

新型稳定 SmCo_{12} 结构预测和磁性*戴渝东 刘译聪 李振庆 杨志雄[†] 张卫兵[‡]

(长沙理工大学物理与电子科学学院, 柔性电子材料基因工程湖南省重点实验室, 长沙 410004)

(2025 年 3 月 26 日收到; 2025 年 6 月 11 日收到修改稿)

SmCo_{12} 磁能积大, 是当前备受关注的一种极具应用潜力的高温永磁体, 但该体系普遍存在的 ThMn_{12} 型晶体结构面临严峻的稳定性挑战, 严重制约其实际工程应用. 探索兼具稳定性和优良磁性能的 SmCo_{12} 新结构是突破这一瓶颈的关键. 本文采用局域粒子群优化算法结合第一性原理计算, 系统探索了 SmCo_{12} 体系的亚稳相. 理论计算发现了一种六方相结构 (空间群 $P\bar{3}1m$), 其形成能较传统 ThMn_{12} 型 SmCo_{12} 低 90 meV/atom. 声子谱和分子动力学模拟也证实其具有动力学和热力学稳定性. 此外, 理论预测六方相 SmCo_{12} 结构表现出非常优异的磁性能, 最大磁能积、各向异性场, 以及居里温度可达 54.56 MGOe (1 GOe = 7.9577×10^{-3} J/m³), 15.01 MA/m 和 1180 K. 本文新发现的六方相 SmCo_{12} 为解决 ThMn_{12} 型结构的稳定性难题提供了新方向.

关键词: 结构预测, 第一性原理计算, 高居里温度, 稀土永磁体**PACS:** 61.50.Ah, 71.15.Mb, 75.30.Kz, 75.50.Cc**DOI:** 10.7498/aps.74.20250389**CSTR:** 32037.14.aps.74.20250389

1 引言

SmCo 永磁体因具有优异的高温稳定性, 在军工装备、航空航天及轨道交通等极端工况领域具有不可替代的战略地位. 目前商业化稀土永磁材料主要涵盖 NdFeB , SmCo 和 SmFeN 三大体系. 其中 NdFeB 永磁体具有最高的理论最大磁能积 ($(\text{BH})_{\text{max}}$) (可达 64 MGOe (1 GOe = 7.9577×10^{-3} J/m³)), 但其居里温度 (Curie temperature, T_C) 相对较低 (约 585 K), 通常需在 220 °C 以下使用以确保磁性能稳定性^[1]. 由于 Fe, N 来源丰富, 新型 SmFeN 永磁体具有成本优势, 但受限于制备工艺和黏结剂, 其实际性能尚未达到理论预期^[2]. SmCo 永磁体在高温应用场景展现独特优势, 常规工作温度可达 350 °C 以上, 高温型产品甚至可在

500 °C 环境下保持稳定磁性能^[3-5]. 此外, 该材料本征抗氧化强, 无需额外表面处理即可满足严苛环境服役要求^[6].

虽然传统 SmCo 永磁体在商业化应用已取得成功, 但高磁能积的新型 SmCo 永磁体仍持续受到关注. SmCo 永磁体系列存在 SmCo_5 (1:5 型)、 $\text{Sm}_2\text{Co}_{17}$ (2:17 型) 和 SmCo_{12} (1:12 型) 等多种合金相, 其中商业化应用的 SmCo_5 和 $\text{Sm}_2\text{Co}_{17}$ 型磁体典型 $(\text{BH})_{\text{max}}$ 分别为 24 MGOe 和 35 MGOe^[7], 仅为 NdFeB 永磁体的 40%—60%. 研究表明, SmCo 永磁体的磁能积与居里温度均与 Co 含量呈现正相关性^[8]. SmCo_{12} 永磁体中 Co 含量高, 理论上具有比传统 SmCo_5 和 $\text{Sm}_2\text{Co}_{17}$ 更好的磁体性能, 展现出显著的开发潜力.

1981 年, Yang 等^[9,10] 首次成功合成了具有 ThMn_{12} 型结构的三元稀土化合物 ($\text{Y}(\text{Fe}_{1-x}\text{Mn}_x)_{12}$),

* 国家自然科学基金 (批准号: 11874092)、霍英东教育基金会第十六届高等院校青年教师基金 (批准号: 161005) 和湖南省杰出青年科学基金 (批准号: 2021JJ10039) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: clyzx@csust.edu.cn

[‡] 通信作者. E-mail: zhangwb@csust.edu.cn

通过掺杂改变合金的电子组态和磁性离子间的相互作用, 从而改变磁性. 同为稀土过渡金属化合物的 SmCo_{12} 合金通常被认为具有 ThMn_{12} 型的结构, 但该结构稳定性差, 严重制约其实际工程应用, 改善 ThMn_{12} 型结构的稳定性是目前研究 SmCo_{12} 合金的重点问题. 研究表明, ThMn_{12} 型结构属于热力学亚稳相, ThMn_{12} 型 SmCo_{12} 块体材料在室温下难以稳定存在^[11,12]. 现有研究主要通过两种策略改善其稳定性: 1) 引入 Ti, V, Mo 等非磁性稳定元素; 2) 实施稀土位点元素取代. 然而, 此类方法常引发显著的磁性能衰减, 例如 Ti 掺杂虽可使结构稳定性提升^[13], 却导致饱和磁化强度 (M_s) 降低 15% 以上, 严重削弱材料优势. 2017 年, Hirayama 等^[14] 通过 Co 元素替代 8f, 8i, 8j 点位掺杂 SmFe_{12} 制备出 ThMn_{12} 型 $\text{Sm}(\text{Fe}, \text{Co})_{12}$ 合金, 其本征磁性能参数 (各向异性场 $H_a = 12 \text{ T}$, $M_s = 1.78 \text{ T}$, $T_C = 859 \text{ K}$) 已超越商用 NdFeB 磁体. 但该合金的 T_C 仍显著低于第一性原理计算预测的 SmCo_{12} 理论值 (1300 K ^[15]), 也与本团队基于机器学习模型预测的 SmCo_{12} 体系 T_C (1100 K ^[16]) 存在 241 K 差距. 这些矛盾指明寻找兼具稳定性和优良磁性能的 SmCo_{12} 晶体结构是突破其发展瓶颈的一个重要方向.

鉴于此, 本文采用晶体结构局域粒子群优化 (particle swarm optimization, PSO) 算法结合第一性原理计算, 系统探索 SmCo_{12} 的亚稳相及其磁学特性. 研究框架包含 4 个阶段: 1) 基于 PSO 算法, 在全空间群范围内进行 SmCo_{12} 晶体结构预测, 通过单原子焓值和晶体对称性双重判据, 筛选出包括 ThMn_{12} 型 ($I4/mmm$) 在内的四种候选结构; 2) 依据形成能 (E_{form})、声子谱以及分子动力学模拟, 验证六方相 SmCo_{12} ($P\bar{3}1m$) 在高温下兼具动力学与热力学稳定性; 3) 基于自旋极化密度泛函理论 (SP-DFT) 的电子结构计算, 分析了六方相 SmCo_{12} 电子特性与磁性起源; 4) 对比饱和磁化强度 M_s 、最大磁能积 $(\text{BH})_{\text{max}}$ 、各向异性场及居里温度 T_C 等关键参数, 确定六方相 SmCo_{12} 在磁性能方面展现独特优势.

2 计算方法

2.1 晶体结构预测

本文采用基于 PSO 算法的 CALYPSO 软件包^[17,18] 和结合基于密度泛函理论的第一性原理计

算软件包 VASP (Vienna ab initio simulation package)^[19–21] 预测 SmCo_{12} 结构. 设定晶胞大小包含 1—4 分子式, 预定最大代数为 50. 在 230 个空间群内生成对称约束的随机结构, 并使用 VASP 进行局域优化, 每代生成 40 个结构, 其中 60% 的结构通过 PSO 算法产生, 剩余 40% 的结构在对称约束内随机产生, 以增强结构多样性.

