

Heusler 合金 $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$ 跨尺度结构有序度调控及其对磁致伸缩性能的影响*

姚亮¹⁾²⁾ 芦光辉¹⁾²⁾ 杜杰¹⁾ 刘永昌²⁾³⁾ 郝学奎^{2)†} 王文洪^{1)‡}¹⁾ (天津工业大学电子与信息工程学院, 天津 300387)²⁾ (中国科学院物理研究所, 北京 100190)³⁾ (中国科学院大学, 北京 100049)

(2025 年 3 月 18 日收到; 2025 年 4 月 30 日收到修改稿)

本文通过实验系统研究了 Heusler 合金 $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$ ($x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$) 体系中原子占位有序度与磁致伸缩的关联机制. 研究发现, Al 掺杂可导致体系从高度有序的 $L2_1$ 结构向 $B2$ 无序结构转变, 并在 $x = 0.25-0.5$ 时诱导 $L2_1/B2$ 两相共存界面态的形成, 此时有序度计算结果显示 $S_{L2_1}/S_{B2} = 0.5-0.9$. 实验结果表明, 这种界面态的出现显著增强了饱和磁致伸缩系数并在过渡到 $B2$ 结构后再次减小. 该结果定量揭示了原子的局部无序占位可通过降低立方对称性、引入局域晶格畸变并改变磁畴结构, 从而提升磁弹耦合的物理机制. 本研究报道了 12 种 Co 基 Heusler 合金的磁致伸缩系数, 其中 Co_2MnGa 和 Co_2CrGa 展现出优于其他 Co 基 Heusler 合金的潜力, 填补了该体系磁致伸缩性能参数的空白, 并验证了该多晶材料的线性正磁致伸缩特性; 提出了基于原子占位有序度调控的磁致伸缩性能优化策略, 为开发耐高温、高自旋极化率的磁致伸缩材料提供了新方向.

关键词: Co 基 Heusler 合金, 有序度, 结构相变, 磁致伸缩**PACS:** 73.61.At, 64.60.Cn, 75.80.+q**DOI:** 10.7498/aps.74.20250358**CSTR:** 32037.14.aps.74.20250358

1 引言

近年来, Heusler 合金 (化学式 X_2YZ) 因其丰富的物理性质在自旋电子学器件^[1-4]、形状记忆合金^[5,6]等领域取得了卓著的研究成果. 其中, Co 基 Heusler 合金因其高居里温度与潜在半金属性成为该家族中最具潜力的体系之一. 自 1983 年 de Groot 首次提出半金属铁磁体概念以来^[7], 多种 Co 基 Heusler 合金 (如 Co_2MnSi , Co_2MnGe , Co_2MnSn 等) 相继被理论预测或实验证实具有半金属性^[8,9]. 此后 Co

基 Heusler 合金凭借其高自旋极化率、高居里温度 and 较强的磁性备受关注^[10]. 然而, 当前研究多聚焦于其自旋输运特性, 对其磁致伸缩性能的系统探索仍处于起步阶段.

磁致伸缩效应源于材料的磁弹耦合, 其本质是铁磁性材料中原子磁矩的有序排列与晶格形变之间的相互作用. 目前广泛应用的磁致伸缩材料主要有 Tb-Dy-Fe 合金与 Fe-Ga 合金. Tb-Dy-Fe 合金有 $\lambda_s > 1000$ ppm (1 ppm = 10^{-6}) 的巨磁致伸缩和低磁晶各向异性^[11], 但是材料脆性大, 驱动磁场强而且稀土元素含量大, 在实际应用中受限. Clark

* 国家重点研发计划 (批准号: 2021YFB3501402, 2024YFF0726703) 和国家自然科学基金 (批准号: 12274321, 12361141823) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: xi@iphy.ac.cn

‡ 通信作者. E-mail: wenhongwang@tiangong.edu.cn

等^[12]在2000年首次发现Fe-Ga合金的磁致伸缩可达~200 ppm, 后有研究报道了Fe-Ga合金的磁致伸缩最大可达400 ppm^[13], 而且具有良好的力学性能和较低的饱和磁场^[14]. 值得注意的是, Heusler合金在磁致伸缩方向的研究长期集中于Ni₂MnGa等基于马氏体相变的铁磁形状记忆合金材料^[15,16], 后来Co₂NiGa同样被发现为此类磁场驱动相变磁致伸缩材料^[17-19], 其大应变源于磁场驱动马氏体孪晶的重排过程. 相比之下, Co基Heusler合金的立方对称性晶格与成分可调性为实现磁致伸缩性能优化提供了新思路——通过原子占位有序度调控, 可能在不依赖相变的条件下增强磁弹性响应.

研究表明, Co基Heusler合金的复杂电子结构与磁性对原子占位有序度非常敏感, 其自旋极化率(P)和居里温度(T_c)都容易受晶体结构(如 $L2_1$, $B2$, $A2$)的影响. 其中 $L2_1$ 结构的高度有序是高自旋极化率的必要条件, 而无序结构会破坏半金属性导致自旋极化率降低, Ravel等^[20]通过计算与实验发现了Co₂MnSi中Co-Mn原子的无序占位严重降低了材料的自旋极化率. 另外, 原子占位也会影响d轨道电子的交换作用, 进而影响居里温度, Srivastava等^[21]在Co₂CrAl中用Fe取代Cr使晶体结构由 $A2$ 无序转变为 $B2/A2$ 混合结构并认为Fe原子占据空位增强了d-d交换作用进而导致了居里温度升高. 显然有序度可直接影响材料的电子结构与交换作用, 而这过程中也影响了磁性^[22]与磁晶各向异性. 最近有研究发现, 通过对磁性Weyl半金属Co₂MnGa薄膜在不同温度下进行退火来改变其有序度发现 $L2_1$ 相的出现显著增强了立方磁晶各向异性^[23]. 结合磁致伸缩效应的原理, 可以推测原子占位有序度对Co基Heusler合金的磁致伸缩性能也可能有相似的作用机制. 早在Fe-Ga合金中就有研究表明, 有序-无序机制可能是磁致伸缩性能增强的一个关键, 无序结构中的Ga原子沿特定晶体方向的局部短程有序导致晶格的四方畸变, 从而大幅度提升了Fe-Ga合金的磁致伸缩^[13], 这揭示了无序工程在磁致伸缩材料设计中的潜力. 然而, Co基Heusler合金的高对称性晶格与强轨道杂化特性可能导致其响应机制显著不同, 亟待实验验证.

Co₂FeAl _{x} Si_{1- x} 合金体系通过调整Al/Si比例能灵活调控系统有序度. 基于此, 本文以Co₂FeAl _{x} Si_{1- x} 合金为主要研究对象, 聚焦原子占位有序度与磁致

伸缩性能两个要素. 通过掺杂Al原子替代Si位点, 调控Co₂FeSi的原子占位有序度, 进而诱导结构转变, 来探究成分-结构-磁致伸缩性能的关联机制.

