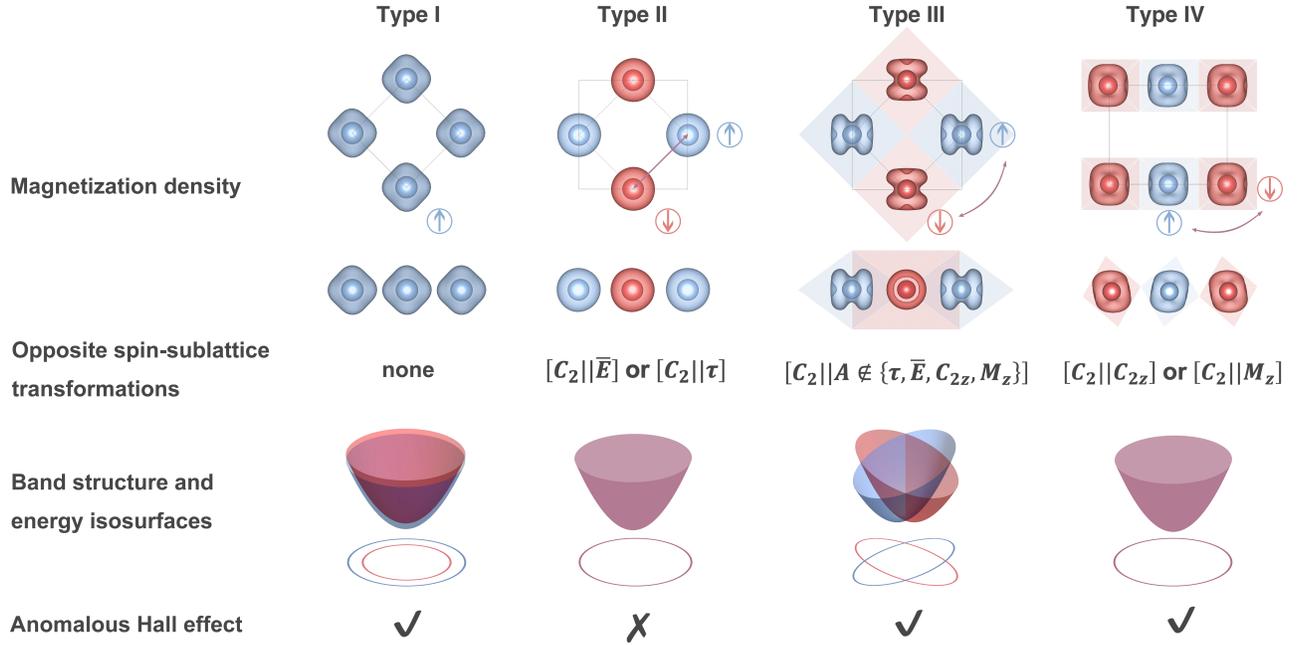


图 1. 图 (以列的形式) 展示了二维共线磁体的四个阶段。第一行展示的是模型, 显示了共线自旋排列的顶部和侧面视图及其磁化密度等值面, 用蓝色和鲑鱼色表示相反的自旋方向。第二行说明了每个阶段特征性的反向自旋亚晶格变换, 对应于第一行中的紫色箭头。第三行展示了能带结构及其对应的能量等值面的示意图。最后一行总结了 AHE 的存在与否。

Hf 原子的磁矩稍微偏离了 y 轴朝向 z 轴, 导致净磁化强度为 $\sim 10^{-4} \mu_B$ 的微小变化。通过将 Hf 的磁矩刚性约束在 y 轴上进行额外计算确认了 AHE 并非源自相对论弱铁磁性。