2.2 第一性原理计算

平面波密度泛函. 本文使用 VASP 软件包预测晶体结构优化、形成能、体积模量、声子谱和第一性原理分子动力学等. VASP 代码采用了 PBE (Perdew, Becke 和 Ernzerhof) 形式的交换关联泛函和缀加投影波 (PAW) 方法^[22], 并通过平面波基组^[23] 展开电子波函数. 经过收敛测试, 基组截断能定为 400 eV , 并采用 Monkhorst-Pack 网格生成 $10 \times 10 \times 5$ 的 k 点网格用于布里渊区积分. 对所有晶格常数和原子坐标进行优化, 直到每个原子上的最大受力小于 $5 \times 10^{-3} \text{ eV/\AA}$. 因 4f-3d 相互作用主要影响 SmCo 体系的磁晶各向异性^[24], 考虑计算精度与计算量的平衡, 本文在结构优化、形成能、声子谱以及分子动力学模拟计算中采用将 Sm 原子 4f 电子视为芯电子的 Sm-3 赝势.

本文使用基于有限位移法的 Phonopy 代码^[25] 计算声子谱, 采用 $3 \times 3 \times 3$ 超胞. 第一性原理分子动力学模拟^[21] 在 1200 K 温度下采用了正则系综下 (NVT) 的 Nosé 热浴法控制温度, 时间步长设为 3 fs , 持续时间 13 ps .

赝原子轨道线性组合. 本文使用 OpenMX (open source package for material eXplorer)^[26] 计算原子磁矩与磁各向异性, 以及通过磁力定理^[27] 计算不同原子位置 (i 和 j) 之间的海森伯交换参数 (J_{ij}). OpenMX 同样是基于密度泛函理论框架的第一性原理计算软件, 不同的是, OpenMX 主要采用赝原子局域轨道基组, 该基组的优势在于使其可以计算更大的体系^[28]. 此前 Gong 等^[29] 计算了多原子 NdFeB 体系的磁交换耦合常数, 与实验结果符合较好. 本文参考其中的计算方法, 对 Sm 使用了 Open Core (OC) 赝势, 该赝势通过校正电荷模拟真实 4f 电子态的电荷分布, 计算结果能与 DFT+U 方法的结果相吻合^[28]. Sm 与 Co 原子都使用 s2p2d2 基组, 赝原子轨道径向截断分别为 8.0 和 6.0 原子单位 (Bohr). 采用 $10 \times 10 \times 5$ 的 k 点网格

和 500 Ry 的截断能量, 自洽计算的收敛标准设为 1×10^{-6} Hartree ($1 \text{ Hartree} = 110.5 \times 10^{-21} \text{ J}$).

2.3 Monte-Carlo 模拟

本文基于 Heisenberg 模型^[30,31], 用 VAMPIRE 软件包^[30] 与 Monte-Carlo Metropolis 方法^[32] 完成 SmCo_{12} 块体磁化强度随温度变化的模拟. Heisenberg 中 SmCo_{12} 的自旋哈密顿量如 (1) 式所示:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -\frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^{i,j \in \text{Co}} J_{ij}^{\text{Co-Co}} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - \frac{1}{2} \sum_{i \in \text{Co}}^{j \in \text{Sm}} J_{ij}^{\text{Sm-Co}} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j \\ & - \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^{i,j \in \text{Sm}} J_{ij}^{\text{Sm-Sm}} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - \sum_{i \in \text{Co}} k_i^{\text{Co}} (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{e}^z)^2 \\ & - \sum_{i \in \text{Sm}} k_i^{\text{Sm}} (\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{e}^z)^2, \end{aligned} \quad (1)$$

其中 $\mathbf{s}_{i,j}$ 是表示局域自旋矩矢, 前 3 项分别对应于 Co-Co, Sm-Co, Sm-Sm 原子对海森伯交换能, 而第 4 和第 5 项表示 Co 和 Sm 原子的单轴磁各向异性能. $k_i^{\text{Sm}(\text{Co})}$ 是每个原子的各向异性能量, $\mathbf{e}^z$ 是 z 方向单位矢量. 使用了 $10 \times 10 \times 10$ 的三维块体超胞进行 Monte-Carlo 模拟, 并采用周期性边界条件以消除边界效应. 在每个温度下进行 10000 次

Monte-Carlo 步模拟, 直到系统到达平衡状态.

3 结果与讨论

3.1 结构和稳定性

CALYPSO 程序在 SmCo_{12} 体系执行全局结构搜索过程中于第 10 代之后再无新亚稳相结构产生, 达到收敛状态, 实际共完成 18 代搜索, 生成了 720 个结构, 得到 124 个亚稳相结构. 通过结构对称性分析, 首先排除过渡态结构 ($P-1$) 及对称性低于四方晶系 (空间群号 < 75) 的构型. 在符合要求的结构中成功预测了 ThMn_{12} 型结构 (空间群 $I4/mmm$, No.139), 证实了方法的有效性. 鉴于单原子焓值在评估稀土过渡金属化合物热力学稳定性方面的重要作用^[33], 本文以局域优化后 ThMn_{12} 型 SmCo_{12} 的单原子焓值 (-6.67 eV/atom) 为基准, 设定 0.15 eV/atom 的能量阈值筛选具有热力学竞争优势的结构, 最终确定四个候选晶体结构 (如图 1 所示). 其所属空间群分别为: $P4mm$ (No.99)、 $I4/mmm$ (No.139)、 $P4/mmm$ (No.123) 和 $P\bar{3}1m$ (No.162). 表 1 列出了各结构的单原子焓、Wyckoff 占位参数及所属晶系. 值得注意的是,

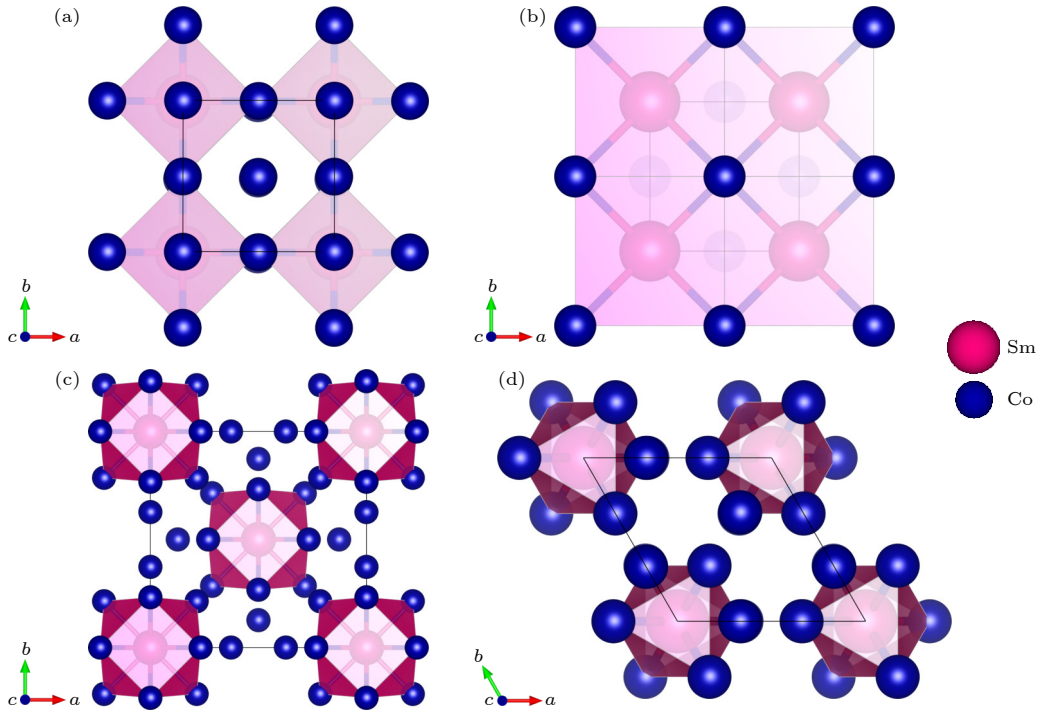


图 1 SmCo_{12} 四种候选晶体结构示意图, 红色为 Sm 原子, 蓝色为 Co 原子 (a) $P4mm$ (No.99); (b) $P4/mmm$ (No.123); (c) ThMn_{12} 型 $I4/mmm$ (No.139); (d) $P\bar{3}1m$ (No.162)