2 实验方法

Co₂FeAl _{x} Si_{1- x} ($x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$)合金样品采用纯度大于99.9%的金属单质按照化学计量配比, 配比误差小于0.1%, 在氩气氛围保护下使用电弧炉均匀熔炼4次制备得到5种组分的多晶样品, 重量损失小于1%. 随后经过线切割得到磁致伸缩测量样品, 将不同样品分别真空密封在石英管内, 在873 K (600 °C)下分别退火1 d和7 d, 随后自然冷却至室温. 采用Cu靶X射线粉末衍射仪(XRD)对退火前后的样品进行材料结构表征并计算晶格常数. 磁致伸缩测量采用标准电阻应变片法(应变片灵敏度系数 $k = 2.08 \pm 0.01$), 依托自搭建高精度磁致伸缩测量设备测量 λ - H 曲线和 λ - θ 曲线, 得到室温磁致伸缩结果. 采用振动样品磁强计(VSM, 磁场范围0—1.2 T)对磁致伸缩样品进行磁化曲线(M - H)测试, 以分析其磁化行为与有序度的关联性.

3 结果与讨论

3.1 Co₂FeAl _{x} Si_{1- x} 的晶体结构与有序度

Full-Heusler合金是一种原子占位高度有序的三元金属间化合物, 其一般形式通常为 X_2YZ , 其中 X, Y 为过渡族金属, Z 为主族元素, 理想情况下其晶体结构为 $L2_1$ 结构, 各原子占据特定晶格位点形成长程有序结构, 后续实验证明了Co₂FeAl _{x} Si_{1- x} 的晶体结构为 $L2_1$ 结构和 $B2$ 结构, 如图1(a)所示, $L2_1$ 结构可以看作由8个体心立方晶格堆叠而成, 其中4个Co原子分别占据体心位置, Fe原子和Si/Al原子在8个端点交替占位; $B2$ 结构为4个Co原子分别占据体心位置, 而Fe原子与(Si, Al)原子混乱占位.

根据X射线衍射可以确定材料的结构, 从Co₂FeAl _{x} Si_{1- x} ($x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$)的粉末XRD结果(图1(b))可以看出, Al含量在0—0.5时, 除了几个主要衍射峰外, 在30°附近存在(111)和(200)两个超晶格峰, 而当Al含量在0.75—1时, 除几个主要衍射峰外, 在30°附近只存在(200)

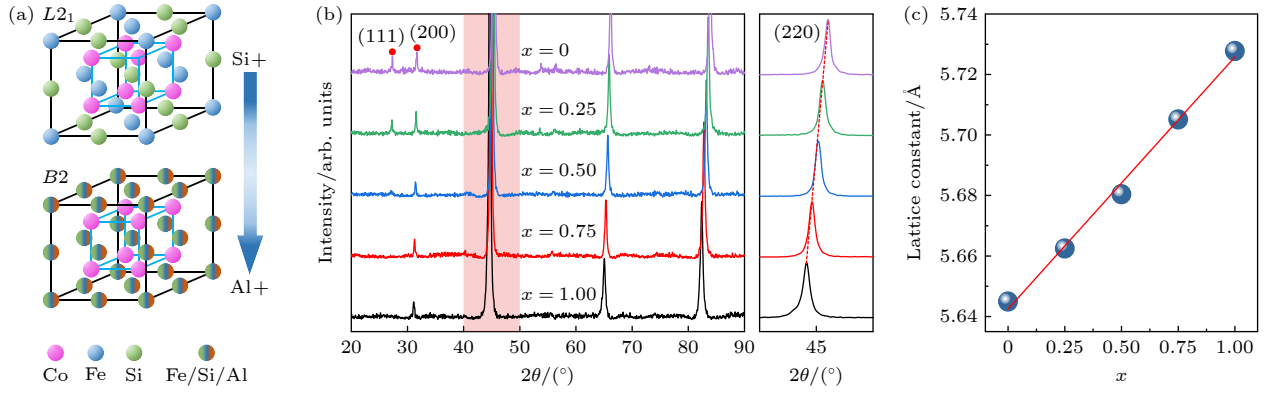


图 1 (a) $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$ 的晶体结构 (L_{21} 结构和 B_2 结构); (b) $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$ 样品的粉末 XRD 图谱; (c) $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$ 样品的晶格常数随 Al 含量 x 的变化关系

Fig. 1. (a) Crystal structure of $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$ (L_{21} structure and B_2 structure); (b) powder XRD patterns of $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$; (c) variation of lattice constant with Al content x in $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$.

一个超晶格峰, 在高度有序的 Heusler 合金的 XRD 衍射峰中出现 (111) 和 (200) 则可以认定样品为 L_{21} 结构, 如果只出现 (200) 则可以认定样品为 B_2 结构. 因此在 $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$ 体系中, 存在 L_{21} 和 B_2 两种结构, 在 $x \leq 0.5$ 时更容易形成 L_{21} 高度有序结构, 而在 $x > 0.5$ 时更容易形成 B_2 有序结构, 也可以说富 Si 的条件有助于材料的有序化, 这是因为 Si 与过渡元素的 p-d 轨道杂化比 Al 更强, 稳定了 L_{21} 结构^[24,25]. 另外, 在 XRD 图谱中还可以清晰地看出随着 Al 含量的增大, (200) 峰位明显向左偏移, 如图 1(b) 所示, 这直接证明了晶格常数的增大, 根据布拉格方程 $n\lambda = 2d \sin \theta$, 当晶格常数变化时, 晶面间距 d 会改变, 导致衍射角 θ 发生变化, 进而引起衍射峰的偏移. 在这里 Al 原子半径相对 Si 原子半径较大, 而且 Al 与过渡元素的 p-d 轨道杂化较弱, 因此随 Al 含量增大, 晶格常数增大, 晶面间距 d 也增大, 所以衍射角减小, 峰位向低角度偏移, 根据 XRD 结果可以估算得到晶格常数, 从图 1(c) 可以看出, 样品的晶格常数随 Al 含量的增大呈线性增大的趋势, 其中 Co_2FeSi ($x = 0$) 的晶格常数为 5.645 Å, Co_2FeAl ($x = 1$) 的晶格常数为 5.728 Å, 这与已经报道的结果相近^[26,27], $x = 0.25, 0.5, 0.75$ 时的晶格常数分别为 5.662, 5.682, 5.705 Å.

通常在实验中采用退火的手段来优化原子占位进而促进有序化, 将不同组分样品在 873 K (600 °C) 的温度下分别退火. 图 2(a), (b) 分别为退火 1 d 和 7 d 的粉末 XRD 图谱, 右侧小图为红色阴影部分 (111) 和 (200) 的放大图. 可以看到在退火后依

然存在明显的 (111) 和 (200) 超晶格峰, 所有样品仍然保持 $x \leq 0.5$ 时的 L_{21} 结构和 $x > 0.5$ 时的 B_2 结构, 没有多余的杂相产生. 从 (111) 和 (200) 的放大图中可以观察到随 Al 含量增大, (111) 超晶格峰强度减弱, 在 $x = 0.5$ 时强度最弱, 在 $x = 0.75$ 时 (111) 消失. XRD 结果并不能明显表现出系统的有序程度, 有序度参数 S 可以直观表示出原子占位的有序程度. 进一步在 25° — 35° 范围内精细化扫描 (111) 和 (200) 超晶格峰, 根据衍射峰相对强度, 可以通过以下两式来估算各个样品的原子占位有序度 S :

$$S_{L_{21}}^2 = \frac{I_{\text{exp}}(111)/I_{\text{exp}}(220)}{I_{\text{cal}}(111)/I_{\text{cal}}(220)}, \quad (1)$$

$$S_{B_2}^2 = \frac{I_{\text{exp}}(200)/I_{\text{exp}}(400)}{I_{\text{cal}}(200)/I_{\text{cal}}(400)}, \quad (2)$$

(1) 式和 (2) 式可分别计算 L_{21} 结构和 B_2 结构的有序度参数 S , $I(111)$ 和 $I(200)$ 表示两个超晶格峰值强度, $I(220)$ 和 $I(400)$ 表示两个主峰峰值强度, “exp”和“cal”分别表示 XRD 测量结果与理论有序度的计算结果, 理论值可通过模拟得到. 当 $S = 1$ 时, 表示系统完全有序, 当 $S = 0$ 时, 表示系统完全无序^[28].