为了分析 AHE 的起源, 我们在图 3(a) 中绘制了在空穴掺杂下的 σ_{xy} 自旋分解结果, 其中自旋守恒 (自旋翻转) 部分对应于具有相同 (相反) 自旋的带间跃迁。结果显示, 在接近 P_2 时, σ_{xy} 主要由自旋翻转跃迁贡献。这与铁磁性 FePt [41] 和交替磁性的 RuO₂ [42] 形成对比, 在这些材料中, 通常是以自旋守恒过程为主。图 3(b) 显示了贝里曲率与能量为 P_2 处的 s_z -分解费米面的分布。贝里曲率热点位于两个自旋相反的能带之间形成小带隙的区域。值得注意的是, 这种自旋翻转贡献完全来自于梯子跃迁, 这些跃迁来源于费米能级两侧具有平行色散关系的能带对, 如图 3(a) 插图所示。为了突出这一观点, 我们选择了 $B_a - \Gamma - B_b$ 路径, 在该路径中计算出的自旋分裂能带结构及相关的 Berry 曲率峰值清楚地展示了梯级跃迁在自旋翻转贡献中的作用 [图 3(c)]。最后, 我们在固定费米能量下计算了 σ_{xy} , 当尼尔矢量在 $x-y$ 平面内旋转时 (见补充图

S5)。根据晶体对称性, σ_{xy} 曲线显示出明显的三重旋转模式, 当尼尔矢量改变其面内方向时。此外, 当尼尔矢量反转时, σ_{xy} 符号发生反转, 使其可以用作检测尼尔序的电学探针。

总结来说, 我们发现了一类以前被忽视的 IV 型二维共线磁体, 这类磁体超出了传统铁磁 (FMs)、反铁磁 (AFMs) 和亚铁磁 (AMs) 分类。该相以非相对论自旋简并带和时间反演对称性破缺响应 (如 AHE) 为特征, 它弥合了低维磁学中对称性和输运现象之间的差距。通过对自旋层群的系统分析和第一性原理计算, 我们确定了一些实际材料候选物, 其中单层 Hf₂S 是一个代表性实例。我们证明, 在考虑自旋轨道耦合后, 自旋中性的电流可以驱动 AHE, 并且伴随有由对称性保护的 TFPST。这些发现不仅推进了二维磁相理论的理解, 还为基于这类新型二维共线磁材料设计自旋电子器件开辟了新的途径。

本工作得到国家重点研发计划 (资助号 2022YFA1402600、编号 2022YFA1403800 和编号 2020YFA0308800)、国家自然科学基金 (资助号

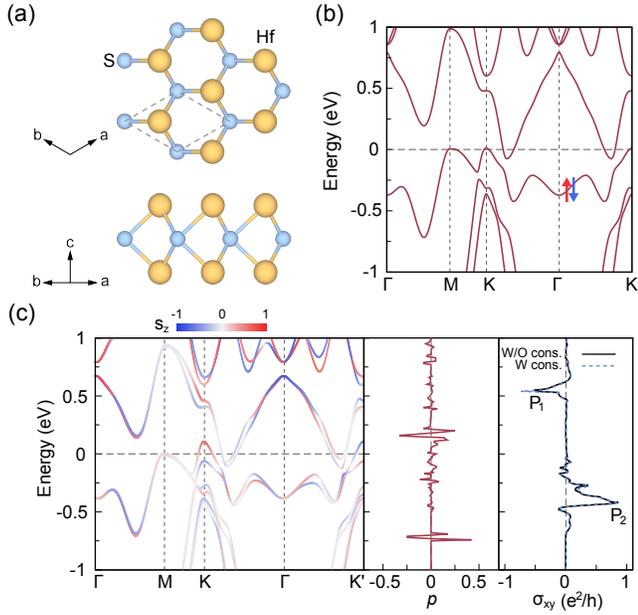


图 2. (a) 单层 Hf_2S 的晶体结构的顶视图和侧视图。(b) 非相对论能带结构。(c) s_z 分辨率的相对论能带结构 (左栏), 自旋极化率 p (中栏) 以及反常霍尔电导率 σ_{xy} (右栏), 其中尼尔矢量沿 $[120]$ 方向 (y -轴) 定向。为了进行比较, 展示了在刚性约束零净磁化下的 σ_{xy} 结果。