Fig. 1. Four candidate crystal structures of SmCo_{12} , red represents Sm atom, blue represents Co atom: (a) $P4mm$ (No.99); (b) $P4/mmm$ (No.123); (c) ThMn_{12} -type $I4/mmm$ (No.139); (d) $P\bar{3}1m$ (No.162).

表 1 候选 SmCo_{12} 结构的空群、焓值、晶胞参数和晶系

Table 1. The candidate SmCo_{12} structures including their space groups, enthalpy values, unit cell parameters, and crystal systems.

Space Group	Enthalpy/(eV·atom ⁻¹)	Lattice parameters/Å	Wyckoff position	Crystal system
$P4mm$ (No.99)	-6.52	$a = b = 4.00, c = 10.65$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Sm: $1a$ Co: $1a_i; 1b_i; 2c_i$ ($i = 1, 2, 3$)	Tetragonal
$I4/mmm$ (No.139)	-6.67	$a = b = 8.89, c = 4.087$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Sm: $2a$ Co: $8f; 8i; 8j$	Tetragonal
$P\bar{3}1m$ (No.162)	-6.76	$a = b = 4.20, c = 10.93$ $\alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$	Sm: $1b$ Co: $6k_1; 6k_2$	Hexagonal
$P4/mmm$ (No.123)	-6.79	$a = b = 3.54, c = 12.13$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	Sm: $1a$ Co: $2h_i$ ($i = 1, 2$); $4i; 2h; 2e$	Tetragonal

$P4/mmm$ (No.123) 和 $P\bar{3}1m$ (No.162) 两个结构的单原子焓分别较 ThMn_{12} 型结构降低 0.12 eV 和 0.09 eV, 展现出更佳的热力学稳定性.

为确定 4 种候选结构的平衡态晶格常数, 本文计算了不同晶胞体积下的总能值并将其归一化到单个分子式, 绘制能量-体积散点数据 (图 2). 固体能量与体积满足 Birch-Murnaghan 状态方程 (EOS)[34]:

$$E(V) = E_0 + \frac{9V_0B_0}{16} \left\{ \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3} - 1 \right]^3 B'_0 + \left[\left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3} - 1 \right]^2 \left[6 - 4 \left(\frac{V_0}{V} \right)^{2/3} \right] \right\}, \quad (2)$$

其中, V_0 是平衡体积, E_0 是平衡态的能量, B_0 是体积模量, B'_0 是压力导数. 基于 Birch-Murnaghan 状态方程对能量-体积曲线进行最小二乘拟合, 得到各结构平衡晶格常数 (表 1)、平衡体积和体积模量 (表 2). 4 个结构的体积模量分布在 110—150 GPa 区间, 该数值范围符合典型稀土永磁材料的力学特性. ThMn_{12} 型 SmCo_{12} 的体积模量为 145.5 GPa, 与文献 [35] 中的结果 (140.5 GPa) 相符. 四方相

($P4/mmm$) 和六方相 ($P\bar{3}1m$) 的体积模量分别为 131.99 GPa 和 154.33 GPa, 大于商用 NdFeB 永磁体的体积模量 (110 GPa)[36], 展现出优异的弹性力学性能.

表 2 候选 SmCo_{12} 结构的空群、平衡状态下的体积、形成能及体积模量

Table 2. The candidate SmCo_{12} structures include their space groups, equilibrium volumes, formation energies, and bulk modulus.

Space group	Volume /Å ³	Formation energy (meV/atom)			Bulk module /GPa
		E_{form}	$E_{\text{form}}^{\text{SmCo}_5}$	$E_{\text{form}}^{\text{Sm}_2\text{Co}_{17}}$	
$P4mm$ (No.99)	173.22	0	63	67	111.00
$I4/mmm$ (No.139)	323.12	-47	16	21	145.50
$P\bar{3}1m$ (No.162)	172.16	-137	-74	-69	131.99
$P4/mmm$ (No.123)	161.37	-167	-104	-99	154.33

在确定平衡态晶格常数基础上, 本文计算了 4 种候选结构的形成能进一步评估其热力学稳定性. 归一化形成能 E_{form} 的定义如下:

$$E_{\text{form}} = \frac{E(\text{Sm}_m\text{Co}_n) - m \cdot E(\text{Sm}) - n \cdot E(\text{Co})}{m + n}, \quad (3)$$

其中 m 和 n 分别为晶胞中 Sm 和 Co 原子数, $E(\text{Sm}_m\text{Co}_n)$ 是单个晶胞能量, $E(\text{Sm})$ 和 $E(\text{Co})$ 分别对应单质 α -Sm 和 α -Co 中的单原子基态能量. SmCo_{12} 体系形成能如表 2 所列, 各结构排序为: $P4mm$ (0 meV) > $I4/mmm$ (-47 meV) > $P\bar{3}1m$ (-137 meV) > $P4/mmm$ (-167 meV). 四方相 ($P4/mmm$) 和六方相 ($P\bar{3}1m$) 的形成能较 ThMn_{12} 型结构分别降低 120 meV/atom 和 90 meV/atom, 展示更优异的热力学稳定性.

依据实验上已制备的 SmCo 合金, 计算得到图 3 所示的凸包 (convex hull) 图. 二元 Sm_mCo_n 合金体系中形成能最低为 $\text{Th}_2\text{Zn}_{17}$ 型 $\text{Sm}_2\text{Co}_{17}$ 结构,

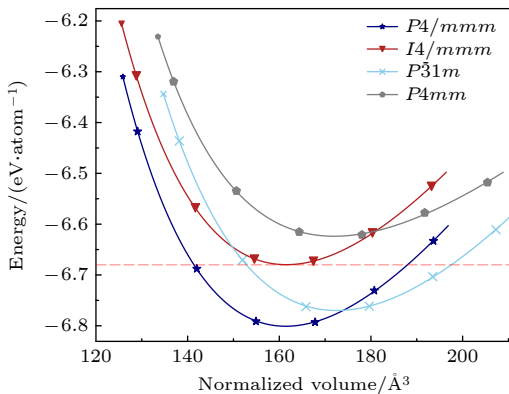


图 2 候选 SmCo_{12} 结构能量随体积变化曲线

Fig. 2. Energy-volume curve of candidate SmCo_{12} structures.

与此前 SmCo 合金相稳定性研究结果吻合 [37,38]. ThMn_{12} 型 SmCo_{12} 位于凸包线上方, 属于热力学亚稳相, 也与此前的研究一致 [14]. $P4/mmm$ 和 $P\bar{3}1m$ 相虽然也位于凸包线上方, 但两种结构比 ThMn_{12} 型结构更接近凸包线, 进一步说明它们在热力学稳定性上的优势.