图 2(c)—(e) 分别显示未退火, 退火 1 d 和退火 7 d 的有序度 S 随 Al 含量 x 的变化关系, 由计算结果可以直观地看出, $x = 0$ — 0.5 时系统中主要为 L_{21} 结构, 但随 Al 含量的增大, L_{21} 结构占比减小, B_2 结构占比增大, 表明此时系统处于 L_{21} 结构和 B_2 结构两相共存状态. $x = 0$ 时 $S_{L_{21}}$ 最大, 在 $x = 0.7$ — 0.8 时, 最接近 L_{21} 有序, 由于 Si 与 Co,

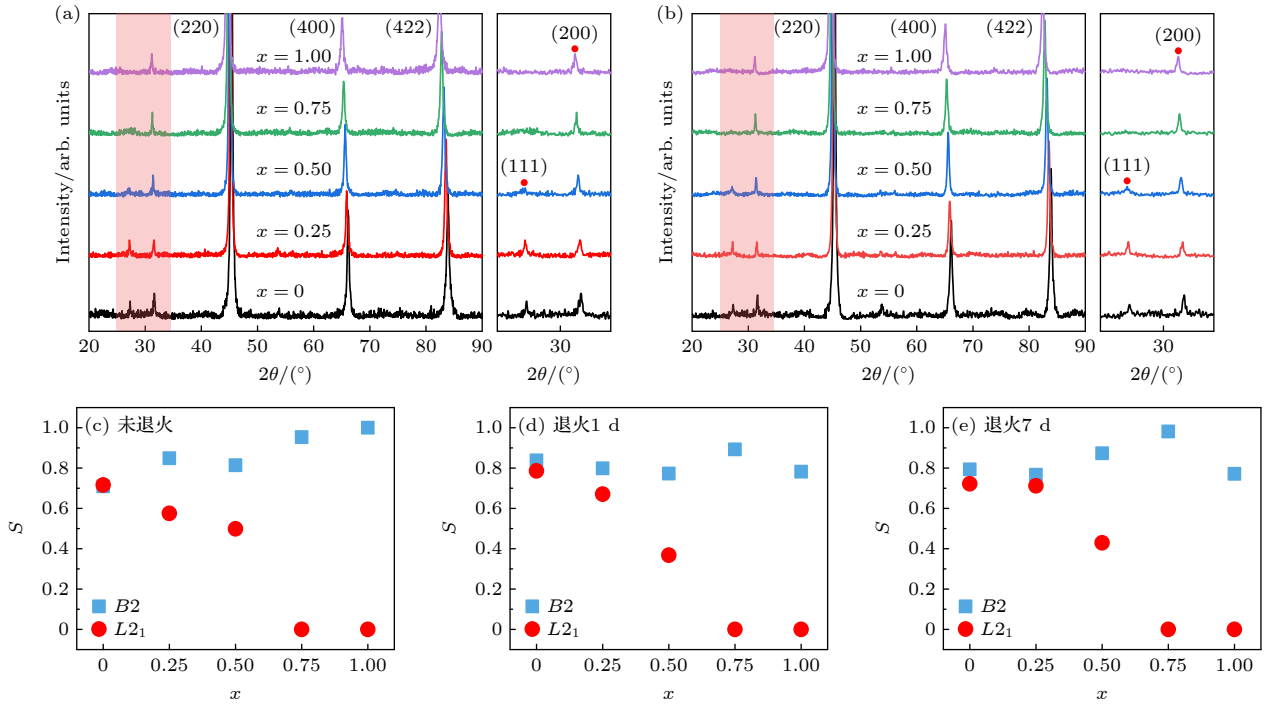


图2 $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$ 样品退火 1 d (a) 和 7 d (b) 的粉末 XRD 图谱; (c)–(e) 退火前后样品的有序度 S_{L21} 和 S_{B2} 随 Al 含量 x 的变化关系

Fig. 2. (a), (b) Powder XRD patterns of $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$ annealed for 1 day and 7 days; (c)–(e) variation of ordering degrees S_{L21} and S_{B2} with Al content x before and after annealing.

Fe 的混合焓大于 Al, 因此 Si 与这种过渡金属成键能力相对 Al 要更强, 强的键合力增强了原子占位稳定性, 因此随 x 的增大 S_{L21} 逐渐减小, 也就是说随着 Al 含量的增大, B2 结构的占比是增大的. $x = 0.25$ 时 S_{L21} 为 0.5—0.7, 到 $x = 0.5$ 时 S_{L21} 减小至 0.3—0.5. 在 $x = 0.75$ 时已完全成为 B2 结构, 此时没有超晶格峰 (111) 出现, 计算结果与 XRD 测试结果完全相符. 另外, 整个体系中所有样品的 $S_{B2} > 0.7$, 都维持着良好的 B2 结构, 值得注意的是, $x = 1$ (Co_2FeAl) 样品在没有退火时 (图 2(c)) S_{B2} 几乎达到了 0.99, 呈现近乎理想的 B2 结构, 而退火 1 d 和 7 d 后 (图 2(d), (e)) S_{B2} 较退火前有明显减小, 这可能是因为 Al 原子自身弱的成键能力和较大原子半径, 导致的不稳定加上退火时高温下的热扰动使得原子趋向混乱无序, 而自然冷却的条件使其更容易保持在了相对无序的状态, 这也可以解释在 $x \geq 0.5$ 时退火后的 S_{L21} 减小, 而 $x < 0.5$ 时退火后 S_{L21} 增大的现象. 对于 $x = 0.25, 0.5, 0.75$ 时, 系统的总能量随 Al 含量的增大而减小, 故 S_{L21} 减小. 另外, 可以观察到 $x = 0, 0.25, 0.5$ 时, 退火后的 S_{L21} 相较于退火前增大, 而 $x = 0.75, 1$ 时 S_{B2} 较于退火前减小, 这一现象同样印证了上述观点.

3.2 $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$ 的有序度与磁致伸缩的关联性

采用了自主搭建装置进一步测试了样品的磁致伸缩性能, 电阻应变片法可简单并精确测试材料的磁致伸缩系数 (λ_s), 其基本过程为应变片随样品在施加不同磁场时产生不同大小的形变, 应变片上的电阻栅随之产生形变, 电阻栅形变后使其电阻发生变化, 测量其电阻变化即可得到样品本身的应变.

