物理所宽温域磁-结构相变的新材料探索研究取得进展

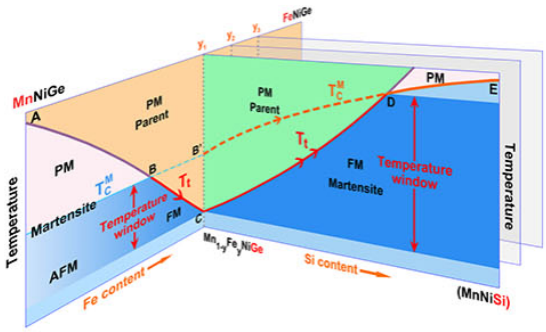

图2 合金设计方案示意图

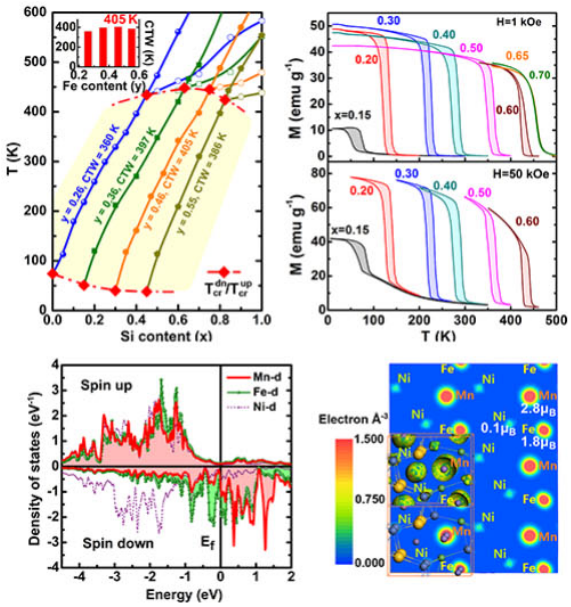

图3 获得的居里温度窗口，其中的一级磁-结构相变及电子结构计算结果

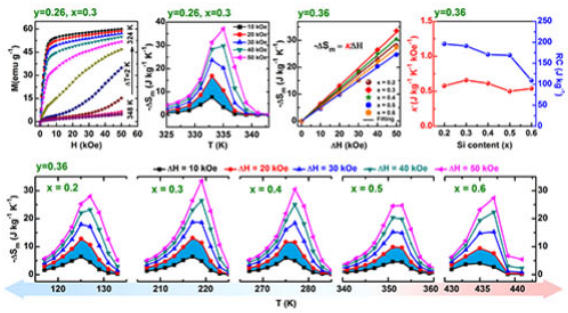

图4 宽温域磁场驱动相变及巨磁热效应

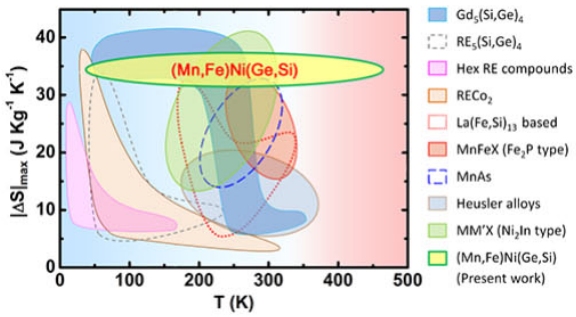

图5 该研究所获体系的磁热效应覆盖温区对比

兼有磁性和晶体结构相变（热弹性一级相变，即马氏体相变）的磁性材料，称为磁相变材料，是目前磁性材料领域中仅次于永磁和软磁材料的重要功能性材料。由于这类材料中原子磁矩的铁磁性和晶格的铁弹性都非常突出且耦合紧密，因此它也是一种高效的多铁性功能材料。在相变过程中，体系的晶体对称性、轨道分布、电子结构和磁有序结构等物理状态都发生显著的变化和重构，表现出磁驱形状记忆、磁驱大应变、大磁热效应、大磁电阻、磁交换偏置、相变相关的霍尔效应等许多丰富的、明显的和可资应用的物理效能。