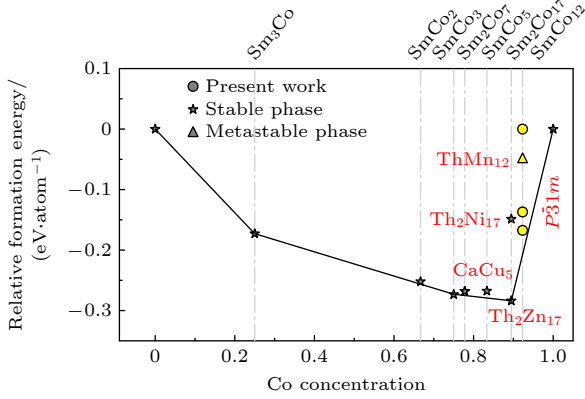


图 3 二元 Sm_mCo_n 合金形成能及凸包图, 结构搜索候选结构标记为圆点, 稳定结构标记为星号, 亚稳态结构标记为三角形

Fig. 3. Formation energy and convex hull of binary Sm_mCo_n alloys, candidate structures from structural search are marked as circles, stable structures as stars, and metastable structures as triangles.

为确定候选结构分解为两种常见钐钴合金 (SmCo_5 与 $\text{Sm}_2\text{Co}_{17}$) 的趋势 [37], 通过 (4) 式和 (5) 式计算了以 SmCo_5 和 $\text{Sm}_2\text{Co}_{17}$ 作为参考相的形成能:

$$E_{\text{form}}^{\text{SmCo}_5} = (E_{(\text{SmCo}_{12})} - E_{(\text{SmCo}_5)} - 7E_{(\text{Co})}) / 13, \quad (4)$$

$$E_{\text{form}}^{\text{Sm}_2\text{Co}_{17}} = (2E_{(\text{SmCo}_{12})} - E_{(\text{Sm}_2\text{Co}_{17})} - 7E_{(\text{Co})}) / 26, \quad (5)$$

其中 $E_{(\text{SmCo}_5)}$ 和 $E_{(\text{Sm}_2\text{Co}_{17})}$ 分别为结构最稳定的 CaCu_5 型 SmCo_5 和 $\text{Th}_2\text{Zn}_{17}$ 型 $\text{Sm}_2\text{Co}_{17}$ 的每分子式基态能量. 计算结果如表 2 所示, $P4/mmm$ 和 $P\bar{3}1m$ 相的 $E_{\text{form}}^{\text{SmCo}_5}$ 与 $E_{\text{form}}^{\text{Sm}_2\text{Co}_{17}}$ 为负, 表明它们没有分解为 SmCo_5 与 $\text{Sm}_2\text{Co}_{17}$ 的热力学趋势. 需要说明的是, 形成能仅表示分解前后的能量变化, 综合考虑动力学因素以及环境条件, 热力学亚稳相仍可由实验制备, 例如凸包图中的 $\text{Th}_2\text{Ni}_{17}$ 型的 $\text{Sm}_2\text{Co}_{17}$.

本文计算了 4 种结构的声子谱以分析其动力学稳定性差异, 其结果如图 4 所示. 四方相 ($P4mm$ 与 $P4/mmm$) 及 ThMn_{12} 型结构在整个布里渊区出现大量虚频模式, 表明 3 种结构动力学不稳定. 六方相 ($P\bar{3}1m$) 的声子谱 (图 4(d)) 在整个布里渊区无虚频, 证明了其在动力学层面的稳定性. 在 Γ 点附近存在少许虚频模式影响较小, 可能只是数值计算中的微小误差或边界条件导致的.

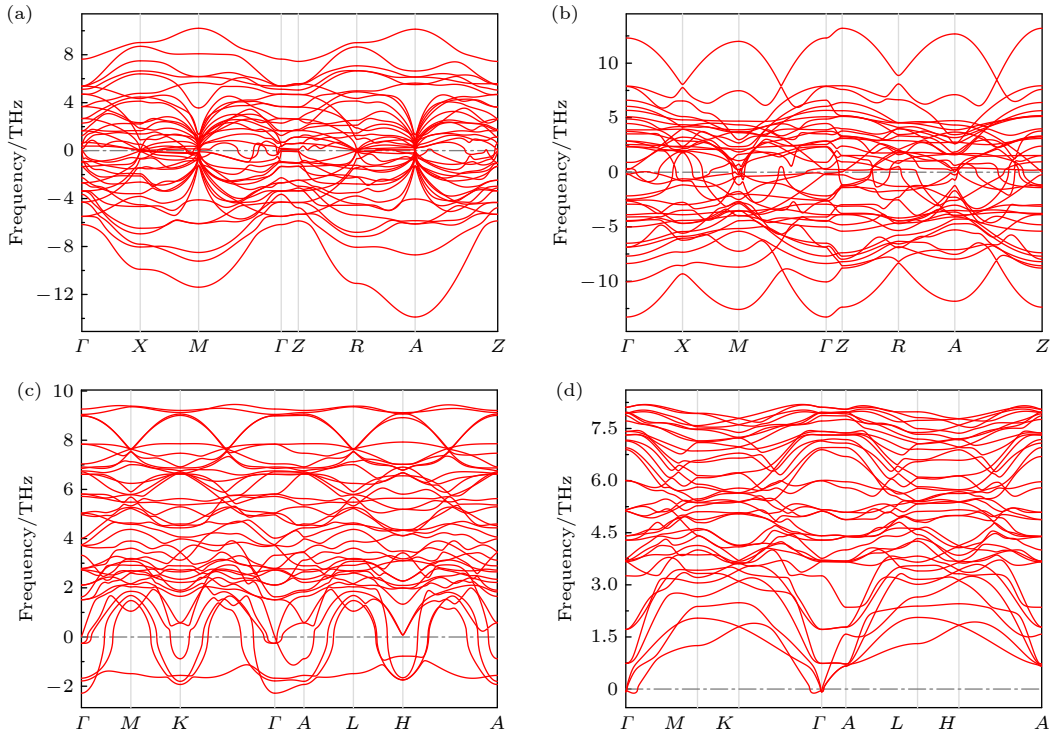


图 4 候选 SmCo_{12} 结构声子谱 (a) $P4mm$ (No.99); (b) $P4/mmm$ (No.123); (c) ThMn_{12} 型 $I4/mmm$ (No.139); (d) $P\bar{3}1m$ (No.162)

Fig. 4. The phonon dispersion of candidate SmCo_{12} structures: (a) $P4mm$ (No.99); (b) $P4/mmm$ (No.123); (c) ThMn_{12} -type $I4/mmm$ (No.139); (d) $P\bar{3}1m$ (No.162).

第一性原理分子动力学模拟显示, 六方相 ($P\bar{3}1m$) 在 1200 K 恒温条件下经 13 ps 弛豫后仍保持完整晶格框架 (图 5(a)), 未出现原子扩散特征. 在 3 ps 预平衡后能量变化如图 5(b) 所示, 势能波动标准差仅 5.7 meV/atom, 证实该相在高温下兼具动力学与热力学稳定性. 此双重稳定性特征使六方相成为 SmCo_{12} 永磁体最具潜力的候选相.