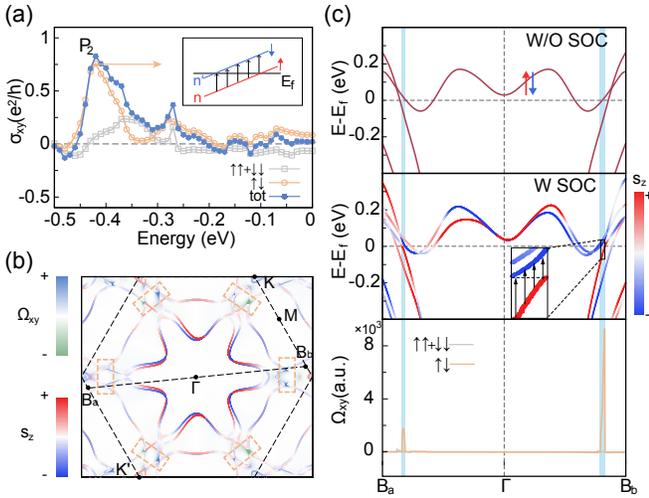


图 3. (a) 总异常霍尔电导率 σ_{xy} 及其分解为守恒自旋 ($\uparrow\uparrow + \downarrow\downarrow$) 和翻转自旋 ($\uparrow\downarrow$) 组分随费米能级的变化。插图说明了梯形跃迁的示意图。(b) P_2 能量处的 s_z 分辨率费米面和贝里曲率 Ω_{xy} 。翻转自旋贡献由橙色虚线矩形突出显示。(c) 非相对论 (顶部面板) 和 s_z -分辨的相对论 (中间面板) 能带结构, 以及在 P_2 能量下的贝里曲率分布 (底部面板)。中间面板中的插图显示了能带结构的放大视图, 强调了梯形跃迁的作用。

12274027、编号 12234003 和编号 12321004) 以及中央高校基本科研业务费专项资金 (资助号 2024CX06104) 的支持。

* wxfeng@bit.edu.cn

† ygyao@bit.edu.cn

- [1] V. Baltz, A. Manchon, M. Tsoi, T. Moriyama, T. Ono, and Y. Tserkovnyak, *Rev. Mod. Phys.* **90**, 015005 (2018).
- [2] J. Železný, P. Wadley, K. Olejník, A. Hoffmann, and H. Ohno, *Nat. Phys.* **14**, 220 (2018).
- [3] T. Jungwirth, J. Sinova, A. Manchon, X. Marti, J. Wunderlich, and C. Felser, *Nat. Phys.* **14**, 200 (2018).
- [4] L. Šmejkal, Y. Mokrousov, B. Yan, and A. H. MacDonald, *Nat. Phys.* **14**, 242 (2018).
- [5] L. Šmejkal, J. Sinova, and T. Jungwirth, *Phys. Rev. X* **12**, 031042 (2022).
- [6] L. Šmejkal, J. Sinova, and T. Jungwirth, *Phys. Rev. X* **12**, 040501 (2022).
- [7] L. Šmejkal, R. González-Hernández, T. Jungwirth, and J. Sinova, *Sci. Adv.* **6**, eaaz8809 (2020).
- [8] Z. Feng, X. Zhou, L. Šmejkal, L. Wu, Z. Zhu, H. Guo, R. González-Hernández, X. Wang, H. Yan, P. Qin, X. Zhang, H. Wu, H. Chen, Z. Meng, L. Liu, Z. Xia, J. Sinova, T. Jungwirth, and Z. Liu, *Nat. Electron.* **5**, 735 (2022).
- [9] C. Gong, L. Li, Z. Li, H. Ji, A. Stern, Y. Xia, T. Cao, W. Bao, C. Wang, Y. Wang, Z. Q. Qiu, R. J. Cava, S. G. Louie, J. Xia, and X. Zhang, *Nature* **546**, 265 (2017).
- [10] B. Huang, G. Clark, E. Navarro-Moratalla, D. R. Klein, R. Cheng, K. L. Seyler, D. Zhong, E. Schmidgall, M. A. McGuire, D. H. Cobden, W. Yao, D. Xiao, P. Jarillo-Herrero, and X. Xu, *Nature* **546**, 270 (2017).
- [11] Q. H. Wang, A. Bedoya-Pinto, M. Blei, A. H. Dismukes, A. Hamo, S. Jenkins, M. Koperski, Y. Liu, Q.-C. Sun, E. J. Telford, H. H. Kim, M. Augustin, U. Vool, J.-X. Yin, L. H. Li, A. Falin, C. R. Dean, F. Casanova, R. F. L. Evans, M. Chshiev, A. Mishchenko, C. Petrovic, R. He, L. Zhao, A. W. Tsen, B. D. Gerardot, M. Brotons-Gisbert, Z. Guguchia, X. Roy, S. Tongay, Z. Wang, M. Z. Hasan, J. Wrachtrup, A. Yacoby, A. Fert, S. Parkin, K. S. Novoselov, P. Dai, L. Balicas, and E. J. G. Santos, *ACS Nano* **16**, 6960 (2022).
- [12] S. N. Kajale, J. Hanna, K. Jang, and D. Sarkar, *Nano Res.* **17**, 743 (2024).
- [13] B. Zhang, P. Lu, R. Tabrizian, P. X.-L. Feng, and Y. Wu,