经过磁致伸缩测量我们发现了 $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$ 在不同有序结构下的磁致伸缩应变存在明显差异, 图 3(a) 分别为处于不同有序态下的 3 个已退火 7 d 样品的磁致伸缩曲线, 可以看到, 在 $L2_1 + B2$ 时 λ_s 明显增大. $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$ 所有样品退火前后的磁致伸缩测量结果如图 3(b), 其中黑色、蓝色、红色曲线分别表示未退火样品、退火 1 d 和退火 7 d 样品的磁致伸缩应变随 Al 含量 x 的变化关系. 整体来看磁致伸缩应变 λ_s 随 Al 含量 x 的变化呈先增大后减小的趋势, λ_s 从 $x = 0—0.25$ 明显增大, $x = 0.5$ 时与 $x = 0.25$ 时磁致伸缩值大小相近, 此时应变最大可达到 30—32 ppm, 从 0.5—1 几乎呈线性减小的趋势. 值得注意的是, 正分的 $x = 0$ (Co_2FeSi) 和 $x = 1$ (Co_2FeAl) 磁致伸缩应变始终

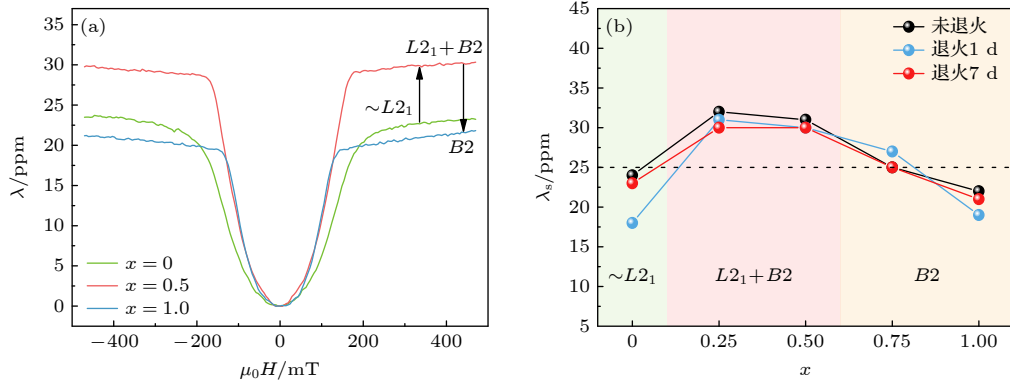


图 3 (a) 3 种不同有序态的磁致伸缩曲线; (b) $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$ 退火前后的磁致伸缩应变 λ_s 随 Al 含量 x 的变化关系
Fig. 3. (a) Magnetostriction curves of three different ordered states; (b) variation of magnetostriction λ_s with Al content x in $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$ before and after annealing.

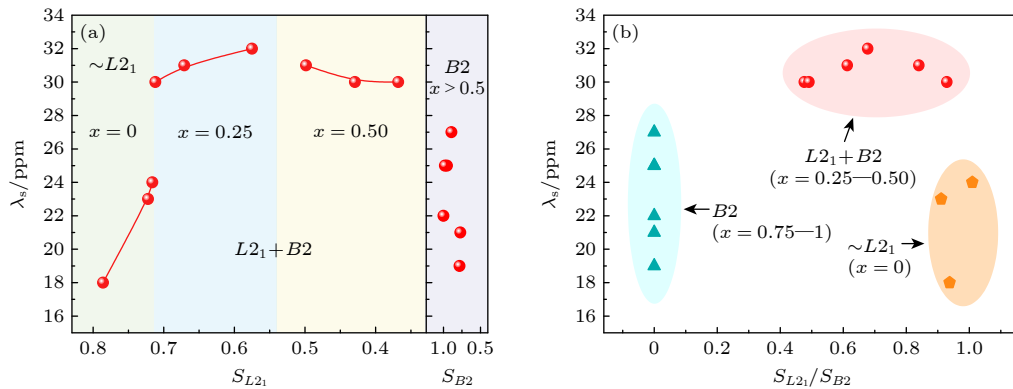


图 4 (a) $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$ 的磁致伸缩应变 λ_s 随 $S_{L_{21}}$ 的变化关系; (b) $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$ 的磁致伸缩应变 λ_s 随 $S_{L_{21}}/S_{B_2}$ 的变化关系
Fig. 4. (a) Variation of magnetostriction λ_s with $S_{L_{21}}$ and S_{B_2} in $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$; (b) variation of magnetostriction λ_s with $S_{L_{21}}/S_{B_2}$ in $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$.

是最小的 (<25 ppm). 这些现象都说明了少量 Al 的引入是导致其磁致伸缩应变增大的根本原因, 过量的 Al 反而会导致磁致伸缩应变减小.

将磁致伸缩测量结果与有序度计算结果进行综合分析, 因在 $x=0-0.5$ 时材料体系以 L_{21} 结构为主导, 所以接下来将主要以 L_{21} 结构进行分析. 图 4(a) 总结了 $x=0-0.5$ 的所有样品磁致伸缩应变 λ_s 随 $S_{L_{21}}$ 的变化关系, 其中绿色区域为 Al 含量为 0 时的磁致伸缩值, 蓝色区域为 Al 含量为 0.25 时的磁致伸缩值, 黄色区域为 Al 含量为 0.5 时的磁致伸缩值, 另外右侧小图为 $x=0.75, 1$ 时完全 B_2 有序的结果. 不难看出 λ_s 随 $S_{L_{21}}$ 的减小呈现先增大, 再逐渐变缓, 然后减小的趋势, 其中在 $S_{L_{21}}$ 从 0.8—0.7 区间 λ_s 迅速增大, 随后在 0.7—0.55 区间内变缓, 在小于 0.55 后慢慢减小, 根据此变化趋势也可以推测出在 $S_{L_{21}} < 0.4$ 直到 B_2 区域后 λ_s 会迅速减小. 由此可以得出: 1) 当材料为高

度 L_{21} 有序时各原子严格占位, 此时材料通常具有高自旋极化率和良好的磁性, 但磁致伸缩可能较低, 因为原子排列有序, 磁畴结构可能更规则, 磁矩的重新取向需要较高的能量, 导致晶格应变较小; 2) 当少量 Al 替代 Si 时, 结构从 L_{21} 逐渐转向 B_2 , Fe/(Si, Al) 占位变得混乱导致 $S_{L_{21}}$ 降低, 此时处于 L_{21} 和 B_2 两相共存的界面态, 部分原子无序可能使原子间交换作用的强度不均匀, 降低晶体结构的对称性, 改变磁晶各向异性, 从而形成部分较大尺寸且方向随机的磁畴, 磁场下磁畴的旋转与移动更有助于增强磁弹耦合并产生较大的磁致伸缩应变; 3) 当更多 Al 掺入直至完全替代 Si 时, 材料完全转为 B_2 结构, 此时原子无序程度更高, 原子占位过于混乱导致磁畴尺寸减小且方向过于随机, 此时磁晶各向异性更加弱, 磁畴之间的耦合作用减小, 使在宏观上无法形成一致的应变方向, 导致整体磁致伸缩减小.

此前认为 L_{21} 和 B_2 两相共存的界面态会是磁致伸缩增大的主要原因, 因此也可以通过计算 $S_{L_{21}}/S_{B_2}$ 作为参考来衡量不同有序态的占比对磁致伸缩的影响, $S_{L_{21}}/S_{B_2}$ 可以说明在界面态 L_{21} 结构与 B_2 结构的比例. 图 4(b) 为磁致伸缩值随 $S_{L_{21}}/S_{B_2}$ 的值的变化的关系, 其中绿色区域为完全 B_2 结构, 此时 $S_{L_{21}}/S_{B_2}$ 为 0, 红色区域为两相共存的界面态, 橙色区域为接近完全 L_{21} 结构. 可以看出红色区域的磁致伸缩值明显最大, 此时 $S_{L_{21}}/S_{B_2}$ 的值为 0.5—0.9, 这再次说明了以 L_{21} 结构为主的少部分 B_2 结构有助于提高整体的磁致伸缩性能.