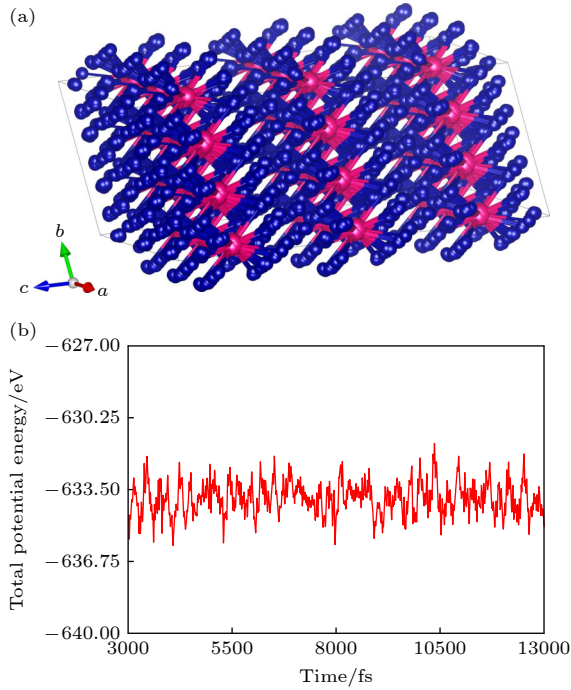


图 5 在 1200 K 下, 六方相 ($P\bar{3}1m$) SmCo_{12} 分子动力学模拟后 (a) 弛豫后晶体结构; (b) 总势能随模拟时间的变化

Fig. 5. At 1200 K, for the hexagonal phase ($P\bar{3}1m$) SmCo_{12} after molecular dynamics simulation: (a) Relaxed crystal structure; (b) total potential energy as a function of simulation time.

3.2 电子结构与磁矩

针对稳定的六方相 SmCo_{12} , 本文通过自旋极化密度泛函理论系统分析其电子结构特征与磁性起源. 表 3 所示为将 Sm 原子 4f 电子视为芯电子下, VASP(PAWPBE-GGA) 与 OpenMX(LCPAOC) 计算六方相 SmCo_{12} 各位点原子的自旋磁矩以及原子磁矩. 对比两种结果, 其中 LCPAO 方式计算结果中与实验中 SmCo 合金磁矩吻合较好^[39], Co 原子 ($1.66\mu_B$ — $1.76\mu_B$) 略高于 SmCo_5 中 Co ($1.39\mu_B$), Sm 原子磁矩 $1.25\mu_B$ 略低于 SmCo_5 中 Sm ($1.32\mu_B$ — $1.74\mu_B$)^[39], 后续将以其电子结构及磁矩为准.

表 3 VASP 与 OpenMX 计算六方相 ($P\bar{3}1m$ (No.162)) SmCo_{12} 电子磁矩和单离子磁各向异性能对比

Table 3. A comparison of the electronic magnetic moments and single ion magnetic anisotropy energies of hexagonal ($P\bar{3}1m$ (No.162)) SmCo_{12} calculated by using VASP and OpenMX.

Method	Atom	s	p	d	m_i/μ_B	k_i/meV
OpenMX	Co 6 k_1	-0.01	-0.08	1.74	1.66	0.19
	Co 6 k_2	0.0	-0.06	1.84	1.76	0.46
	Sm 1 b	-0.01	-0.04	1.29	1.25	-11.97
VASP	Co 6 k_1	-0.02	-0.05	1.67	1.60	0.57
	Co 6 k_2	-0.01	-0.04	1.57	1.52	0.4
	Sm 1 b	-0.01	-0.01	-0.21	-0.23	-8.93

6 k_1 位点的 Co 原子磁矩 ($1.66\mu_B$) 稍小于 6 k_2 位点的 Co 原子磁矩 ($1.76\mu_B$), 其中主要由 3d 电子贡献, 而 4s 电子与 3p 电子磁矩贡献较小, 且与 3d 电子自旋磁矩 m_i^s 方向相反, 导致了 Co 原子总自旋磁矩降低. 原子轨道磁矩与自旋磁矩对比如表 4 所示, 由于 3d 轨道湮灭 (orbital quenching)^[40,24] Co 原子轨道磁矩几乎没有, Co 原子磁矩中自旋磁矩贡献占比 95% 以上, 轨道磁矩贡献不足 5%. Sm 原子磁矩主要由 5d 电子贡献 ($1.29\mu_B$), 其次为 6s 电子 ($-0.01\mu_B$) 与 5p 电子 ($-0.04\mu_B$), 且与 5d 电子自旋方向相反, 同样导致 Sm 原子总自旋磁矩降低. 晶胞的磁矩为 $21.81\mu_B/\text{f.u.}$

表 4 六方相 ($P\bar{3}1m$) SmCo_{12} 结构自旋磁矩和轨道磁矩

Table 4. Spin magnetic moments and orbital magnetic moments of the hexagonal phase ($P\bar{3}1m$) SmCo_{12} structure.

Atoms	Occ.	m_i^s/μ_B	m_i^{orbit}/μ_B	m_i/μ_B
Co	6 k_1	1.66	0.07	1.73
Co	6 k_2	1.76	0.08	1.84
Sm	1 b	1.25	0.02	1.27

图 6 所示为计算的分波态密度 (partial density of states, PDOS). 费米能级 (E_f) 处连续非零的态密度分布说明该体系的金属导电特性, 与典型稀土永磁材料的电子行为一致. 在 -6—3 eV 能量范围内的态密度主要由 Co-3d 轨道主导, 存在明显的自旋极化, 表明体系磁性主要起源于 Co-3d 轨道的自旋劈裂. 其次为 Sm-5d 轨道贡献的, 钐原子 5d 轨道上占据的电子是 Sm-Co 轨道在费米面上出现重叠, 存在轨道杂化效应导致的^[38,39], 5d 电子与 3d 电子类似, 处于外层, 具有很强的扩展性, 导致

出现类似 3d-3d 交换作用的 5d-3d 交换作用. 其他原子轨道 (Co-s, Sm-s, Sm-p) 在费米能级附近的投影态密度很小. 以上结果说明, 六方相 SmCo_{12} 中 Co 原子 3d 电子与 Sm 原子 3d 电子贡献自旋磁矩, 两者铁磁耦合.

3.3 磁性能

Sm-Co 合金中, Co 原子与 Sm 原子 d 轨道间存在强自旋轨道耦合作用以及磁晶各向异性. 本文考虑自旋轨道耦合效应计算了六方相 SmCo_{12} 中的单离子磁各向异性常数, 如表 3 所示. 单离子磁各向异性 $k_1^{\text{Sm}(\text{Co})}$ 的定义如下:

$$k_1^{\text{Sm}(\text{Co})} = E_{\text{soc}}^{\text{[hard axis]}} - E_{\text{soc}}^{\text{[easy axis]}}, \quad (6)$$

其中 $E_{\text{soc}}^{\text{[hard axis]}}$ 与 $E_{\text{soc}}^{\text{[easy axis]}}$ 分别表示在自旋轨道耦合下难轴与易轴单离子贡献的能量. 根据计算结果, Sm 离子的磁各向异性常数 ($k_1^{\text{Sm}} = -11.97 \text{ meV}$) 是 Co 离子的磁各向异性常数的 20 倍, 对磁晶各向异性起主导作用. 这和传统稀土永磁材料中过渡金属贡献磁矩而稀土元素主导磁各向异性的情况类似. 由于 Sm^{3+} 离子的电荷分布呈现长轴型(纺锤形)^[41], 磁易轴沿 [001] 方向. 整个体系磁晶各

向异性常数 $K_1 = 11.10 \text{ MJ/m}^3$, 弱于经典 CaCu_5 型 SmCo_5 (17.2 MJ/m^3)^[8], 但显著高于类似富 Co 的钐钴体系 (Sm_xCo_y , $y/x > 7$), 例如 $\text{Th}_2\text{Zn}_{17}$ 型 $\text{Sm}_2\text{Co}_{17}$ (3.3 MJ/m^3) 及 ThMn_{12} 型 $\text{Sm}(\text{Fe}_{0.8}\text{Co}_{0.2})_{12}$ (4.4 MJ/m^3). 这说明六方相 SmCo_{12} 在同类磁体中具有较强的磁各向异性.

为了评估六方相 ($P\bar{3}1m$) SmCo_{12} 的磁性能, 本文根据晶胞体积 (V_0)、磁矩 (m^{tot}) 和磁各向异性常数 (K_i) 等估算了其饱和磁化强度 (M_s)、磁能积 $(\text{BH})_{\text{max}}$, 以及 H_a , 如表 5 所示.