- npj Spintronics **2**, 6 (2024).
- [14] L. Bai, W. Feng, S. Liu, L. Šmejkal, Y. Mokrousov, and Y. Yao, *Adv. Funct. Mater.* **34**, 2409327 (2024).
- [15] D. Litvin and W. Opechowski, *Physica* **76**, 538 (1974).
- [16] D. B. Litvin, *Acta Crystallogr., Sect. A* **33**, 279 (1977).
- [17] A. F. Andreev and V. I. Marchenko, *Sov. Phys. Usp* **23**, 21 (1980).
- [18] C_∞ ensures that spin is a good quantum number, allowing the spin- (s) and momentum- (k) dependent energy bands to be written as $\epsilon(s, k)$. The operation \bar{C}_2 enforces the condition $\epsilon(s, k) = \epsilon(s, -k)$, rendering the nonrelativistic band structures of collinear magnets invariant under spatial inversion \bar{E} , regardless of whether the crystal itself possesses \bar{E} symmetry.
- [19] Since the symmetry $[C_2||E]$ in the nontrivial spin Laue group that describes conventional collinear AFMs corresponds to $[C_2||\tau]$ in their spin layer groups, the opposite-spin sublattices can be connected via either $[C_2||\tau]$ or $[C_2||\bar{E}]$. Accordingly, the type II and type IV magnetic phases defined in Ref. [20], which are characterized by $[C_2||\bar{E}]$ and $[C_2||\tau]$, respectively, are treated as a unified type II phase in the present work.
- [20] X. Chen, Y. Liu, P. Liu, Y. Yu, J. Ren, J. Li, A. Zhang, and Q. Liu, *Nature* (2025).
- [21] S. Zeng and Y.-J. Zhao, *Phys. Rev. B* **110**, 054406 (2024).
- [22] B. Pan, P. Zhou, P. Lyu, H. Xiao, X. Yang, and L. Sun, *Phys. Rev. Lett.* **133**, 166701 (2024).
- [23] Y. Liu, J. Yu, and C.-C. Liu, *Phys. Rev. Lett.* **133**, 206702 (2024).
- [24] S. Zeng and Y.-J. Zhao, *Phys. Rev. B* **110**, 174410 (2024).
- [25] See Supplemental Material at <http://link.aps.org/xxx>, which includes a detailed description of computational methods, supplemental tables and figures, and Refs. [21, 26–29, 35, 36, 43–50].
- [26] S. Haastруп, M. Strange, M. Pandey, T. Deilmann, P. S. Schmidt, N. F. Hinsche, M. N. Gjerding, D. Torelli, P. M. Larsen, A. C. Riis-Jensen, J. Gath, K. W. Jacobsen, J. J. Mortensen, T. Olsen, and K. S. Thygesen, *2D Mater.* **5**, 042002 (2018).
- [27] M. N. Gjerding, A. Taghizadeh, A. Rasmussen, S. Ali, F. Bertoldo, T. Deilmann, N. R. Knøsgaard, M. Kruse, A. H. Larsen, S. Manti, T. G. Pedersen, U. Petralanda, T. Skovhus, M. K. Svendsen, J. J. Mortensen, T. Olsen, and K. S. Thygesen, *2D Mater.* **8**, 044002 (2021).
- [28] N. Mounet, M. Gibertini, P. Schwaller, D. Campi, A. Merkys, A. Marrazzo, T. Sohier, I. E. Castelli, A. Cerpellotti, G. Pizzi, and N. Marzari, *Nat. Nanotechnol.* **13**, 246 (2018).