3.3 $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$ 的 M - H 曲线与磁致伸缩性能分析

通过 VSM 对 $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$ 系列样品的磁化曲线 (M - H) 进行测试, 所有样品均为形状均匀的磁致伸缩测试专用样品. 实验结果表明 (图 5), M - H 曲线中观测到的饱和磁场与对应样品的磁致伸缩曲线饱和磁场基本一致. 进一步分析发现, 与未掺杂的 Co_2FeSi (红色曲线) 相比, Al 元素的引入显著降低了样品的饱和磁场. 这是因为 Al 掺杂诱导的 B_2 相内原子占位无序破坏了原本 L_{21} 有序相的立方对称性, 从而显著削弱了磁晶各向异性. 这种对称性破缺使材料磁矩在外加磁场中更易发生定向排列, 进而减少实现磁饱和所需的外加磁场强度.

通过图 5(a) 的测试结果可以观察到, $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$ 合金的饱和磁化强度 M_s 随 Al 含量增大呈现先上升后下降的非单调变化规律. 当 Al 掺杂量较低时, M_s 增大并在 $x = 0.25$ 处达到峰值; 而随着 Al 含量进一步增大 ($x > 0.25$), M_s 开始线性下降,

直至 Al 完全替代 Si 的 Co_2FeAl ($x = 1$) 降至最低值. 这是因为 Al 原子部分取代 Si 原子后, 材料中形成 L_{21}/B_2 两相共存结构. 界面区域的局部晶格畸变以及 Al 原子与 Fe/Co 的 p-d 轨道杂化效应协同增强了铁磁交换作用, 从而显著提升 M_s . 随着 Al 含量增大, B_2 结构逐渐占据主导地位, Fe/Al 原子的随机占位破坏了晶格的长程有序性从而导致交换作用弱化. 此外, Al 原子的弱成键能力加剧了原子占位无序化, 最终在 Co_2FeAl 中形成高度无序结构, 磁矩协同性大幅降低, 致使 M_s 减小. 值得注意的是, 对比图 5(a), (b) 的数据, M_s 随 Al 含量的变化趋势与饱和磁致伸缩系数 λ_s 的变化规律高度相似, 表明磁化强度与磁致伸缩行为之间存在强关联性, 其物理本质源于晶格与磁矩的共同调控作用. 同时也证明了 Al 的引入诱导的原子占位无序界面产生的磁畴结构变化影响了磁致伸缩性能.

3.4 $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$ 的线性磁致伸缩

一般铁磁性材料在磁场下表现为线性磁致伸缩, 样品在平行于磁场方向长度伸长时, 垂直磁场方向缩短, 总体积几乎保持不变 [29–31]. 本文中 $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$ 所有样品为电弧熔炼制备的立方晶系多晶材料, 由于多晶材料由大量随机取向的晶粒组成, 整体的磁致伸缩应变应该是各个晶粒应变的统计平均, 理论上各晶粒的各向异性应变会相互抵消, 导致宏观上各向同性. 因此认为, 如果多晶材料是各向同性的, 那么无论磁场方向如何旋转, 测量到的磁致伸缩应变应该与磁场方向无关, 即不随 θ 变化. 理论上来说, 立方晶系的 $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$ 多晶材料也应属于体积守恒的线性磁致伸缩, 但是

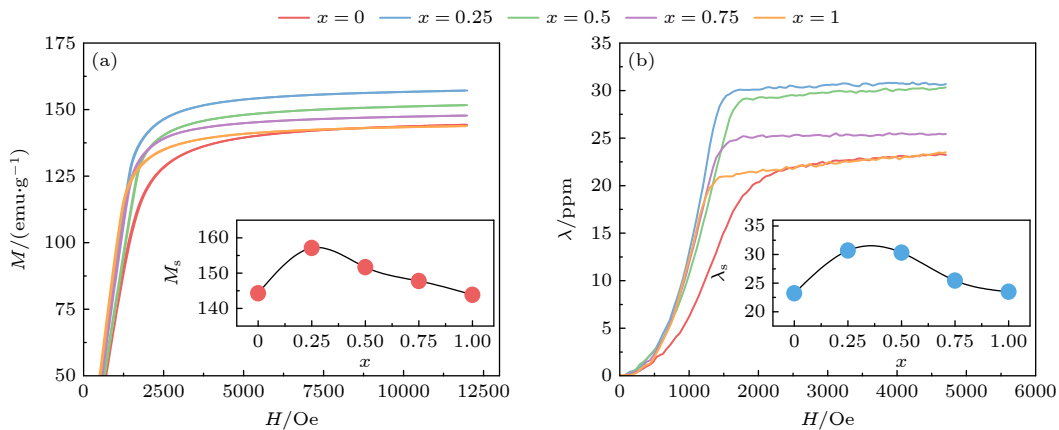


图 5 $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$ 的 (a) M - H 曲线与 (b) 磁致伸缩曲线

Fig. 5. (a) M - H and (b) magnetostriction of $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$.

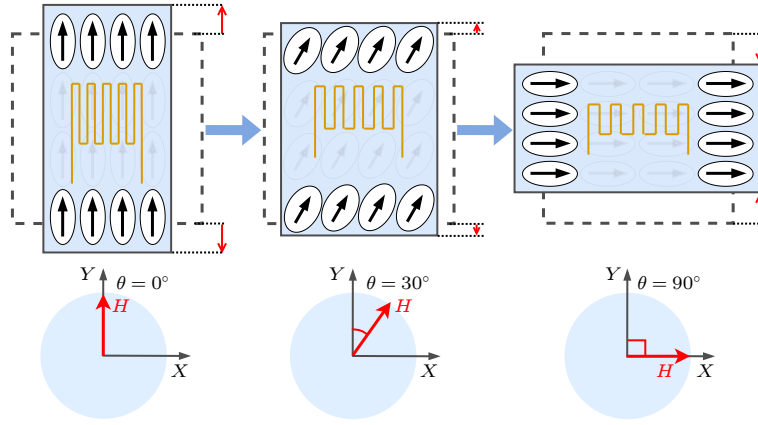


图 6 多晶材料转角磁致伸缩测量示意图

Fig. 6. Schematic diagram of the rotational magnetostriction measurement for polycrystalline materials.