M_s 是永磁材料的一个重要性能参数, 由以下公式^[35] 计算得到:

$$M_s = \frac{m^{\text{tot}} N}{V_0} \mu_B, \quad (7)$$

其中 m^{tot} 是平均每分子式的磁矩, V_0 是平衡状态下晶胞的体积, $\mu_B = 9.274 \times 10^{-24} \text{ Am}^2$, N 是每晶胞中分子式的个数. 六方相 ($P\bar{3}1m$) SmCo_{12} 饱和磁化强度大小为 1.17 MA/m , 大于与文献^[38,42] 报道的 ThMn_{12} 型 SmCo_{12} 的饱和磁化强度. 由于 Co 原子的磁矩比 Fe 原子磁矩小, SmCo_{12} 的饱和磁矩普遍小于 SmFe_{12} (1.30 MA/m) 或者 $\text{Sm}(\text{Fe}_{0.8}\text{Co}_{0.2})_{12}$ 合金 (1.35 MA/m)^[24,39,42,45].

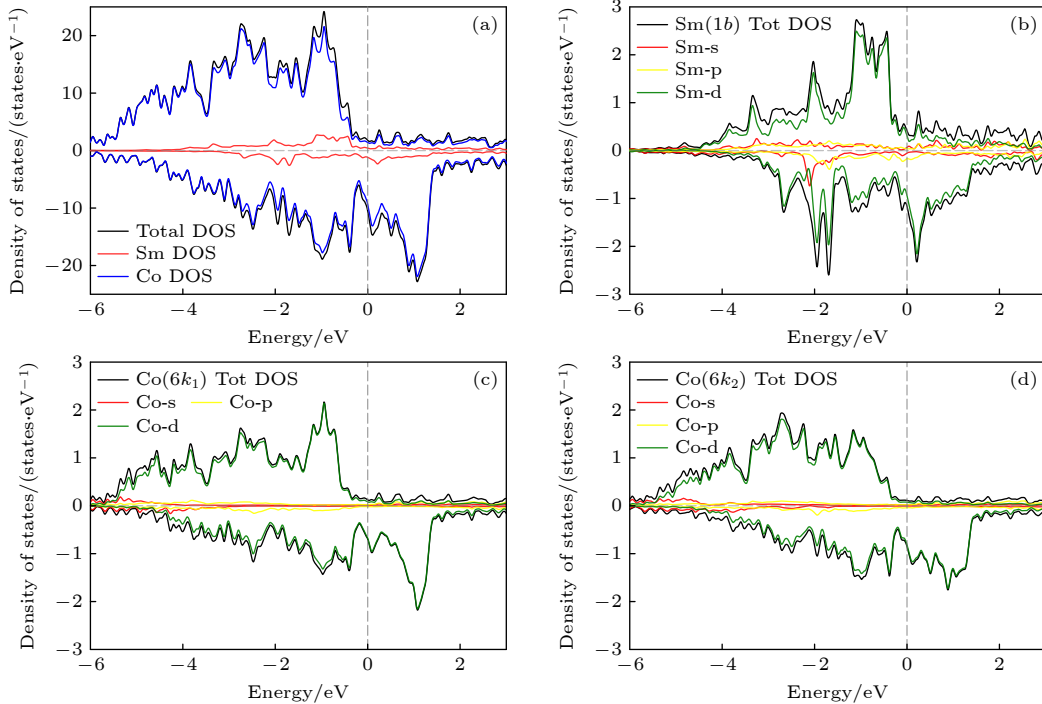


图 6 六方相 ($P\bar{3}1m$) SmCo_{12} 态密度 (a) 总态密度与各元素贡献; (b) Sm 原子态密度以及各轨道贡献; (c) $6k_1$ 晶位 Co 原子态密度及各轨道贡献; (d) $6k_2$ 晶位 Co 原子态密度及各轨道贡献, 费米能级设为 0 eV

Fig. 6. The DOS of hexagonal phase ($P\bar{3}1m$) SmCo_{12} : (a) The total DOS and the contribution of each element; (b) the Sm atomic DOS and the contribution of each orbital; (c) the Co atomic DOS at $6k_1$ crystal site and the contribution of each orbital; (d) the Co atomic DOS at the $6k_2$ crystal site and the contribution of each orbital. The Fermi level is set to 0 eV.

表 5 六方相 ($P\bar{3}1m$ (No.162)) SmCo_{12} 本征磁性与 ThMn_{12} 型对比Table 5. Comparison of intrinsic magnetism between hexagonal ($P\bar{3}1m$ (No.162)) SmCo_{12} and ThMn_{12} -type structure.

Space Group	$m^{\text{tot}}/(\mu_B \cdot \text{f.u.}^{-1})$	$M_s/(\text{MA} \cdot \text{m}^{-1})$	$(\text{BH})_{\text{max}}/\text{MGOe}$	$H_a/(\text{MA} \cdot \text{m}^{-1})$	T_C/K
$P\bar{3}1m$ (No.162) SmCo_{12}	21.81	1.17	54.56	15.01	1180
ThMn_{12} -type SmCo_{12} *	21.90	1.26	62.38	8.70	1150
ThMn_{12} -type SmCo_{12} [15,38,40,41]	17.4	1.0	39.60	3.91	1300
ThMn_{12} -type SmFe_{12} [38,41,44]	25.7	1.30	76.0	9.55	554
ThMn_{12} -type $\text{Sm}(\text{Fe}_{0.8}\text{Co}_{0.2})_{12}$ [15,43]	24.5	1.35	80	9.55	1100

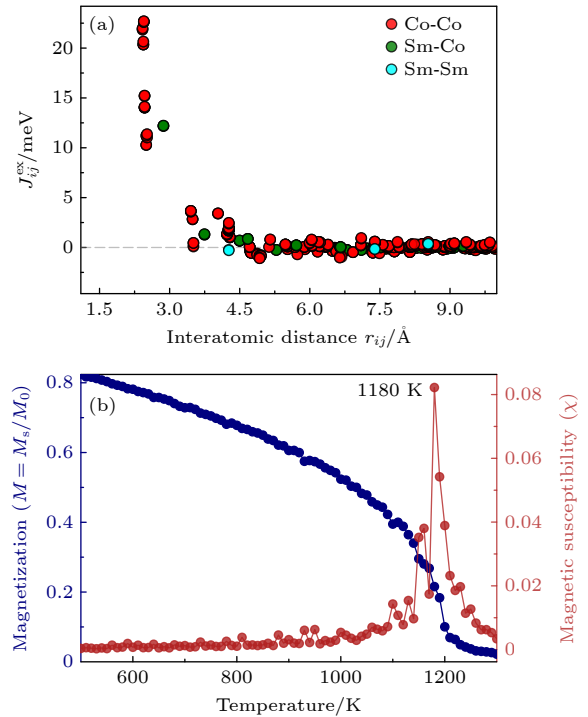
注: *present work.

最大磁能积表示单位体积的磁体在外磁场中能够存储的最大磁能量,是衡量产生同等强度磁场所需材料体积的参数. 本文通过公式 $(\text{BH})_{\text{max}} = \frac{1}{4} \mu_0 M_s^2$ [35] 估算得到最大磁能积. 六方相 SmCo_{12} 的最大磁能积高达 54.56 MGOe, 显著高于传统钕钴合金 1:5 型 (24 MGOe[41]) 与 2:17 型 (35 MGOe[41]) 的最大磁能积. 比理论计算 ThMn_{12} -type SmCo_{12} 的 (39.60 MGOe) 大, 但是低于实验掺杂制备的 ThMn_{12} -type $\text{Sm}(\text{Fe}_{0.8}\text{Co}_{0.2})_{12}$ (80 MGOe[14]) 与 NdFeB 理论最大磁能积 (64 MGOe[1]). 说明六方相 ($P\bar{3}1m$) SmCo_{12} 材料具有潜在的应用价值.