由于磁格和晶格的紧密耦合，凡是可对晶格和磁性任一方施加影响的物理作用（如，温度、应力和磁场等）都会通过磁-结构耦合影响到另外一方；而两种以上的物理作用同时作用在材料上，将在一个多维的作用空间中，实现各种不同途径的状态转变。这就是大家常说的“多场调控”。采用材料物理的手段，通过调节相变相关的物理参量，改变两相平衡的临界条件，可以将材料的有关特性针对其应用要求进行优化。由于在相变物理的基础研究领域以及智能材料、传感器、驱动器、信息存储、磁制冷/热、热电转换等潜在应用领域具有重要意义，磁-结构相变成为各国长期坚持研究和逐渐升温的一个重要研究方向。

中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家实验室（筹）磁学国家重点实验室M05研究组致力于磁-结构相变及新材料的研究，先后获得了多种磁驱动相变体系，并在国际上提出了“铁磁激活”邻近原子模型用于解释磁结构翻转机制，为Heusler合金的磁场驱动相变提供了重要物理基础。

在新型六角结构MM'X合金探索中，基于磁性-共价竞争机制，提出了以其“居里温度窗口效应”为途径获得强磁转变，从而实现磁场驱动相变的新思路，并采用“等结构合金化”原则对体系进行原子种类和占位选择和控制，完成了多个影响相变因素的同步调控，获得了新型磁-结构相变材料及物性等多方面的研究成果（Mn1-yFeyNiGe、MnNi1-yFeyGe、Mn1-yCoyNiGe）【Nature Communications 3, 873 (2012)】、【Applied Physical Letters 102, 122405 (2013)】、【Applied Physical Letters 105, 062401 (2014)】。

最近，该研究组的博士生魏志阳、助理研究员刘恩克和副研究员王文洪在已有工作的基础上，进一步提出了将材料保持强铁磁特性，把磁-结构相变向高温扩展，在跨室温的宽温域中获得连续可调的磁-结构相变的目标。该研究的主要难点是，如何同时提高结构相变的转变温度（促进母相失稳）和马氏体相本身的居里温度（增强磁交换作用），将二者的交点推移至高温，并能始终保持马氏体相中已建立的铁磁耦合。

在该研究中，他们继续运用“等结构合金化”原则和“居里温度窗口”方法，选择了满足相变调控条件的MnNiSi（高相变温度，高居里温度）作为合适的等结构体，进而确立了在Mn1-yFeyNiGe中以Si替代Ge的具体实验方案，确定了该材料设计中的最佳合金化元素，对影响结构成相、相转变和磁交换作用的因素进行调节。实验采用双变量方式，结合第一性原理计算，进行了一系列成分设计，最终在Mn1-yFeyNiGe1-xSix体系中获得了跨越40 K至450 K的超宽居里温度窗口。

该结果不仅将居里温度窗口由原来的280 K拓展至400 K，覆盖了已知一级磁-结构马氏体相变的温度极限，同时将相变温度抬升至450 K（170 °C）高温。在整个居里温度窗口内，体系的一级磁-结构相变表现出强耦合、窄热滞、低饱和场、大磁性差、巨体积膨胀、巨磁热效应、高的功能稳定性。所获得的体系为宽温域内磁热、压热、应变应用，以及高温区的热磁发电、磁热泵等提供了潜在的候选。

该研究从原子有序占位和电子结构层面进行材料设计，是对已有研究的深入和拓展，对相变材料探索具有重要启示意义。相关工作作为内封面故事（Inside Front Cover）于近期发表在Advanced Electronic Materials上【Advanced Electronic Materials 1, 1500076 (2015)】。

该研究工作得到了国家基金委、科技部“973”计划和中科院“青促会”的支持。

原文地址：http://www.china-nengyuan.com/tech/81495.html