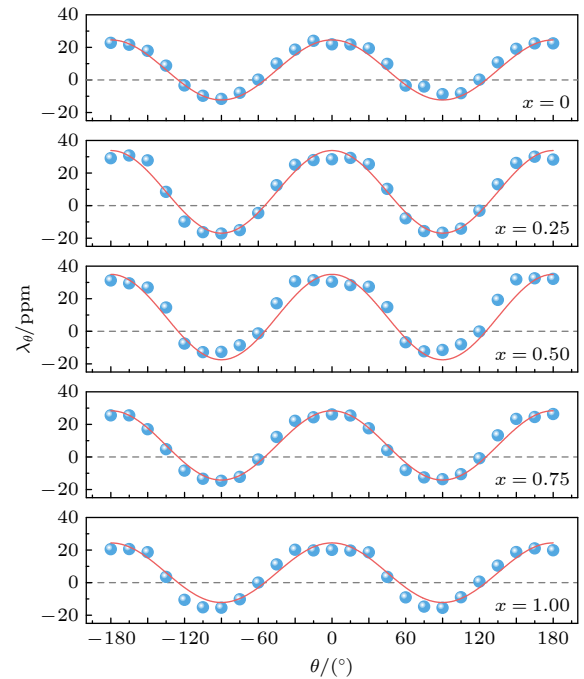
其不存在难易磁化轴上的角度依赖性, 因此可以说其磁致伸缩在不同角度的测量方向上存在分量, 如图 6 所示, 当磁场方向与测量方向相同时, 磁畴方向与测量方向平行, 此时磁致伸缩最大; 当磁场方向与测量方向呈 30° 时, 磁畴方向也与测量方向呈 30° , 此时应变在测量方向上的分量减小; 当磁场方向与测量方向呈 90° 时, 磁畴方向也与测量方向垂直, 此时应变在测量方向上的分量为负值. 其线性磁致伸缩变化规律如下式 [32]:

$$\lambda_\theta = \frac{3}{2}\lambda_s\left(\cos^2\theta - \frac{1}{3}\right), \quad (3)$$

其中, λ_s 为平行于磁场方向的磁致伸缩大小, θ 是磁场方向与应变测量方向的夹角, λ_θ 为与磁场成 θ 角度时产生的应变分量. $\theta = 0^\circ$ 和 $\theta = 180^\circ$ 时为沿磁场方向的应变 $\lambda_\theta = \lambda_s$, $\theta = 90^\circ$ 时结果为垂直于磁场方向的应变 $\lambda_\theta = -\lambda_s/2$.

由此将 $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$ ($x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$) 5 个退火后的样品进行转角磁致伸缩测量来验证材料的体积守恒. 实验上固定应变片的位置, 以 15° 为间隔旋转磁场方向, 得到面内 360° 范围内的磁致伸缩应变数据, 并用 (3) 式进行拟合. 结果得出拟合曲线与实验数据比较吻合, 如图 7 所示, 结合这两组数据不难发现, 样品的 λ_θ 随磁场偏转角度 θ 呈周期性变化, 变化周期为 180° , 这说明了多晶材料表现出与立方单晶类似的角度依赖性. 整体来看随着磁场偏转角度 θ 的增大, 应变 λ_θ 先从 λ_s 逐渐减小随后变为 $-\lambda_s/2$ 再增大至 λ_s , 当磁场方向与测量方向平行时, 也就是 $\theta = 0^\circ, \pm 180^\circ$, 达到曲线的峰值 λ_s , 材料沿测试方向伸长, 此时应变最大; 开始偏转角度后, 应变为 θ 方向上的分量; 基

于立方对称结构, 在 θ 达到约 54.7° 时应变为 0, 随后偏转角度继续增大, 磁致伸缩应变由测量方向上的伸长转为缩短, 此时 λ_θ 为负值, 从图 7 可以看出, $\theta = \pm 90^\circ$ 时 λ_θ 位于波谷位置, 最终当磁场方向与测量方向成 90° 时缩短量最大, 应变大概为 λ_s 的一半, 这说明了材料的应变并没有宏观上的体积变化或者体积变化趋近于零, 充分证明了 $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$ 在不同有序结构下的磁致伸缩应变均为体积守恒的线性磁致伸缩, 并且满足 $\lambda_{\text{total}} = 3\lambda_s/2$.

图 7 $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$ 的磁致伸缩应变 λ_θ 随 θ 的变化关系Fig. 7. Variation of magnetostriction λ with θ in $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$.

3.5 部分 Co 基 Heusler 多晶合金的饱和磁致伸缩系数总结

采用电弧熔炼的方法制备了 Co_2Fe -, Co_2V -, Co_2Cr -, Co_2Mn - 一共 12 种 Co 基 Heusler 合金的多晶并测量了它们的磁致伸缩值, 同时本文统计了这 12 种 Co 基 Heusler 合金的晶格常数, 居里温度与自旋极化率, 见表 1. 根据表 1 数据可以看出, Co 基 Heusler 合金的磁致伸缩普遍较小, 其中, Co_2MnGa 和 Co_2CrGa 相对于其他 Co 基 Heusler 合金饱和磁致伸缩系数最高, 分别有 45 ppm 和 42 ppm, 最低的 Co_2CrAl 和 Co_2MnSb 只有 8 ppm, 可以说几乎没有应变产生. 理论上来说, 具有半金属性的 Co 基 Heusler 合金自旋极化率 P 接近 100%, 但是由于实验上的原子占位无序或缺陷等影响, 实际测量得到的结果普遍在 50%—60% [33]. 另外, 本文所研究的 Co_2FeSi 与 Co_2FeAl 的居里温度最高, 通过成分调控以及原子有序度调控机制有望发现耐高温、高自旋极化率的新型磁致伸缩材料.

表 1 部分 Co 基 Heusler 合金的晶格常数 a , 居里温度 T_c , 自旋极化率 P [34–53] 与磁致伸缩系数 λ_s

Table 1. Lattice constant a , Curie temperature T_c , spin polarization P [34–53], and magnetostriction λ_s of selected co-based heusler alloys.

成分	$a/\text{\AA}$	T_c/K	$P/\%$	λ_s/ppm
Co_2FeSi	5.645	1100	57	22
Co_2FeAl	5.728	1170	58	21
Co_2FeGa	5.737	1056	59	24
Co_2VGa	5.792	357	75	13
Co_2CrAl	5.887	334	62	8
Co_2CrGa	5.765	495	61	42
Co_2MnAl	5.749	693	59	14
Co_2MnGa	5.767	694	55	45
Co_2MnSi	5.654	985	56	18
Co_2MnGe	5.749	905	58	25
Co_2MnSn	5.984	829	60	20
Co_2MnSb	5.943	600	50	8

4 结 论

本研究通过原子占位有序度调控, 深入解析了 $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$ ($x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$) 系列合金不同有序结构时其磁致伸缩性能的表现. Al 掺杂通过削弱 Si 与过渡金属的强 p-d 轨道杂化, 驱动体系从 $L2_1$ 有序向 $B2$ 无序转变. 当 $x = 0.25$ — 0.5 时, $L2_1/B2$ 两相共存界面态通过局域晶格畸变改

变磁畴各向异性, 使 λ_s 从 18 ppm 提高到 31 ppm. 这一结果突破了传统 Heusler 合金依赖马氏体相变的磁致伸缩增强机制. 完全 $B2$ 结构因原子占位过度混乱导致磁畴耦合减弱, λ_s 回落至 21 ppm, 证实了“适度无序”对性能优化的必要性. 转角磁致伸缩测量进一步验证了 $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$ 多晶的各向同性的线性正磁致伸缩应变规律. 此外, 本研究还首次报道了 12 种 Co 基 Heusler 合金的磁致伸缩系数, 填补了该体系除居里温度、自旋极化率外的另一个重要参数的空白. 本研究从原子尺度揭示了无序工程对磁致伸缩性能的调控机制, 为高性能磁致伸缩材料的设计提供了新的理论与实验依据.