矫顽力 (H_C) 是衡量永磁材料在退磁过程中保持剩余磁化强度能力的关键参数, 其上限由 H_a 决定. 本文根据 Brown's paradox [45] 与公式 [16] $H_a = 2K_1^A/(\mu_0 M_s)$ 估算得到六方相 SmCo_{12} 的 H_a 等于 15.01 MA/m. 与传统钕钴永磁体相比, 其低于 1:5 型 (35 MA/m[8]), 但显著高于 2:17 型 (5.4 MA/m[8,32]) 与 $\text{Sm}(\text{Fe}_{0.8}\text{Co}_{0.2})_{12}$ (9.55 MA/m[14]). 这表明六方相 SmCo_{12} 具有高矫顽力潜力. 特别指出, 本文 DFT 计算所得到的 K_1^A , M_s 及由其推导出的 H_a 均为 $T = 0 \text{ K}$ 下的理论预测值, 未考虑温度变化引起的自旋重取向等效应.

六方相 SmCo_{12} 原子间交换耦合常数 (J_{ij}) 如图 7(a) 所示, 本文重点分析近邻原子对 ($r_{ij} < 4 \text{ \AA}$) 的交换作用特征. Co 原子间交换常数 ($J_{\text{Co-Co}}$) 分布于 11.0—22.7 meV 范围, 均呈现显著铁磁耦合特性 ($J > 0$), 强度与典型钕钴体系相当, 包括 $\text{SmFe}_{10}\text{Co}_2$ ($J = 20 \text{ meV}$ [43])、1:5 型 SmCo_5 (16—21 meV[8]) 以及 $\alpha\text{-Co}$ (24 meV[24]), 印证了 3d-3d 电子交换作用在该相中的主导地位. 最近邻 Sm-Co 原子对的交换常数 ($J_{\text{Sm-Co}}$) 为 12 meV, 其强度低于 $J_{\text{Co-Co}}$. 该现象源于 Sm 的 4f 电子受核屏蔽效应影响, Sm 与 Co-3d 电子仅能通过 5d-3d 轨道杂化介导间接交换 (Campbell 模型 [39]), 其耦合效率较直接 3d-

3d 作用降低约 80%. 对比 $\text{SmFe}_{10}\text{Co}_2$ ($J_{\text{Sm-Co}} = 1—5 \text{ meV}$ [43]) 以及 SmCo_5 ($J_{\text{Sm-Co}} = 6 \text{ meV}$ [8]), 本体系 Sm-Co 耦合强度提升约 2 倍及以上. Sm 原子间交换作用 ($J_{\text{Sm-Sm}} < 1 \text{ meV}$) 几乎可以忽略. 此交换作用层次结构 ($J_{\text{Co-Co}} > J_{\text{Sm-Co}} > J_{\text{Sm-Sm}}$) 揭示了六方相 SmCo_{12} 以 Co 亚晶格铁磁网络为磁性载体, Sm 离子通过与 Co 原子的轨道杂化提供间接调控的整体磁化机制.

图 7 六方相 SmCo_{12} (a) 每个原子间交换耦合常数随间距变化曲线; (b) 随温度变化的磁化曲线Fig. 7. Hexagonal SmCo_{12} : (a) Exchange coupling constants between each atom as a function of interatomic distance; (b) magnetization curve as a function of temperature.

为确定六方相 SmCo_{12} 的铁磁相变温度, 本文基于 Heisenberg 模型开展 Monte Carlo 模拟, 获得六方相 SmCo_{12} 的磁化强度-温度曲线. 如图 7(b) 所示, 1180 K 处出现磁化率峰值, 对应体系的居

里温度 T_C . 对比分析表明, 该 T_C 显著高于 CaCu_5 型 SmCo_5 (1003 K^[8]), 但较 $\text{Th}_2\text{Zn}_{17}$ 型 $\text{Sm}_2\text{Co}_{17}$ (1190 K^[41]) 降低 0.8%; 与 ThMn_{12} 型 SmCo_{12} 的平均场理论预测值 (1300 K^[15]) 相比降低 9.2%, 该差异源于平均场近似未计入磁晶各向异性对自旋涨落的抑制作用. 较实验报道的 ThMn_{12} 型掺杂体系 ($T_C = 859$ K) 提升 37.4%, 凸显六方相 SmCo_{12} 的高温铁磁稳定性优势.

综上, 六方相 SmCo_{12} 比 ThMn_{12} 型 SmCo_{12} 更加稳定, 虽然饱和磁化强度和磁能积不如掺杂 SmCo_{12} 合金, 但在矫顽力以及居里温度方面具有无法比拟的优势. 高居里温度和稳定性是决定材料能否在高温环境下服役所需的两个必要条件, 六方相 SmCo_{12} 的高温铁磁稳定性使得其比 ThMn_{12} 型 SmCo_{12} 和掺杂 SmCo_{12} 合金更有竞争力.

4 结 论

本文采用局域粒子群优化算法结合第一性原理计算方法探索了 SmCo_{12} 体系的新型稳定相, 主要结论如下.

1) 在 PSO 算法搜索出的 124 种结构中, 成功预测了一种六方相结构的 SmCo_{12} , 空间群为 $P\bar{3}1m$, 形成能较传统 ThMn_{12} 型 SmCo_{12} 降低 90 eV/atom, 体积模量为 132 GPa, 声子谱无虚频, 能在 1200 K 下 Nosé 热浴模拟中保持结构稳定.

2) 电子结构表明六方相 SmCo_{12} 具有金属特性, 晶胞总磁矩高达 21.81 ($\mu_B/\text{f.u.}$), 磁晶各向异性可达 11.10 MJ/m³, 显著高于类似高富钴 (Sm_xCo_y , $y/x > 7$) 的体系.

3) 基于第一性原理计算的磁矩、磁晶各向异性常数和磁交换常数, 理论估计六方相 SmCo_{12} 最大磁能积、各向异性场与居里温度可达 54.56 MGOe, 15.01 MA/m 和 1180 K.

本文理论预测了一种具有良好磁性能的稳定 SmCo_{12} 结构, 为解决 ThMn_{12} 型结构的稳定性难题提供了新方向.