- [29] S. Pakdel, A. Rasmussen, A. Taghizadeh, M. Kruse, T. Olsen, and K. S. Thygesen, *Nat. Commun.* **15**, 932 (2024).
- [30] N. Nagaosa, J. Sinova, S. Onoda, A. H. MacDonald, and N. P. Ong, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 1539 (2010).
- [31] R. Shindou and N. Nagaosa, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 116801 (2001).
- [32] W. Feng, J.-P. Hanke, X. Zhou, G.-Y. Guo, S. BlÅ¼gel, Y. Mokrousov, and Y. Yao, *Nat. Commun.* **11**, 118 (2020).
- [33] X. Zhou, W. Feng, Y. Li, and Y. Yao, *Nano Lett.* **23**, 5680 (2023).
- [34] S. H. Kang, J. Bang, K. Chung, C. N. Nandadasa, G. Han, S. Lee, K. H. Lee, K. Lee, Y. Ma, S. H. Oh, S.-G. Kim, Y.-M. Kim, and S. W. Kim, *Sci. Adv.* **6**, eaba7416 (2020).
- [35] S. Liu, C. Wang, H. Jeon, Y. Jia, and J.-H. Cho, *Phys. Rev. B* **105**, L220401 (2022).
- [36] J.-F. Zhang, D. Xu, X.-L. Qiu, N.-N. Zhao, Z.-Y. Lu, and K. Liu, *J. Phys. Chem. C* **127**, 696 (2023).
- [37] Z. Zhang, W. Wu, G.-B. Liu, Z.-M. Yu, S. A. Yang, and Y. Yao, *Phys. Rev. B* **107**, 075405 (2023).
- [38] L. L. Tao and E. Y. Tsymlal, *Nat. Commun.* **9**, 2763 (2018).
- [39] J. Ji, F. Lou, R. Yu, J. S. Feng, and H. J. Xiang, *Phys. Rev. B* **105**, L041404 (2022).
- [40] M. A. U. Absor, A. Lukmantoro, and I. Santoso, *J. Phys.: Condens. Matter* **34**, 445501 (2022).
- [41] H. Zhang, F. Freimuth, S. Bl¼gel, Y. Mokrousov, and I. Souza, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 117202 (2011).
- [42] X. Zhou, W. Feng, R.-W. Zhang, L. Šmejkal, J. Sinova, Y. Mokrousov, and Y. Yao, *Phys. Rev. Lett.* **132**, 056701 (2024).
- [43] G. Kresse and J. Furthm¼ller, *Phys. Rev. B* **54**, 11169 (1996).
- [44] P. E. Bl¼chl, *Phys. Rev. B* **50**, 17953 (1994).
- [45] G. Kresse and D. Joubert, *Phys. Rev. B* **59**, 1758 (1999).
- [46] J. P. Perdew and W. Yue, *Phys. Rev. B* **33**, 8800 (1986).
- [47] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
- [48] G. Pizzi, V. Vitale, R. Arita, S. Bl¼gel, F. Freimuth, G. G¼ranton, M. Gibertini, D. Gresch, C. Johnson, T. Koretsune, J. Ibañez-Azpiroz, H. Lee, J.-M. Lihm, D. Marchand, A. Marrazzo, Y. Mokrousov, J. I. Mustafa,

- Y. Nohara, Y. Nomura, L. Paulatto, S. Poncé, T. Pönweiser, J. Qiao, F. Thöle, S. S. Tsirkin, M. Wierzbowska, N. Marzari, D. Vanderbilt, I. Souza, A. A. Mostofi, and J. R. Yates, *J. Phys.: Condens. Matter* **32**, 165902 (2020).
- [49] Y. Yao, L. Kleinman, A. H. MacDonald, J. Sinova, T. Jungwirth, D.-s. Wang, E. Wang, and Q. Niu, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 037204 (2004).
- [50] C. Cui, R.-W. Zhang, Y. Han, Z.-M. Yu, and Y. Yao, [arXiv:2405.15410](https://arxiv.org/abs/2405.15410) .