参考文献

- [1] Gupta R, Husain S, Kumar A, Brucas R, Rydberg A, Svedlindh P 2021 *Adv. Opt. Mater.* **9** 2001987
- [2] Kimura T, Hashimoto N, Yamada S, Miyao M, Hamaya K 2012 *NPG Asia Mater.* **4** e13
- [3] Palmström C J 2016 *Prog. Cryst. Growth Ch. Mater.* **62** 371
- [4] Yamada S, Kato M, Ichikawa S, Yamada M, Naito T, Fujiwara Y, Hamaya K 2023 *Adv. Electron. Mater.* **9** 2300045
- [5] Bachaga T, Zhang J, Khitouni M, Sunol J J 2019 *Int. J. Adv. Manuf. Technol.* **103** 2761
- [6] Planes A, Mañosa L, Moya X, Krenke T, Acet M, Wassermann E F 2007 *J. Magn. Magn. Mater.* **310** 2767
- [7] de Groot R A, Mueller F M, Engen P G v, Buschow K H J 1983 *Phys. Rev. Lett.* **50** 2024
- [8] Galanakis I, Mavropoulos P, Dederichs P H 2006 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **39** 765
- [9] Wang W H, Sukegawa H, Shan R, Mitani S, Inomata K 2009 *Appl. Phys. Lett.* **95** 182502
- [10] Yang Y M, Li J, Ma H R, Yang G, Mao X J, Li C C 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 046101 (in Chinese) [杨艳敏, 李佳, 马洪然, 杨广, 毛秀娟, 李聪聪 2019 物理学报 **68** 046101]
- [11] Clark A E 1980 *Ferromagnetic Materials* (Vol. 1) (Amsterdam: North-Holland) p531
- [12] Clark A E, Restorff J B, Wun-Fogle M, Lograsso T A, Schlagel D L 2000 *IEEE Trans. Magn.* **36** 3238
- [13] Lograsso T A, Ross A R, Schlagel D L, Clark A E, Wun-Fogle M 2003 *J. Alloy. Compd.* **350** 95
- [14] Guruswamy S, Srisukhumbowornchai N, Clark A E, Restorff J B, Wun-Fogle M 2000 *Scr. Mater.* **43** 239
- [15] Sakon T, Fujimoto N, Kanomata T, Adachi Y 2017 *Metals* **7** 410
- [16] Ullakko K, Huang J K, Kantner C, O'Handley R C, Kokorin V V 1996 *Appl. Phys. Lett.* **69** 1966
- [17] Sato M, Okazaki T, Furuya Y, Wuttig M 2003 *Mater. Trans.* **44** 372
- [18] Zhang M, Brück E, Boer F R d, Wu G H 2005 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **38** 1361
- [19] Dai X F, Sun C G, Qu J P, Li Y X, Zhu W, Chen J L, Wu G H 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 8602 (in Chinese) [代学芳, 孙晨光, 曲静萍, 李养贤, 朱伟, 陈京兰, 吴光恒 2009 物理学报 **58** 8602]
- [20] Ravel B, Raphael M P, Harris V G, Huang Q 2002 *Phys. Rev. B* **65** 184431
- [21] Srivastava Y, Vajpai S K, Srivastava S 2017 *J. Magn. Magn.*

- Mater.* **433** 141
- [22] Zhao J J, Shu D, Qi X, Liu E K, Zhu W, Feng L, Wang W H, Wu G H 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 107203 (in Chinese) [赵晶晶, 舒迪, 祁欣, 刘恩克, 朱伟, 冯琳, 王文洪, 吴光恒 2011 物理学报 **60** 107203]
- [23] Chumak O, Nabiałek A, Baczewski L T, Seki T, Wang J, Takanashi K, Szymczak H 2025 arXiv: 2502.19102 [cond-mat.mtrl-sci]
- [24] Szwacki N G, Majewski J A 2016 *J. Magn. Magn. Mater.* **409** 62
- [25] Zhao J J, Qi X, Liu E K, Zhu W, Qian J F, Li G J, Wang W H, Wu G H 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 047108 (in Chinese) [赵晶晶, 祁欣, 刘恩克, 朱伟, 钱金凤, 李贵江, 王文洪, 吴光恒 2011 物理学报 **60** 047108]
- [26] Balke B, Wurmehl S, Fecher G H, Felser C, Kübler J 2008 *Sci. Technol. Adv. Mater.* **9** 014102
- [27] Titov A, Jiraskova Y, Zivotsky O, Bursik J, Janickovic D 2018 *AIP Adv.* **8** 047206
- [28] Bosu S, Sakuraba Y, Saito K, Wang H, Mitani S, Takanashi K 2010 *Phys. Rev. B* **81** 054426
- [29] Chopra H D, Wuttig M 2015 *Nature* **521** 340
- [30] He Y K, Han Y J, Stamenov P, Kundys B, Coey J M D, Jiang C B, Xu H B 2018 *Nature* **556** E5
- [31] He Y K, Jiang C B, Coey J M D, Xu H B 2018 *J. Magn. Magn. Mater.* **466** 351
- [32] Clark A E, Wun-Fogle M 2002 *Smart Structures and Materials 2002 Conference* San Diego, Ca, Mar 18–21, 2000 p421
- [33] Ksenofontov V, Wójcik M, Wurmehl S, Schneider H, Balke B, Jakob G, Felser C 2010 *J. Appl. Phys.* **107** 09B106
- [34] Brown P J, Neumann K U, Webster P J, Ziebeck K R A 2000 *J. Phys. -Condes. Matter* **12** 1827
- [35] Buschow K H J, Vanengen P G 1981 *J. Magn. Magn. Mater.* **25** 90
- [36] Buschow K H J, Vanengen P G, Jongebreur R 1983 *J. Magn. Magn. Mater.* **38** 1
- [37] Guillemard C, Petit-Watelot S, Rojas-Sánchez J C, et al. 2019 *Appl. Phys. Lett.* **115** 172401
- [38] Kanomata T, Chieda Y, Endo K, et al. 2010 *Phys. Rev. B* **82** 144415
- [39] Karthik S V, Rajanikanth A, Takahashi Y K, Okhubo T, Hono K 2006 *Appl. Phys. Lett.* **89** 3
- [40] Kourov N I, Marchenkov V V, Perevozchikova Y A, Weber H W 2017 *Phys. Solid State* **59** 898
- [41] Kudryavtsev Y V, Uvarov N V, Iermolenko V N, Dubowik J 2010 *J. Appl. Phys.* **108** 113708
- [42] Nakatani T M, Gercsi Z, Rajanikanth A, Takahashi Y K, Hono K 2008 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **41** 225002
- [43] Nakatani T M, Rajanikanth A, Gercsi Z, Takahashi Y K, Inomata K, Hono K 2007 *J. Appl. Phys.* **102** 8
- [44] Paudel M R, Wolfe C S, Pathak A K, Dubenko I, Ali N, Osofsky M S, Prestigiacomo J C, Stadler S 2012 *J. Appl. Phys.* **111** 023903
- [45] Paudel M R, Wolfe C S, Patton H, Dubenko I, Ali N, Christodoulides J A, Stadler S 2009 *J. Appl. Phys.* **105** 4
- [46] Rajanikanth A, Takahashi Y K, Hono K 2007 *J. Appl. Phys.* **101** 5
- [47] Rajanikanth A, Takahashi Y K, Hono K 2008 *J. Appl. Phys.* **103** 5
- [48] Ritchie L, Xiao G, Ji Y, et al. 2003 *Phys. Rev. B* **68** 104430
- [49] Sakuraba Y, Nakata J, Oogane M, Ando Y, Kato H, Sakuma A, Miyazaki T, Kubota H 2006 *Appl. Phys. Lett.* **88** 3
- [50] Umetsu R Y, Kobayashi K, Fujita A, Kainuma R, Ishida K, Fukamichi K, Sakuma A 2008 *Phys. Rev. B* **77** 104422
- [51] Wurmehl S, Fecher G H, Ksenofontov V, Casper F, Stumm U, Felser C, Lin H J, Hwu Y 2006 *J. Appl. Phys.* **99** 3
- [52] Zhang M, Brück E, Boer F R d, Li Z Z, Wu G H 2004 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **37** 2049
- [53] Zhang X Q, Xu H F, Lai B L, et al. 2018 *Sci. Rep.* **8** 8074

Control of cross-scale structural order of Heusler alloy $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$ and its influence on magnetostrictive properties*

YAO Liang¹⁾²⁾ LU Guanghui¹⁾²⁾ DU Jie¹⁾ LAU Yongchang²⁾³⁾

XI Xuekui^{2)†} WANG Wenhong^{1)‡}

1) (School of Electronics and Information Engineering, Tiangong University, Tianjin 300387, China)

2) (Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

3) (University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

(Received 18 March 2025; revised manuscript received 30 April 2025)

Abstract

Co-based Heusler alloys have emerged as highly promising systems within the Heusler alloy family due to their high Curie temperatures and potential half-metallicity. Since the concept of half-metallic ferromagnets is

* Project supported by the National Key Research and Development Program of China (Grant Nos. 2021YFB3501402, 2024YFF0726703) and the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 12274321, 12361141823).

† Corresponding author. E-mail: xi@iphy.ac.cn

‡ Corresponding author. E-mail: wenhongwang@tiangong.edu.cn

proposed, these alloys have attracted significant attention because of their high spin polarization, excellent magnetic performance, and thermal stability. The existing studies predominantly focus on spin-transport properties, but systematic studies on their magnetostriction remain scarce. The electronic structure and magnetism of Co-based Heusler alloys are critically dependent on atomic-site ordering: their spin polarization, Curie temperature, and magnetocrystalline anisotropy are closely related to crystal structure, such as $L2_1$ and $B2$. A highly ordered $L2_1$ structure is essential for maintaining half-metallicity, as structural disorder can induce significant changes in electronic hybridization and exchange interactions, thereby significantly changing macroscopic magnetism. Additionally, ordering control is also expected to modulate magnetostriction by modifying lattice symmetry and local distortions. Notably, in Fe-Ga alloys, disorder engineering has been employed to induce local short-range order and lattice distortion, thereby enhancing magnetostriction, a mechanism that may similarly operate in Co-based systems. However, the higher lattice symmetry and stronger orbital hybridization in these alloys can lead to fundamentally distinct mechanisms, which needs to be validated experimentally. This study focuses on the $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$ system to systematically probe the relationship between composition-driven structural evolution (i.e., $L2_1$ to $B2$ transition) and magnetostrictive performance through adjusting Al/Si ratio. The study aims to clarify the correlation between composition-induced structural evolution and magnetostrictive behavior, thereby revealing the regulatory role of atomic ordering in magnetoelastic coupling and providing theoretical insight for designing high-performance magnetostrictive materials.

The correlation between atomic site ordering and magnetostriction in Heusler alloy $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$ ($x = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$) is systematically investigated in experiment. The results reveal that Al doping drives a structural transition from the highly ordered $L2_1$ phase to the disordered $B2$ phase, inducing a coexisting $L2_1/B2$ interface state at $x = 0.25-0.5$, with the calculated ordering parameters S_{L2_1}/S_{B2} ranging from 0.5 to 0.9. The experimental data demonstrate that this interface state significantly enhances the saturation magnetostriction coefficient (λ_s), which subsequently decreases as it further transitions to the $B2$ -dominated structure. These findings quantitatively clarify the physical mechanism by which local atomic disorder enhances magnetoelastic coupling through reducing cubic symmetry, localizing lattice distortion, and changing magnetic domain configuration. Furthermore, this study reports for the first time the magnetostriction coefficients of 12 Co-based Heusler alloys, among which Co_2MnGa and Co_2CrGa exhibit superior potential compared with other Co based Heusler alloys, filling the gap in magnetostriction performance parameters of this system. The linear positive magnetostriction behaviors of the polycrystalline materials are also validated. This study provides a strategy for optimizing magnetostriction performance through atomic site ordering control, and points out a new direction for the development of magnetostrictive materials with high-temperature stability and high spin polarization.

Keywords: co-based Heusler alloy, atomic ordering, structural phase transition, magnetostriction

PACS: 73.61.At, 64.60.Cn, 75.80.+q

DOI: [10.7498/aps.74.20250358](https://doi.org/10.7498/aps.74.20250358)

CSTR: [32037.14.aps.74.20250358](https://cstr.cn/32037.14.aps.74.20250358)

Heusler合金 $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$ 跨尺度结构有序度调控及其对磁致伸缩性能的影响

姚亮 芦光辉 杜杰 刘永昌 郝学奎 王文洪

Control of cross-scale structural order of Heusler alloy $\text{Co}_2\text{FeAl}_x\text{Si}_{1-x}$ and its influence on magnetostrictive properties

YAO Liang LU Guanghui DU Jie LAU Yongchang XI Xuekui WANG Wenhong

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 147303 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20250358
CSTR: 32037.14.aps.74.20250358

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250358>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

缺陷对铁单质薄膜磁致伸缩与磁矩演化的影响

Effect of defects on magnetostriction and magnetic moment evolution of iron thin films

物理学报. 2022, 71(1): 017502 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211177>

毫秒时间分辨同步辐射X射线衍射和高压快速加载装置及应用

Millisecond time-resolved synchrotron radiation X-ray diffraction and high-pressure rapid compression device and its application

物理学报. 2022, 71(10): 100702 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212360>

基于离子阱中离子晶体的热传导的研究进展

Research progress of heat transport in trapped-ion crystals

物理学报. 2024, 73(3): 033701 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231719>

Ni_2Cu 基Heusler合金的电子结构、弹性参数与马氏体相变的第一性原理研究

First principles study of electronic structure, mechanical properties and possible martensitic transformation in Ni_2Cu -based Heusler alloys

物理学报. 2025, 74(4): 047101 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20241485>

$\text{Sc}_x\text{Y}_{1-x}\text{Fe}_2$ 合金固溶和 $\text{V}_{2x}\text{Fe}_{2(1-x)}\text{Zr}$ 有序-无序转变的理论预测

Theoretical prediction of solution in $\text{Sc}_x\text{Y}_{1-x}\text{Fe}_2$ and order-disorder transitions in $\text{V}_{2x}\text{Fe}_{2(1-x)}\text{Zr}$

物理学报. 2021, 70(21): 213601 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210998>

结构相变引起单层 RuSe_2 载流子迁移率的提高

Structural phase transition induced enhancement of carrier mobility of monolayer RuSe_2

物理学报. 2024, 73(14): 146302 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240557>