参考文献

- [1] Matsuura Y 2006 *J. Magn. Magn. Mater.* **303** 344
- [2] Coey J M D, Sun H 1990 *J. Magn. Magn. Mater.* **87** L251
- [3] Strnat K, Hoffer G, Olson J, Ostertag W, Becker J J 1967 *J. Appl. Phys.* **38** 1001
- [4] Ojima T, Tomizawa S, Yoneyama T, Hori T 1977 *Jpn. J. Appl. Phys.* **16** 671
- [5] Liu J F, Ding Y, Hadjipanayis G C 1999 *J. Appl. Phys.* **85** 1670
- [6] Tian M B 2001 *Magnetic Materials* (Beijing: Tsinghua University Press) p80 (in Chinese) [田民波 2001 磁性材料 (北京: 清华大学出版社) 第 80 页]
- [7] Coey J M D 2020 *Engineering* **6** 119
- [8] Liu S 2019 *Chin. Phys. B* **28** 017501
- [9] Yang Y C, Kebe B, James W J, Deportes J, Yelon W 1981 *J. Appl. Phys.* **52** 2077
- [10] Yang Y C 1981 *Acta Metall. Sin.* **17** 355 (in Chinese) [杨应昌 1981 金属学报 **17** 355]
- [11] Felner I, Nowik I, Seh M 1983 *J. Magn. Magn. Mater.* **38** 172
- [12] Ohashi K, Tawara Y, Osugi R, Shimao M 1988 *J. Appl. Phys.* **64** 5714
- [13] Harashima Y, Terakura K, Kino H, Ishibashi S, Miyake T 2016 *J. Appl. Phys.* **120** 203904
- [14] Hirayama Y, Takahashi Y K, Hirose S, Hono K 2017 *Scr. Mater.* **138** 62
- [15] Matsumoto M, Hawai T, Ono K 2020 *Phys. Rev. Appl.* **13** 064028
- [16] Sun J Q, Wu X C, Que Z X, Zhang W B 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 180202 (in Chinese) [孙敬淇, 吴绪才, 阙志雄, 张卫兵 2023 物理学报 **72** 180202]
- [17] Wang Y C, Lv J, Zhu L, Ma Y M 2010 *Phys. Rev. B* **82** 094116
- [18] Wang Y C, Lv J, Gao P Y, Ma Y M 2022 *Acc Chem. Res.* **55** 2068
- [19] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Comput. Mater. Sci.* **6** 15
- [20] Kresse G, Furthmüller J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 11169
- [21] Kresse G, Hafner J 1993 *Phys. Rev. B* **47** 558
- [22] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [23] Kresse G, Joubert D 1999 *Phys. Rev. B* **59** 1758
- [24] Larson P, Mazin I I, Papaconstantopoulos D A 2003 *Phys. Rev. B* **67** 214405
- [25] Togo A, Chaput L, Tadano T, Tanaka I 2023 *J. Phys. Condens. Matter* **35** 353001
- [26] Ozaki T, Kino H 2005 *Phys. Rev. B* **72** 045121
- [27] Liechtenstein A I, Katsnelson M I, Antropov V P, Gubanov V A 1987 *J. Magn. Magn. Mater.* **67** 65
- [28] Ozaki T 2003 *Phys. Rev. B* **67** 155108
- [29] Gong Q, Yi M, Evans R F L, Xu B X, Gutfleisch O 2019 *Phys. Rev. B* **99** 214409
- [30] Evans R F L, Fan W J, Chureemart P, Ostler T A, Ellis M O A, Chantrell R W 2014 *J. Phys. : Condens. Matter* **26** 103202
- [31] Skubic B, Hellsvik J, Nordström L, Eriksson O 2008 *J. Phys. : Condens. Matter* **20** 315203
- [32] Toga Y, Matsumoto M, Miyashita S, Akai H, Doi S, Miyake T, Sakuma A 2016 *Phys. Rev. B* **94** 174433
- [33] Manzoar A, Pandey S, Chakraborty D, Phillpot S R, Aidhy D S 2018 *npj Comput. Mater.* **4** 47
- [34] Fu C L, Ho K M 1983 *Phys. Rev. B* **28** 5480
- [35] Erdmann S, Klüner T, Sözen H İ 2023 *J. Magn. Magn. Mater.* **572** 170645
- [36] Yu J B, Jiang S Y, Sun D, Lin P, Zhang Y Q 2022 *J. Mater. Res. Technol.* **18** 3410
- [37] Yuan Y, Yi J H, Borzone G, Watson A 2011 *Calphad* **35** 416
- [38] Landa A, Söderlind P, Moore E E, Perron A 2022 *Appl. Sci.* **12** 4860
- [39] O'Handley R C 1999 *Modern Magnetic Materials: Principles and Applications* (New York: Wiley) p480
- [40] McGlynn E 2013 *Contemp. Phys.* **54** 115
- [41] Skomski R 2016 *Novel Functional Magnetic Materials* (Cham: Springer) p359
- [42] Buschow K H J 1977 *Rep. Prog. Phys.* **40** 1179

[43] Ochirkhuyag T, Hong S C, Odkhuu D 2022 *npj Comput. Mater.* **8** 193

[44] Körner W, Krugel G, Elsässer C 2016 *Sci. Rep.* **6** 24686

[45] Kronmüller H 1987 *Phys. Status Solidi B* **144** 385

Prediction and magnetic study of a new stable SmCo_{12} structure^{*}

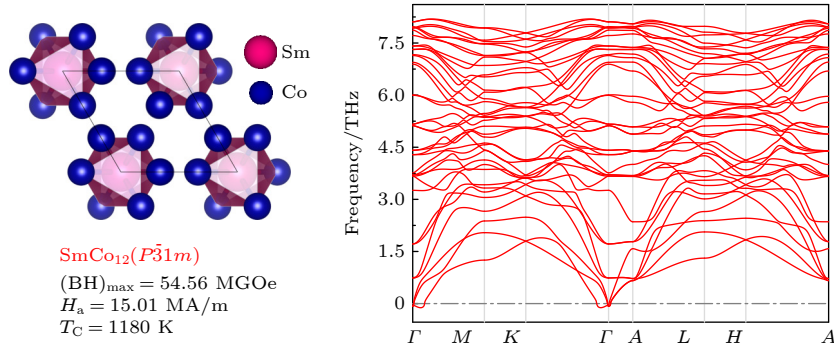
DAI Yudong LIU Yicong LI Zhenqing YANG Zhixiong[†] ZHANG Weibing[‡]

(Hunan Provincial Key Laboratory of Flexible Electronic Materials Genome Engineering, School of Physics & Electronic Science, Changsha University of Science and Technology, Changsha 410004, China)

(Received 26 March 2025; revised manuscript received 11 June 2025)

Abstract

SmCo_{12} , with its large magnetic energy product, is a highly promising high-temperature permanent magnet that has attracted significant attention. However, the widely existing ThMn_{12} -type crystal structure in this system faces serious stability problem, which significantly hinders its practical engineering applications. Exploring a novel SmCo_{12} structure that combines stability and excellent magnetic properties is crucial for breaking through this bottleneck. In this study, the metastable phases of the SmCo_{12} system are systematically investigated by using a local particle swarm optimization algorithm combined with first-principles calculations. The theoretical calculations reveal a hexagonal phase structure (space group $P\bar{3}1m$) with a formation energy 90 meV/atom lower than that of the conventional ThMn_{12} -type SmCo_{12} . Its phonon spectrum shows no imaginary frequencies and its structure remains stable during Nosé-Hoover thermostat simulations at 1200 K, confirming its dynamic stability and thermodynamic stability. The electronic structure reveals that this structure exhibits metallic characteristics, with a total magnetic moment of as high as $21.81 \mu_{\text{B}}/\text{f.u.}$ and a magnetocrystalline anisotropy constant of up to 11.10 MJ/m^3 , significantly exceeding similar high-cobalt-content Sm-Co systems. Furthermore, theoretical predictions indicate that the hexagonal phase SmCo_{12} structure exhibits exceptionally outstanding magnetic properties, with maximum energy product, anisotropy field, and Curie temperature reaching 54.56 MGOe, 15.01 MA/m, and 1180 K, respectively. The newly discovered hexagonal SmCo_{12} phase provides a novel direction for solving the stability problem of the ThMn_{12} -type structure.



Keywords: structure prediction, first principles calculations, high Curie temperature, rare earth permanent magnets

PACS: 61.50.Ah, 71.15.Mb, 75.30.Kz, 75.50.Cc

DOI: 10.7498/aps.74.20250389

CSTR: 32037.14.aps.74.20250389

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11874092), the Fok YingTong Education Foundation, China (Grant No. 161005), and the Science Fund for Distinguished Young Scholars of Hunan Province, China (Grant No. 2021JJ10039).

[†] Corresponding author. E-mail: clyzx@csust.edu.cn

[‡] Corresponding author. E-mail: zhangwb@csust.edu.cn

新型稳定 SmCo_{12} 结构预测和磁性

戴渝东 刘译聪 李振庆 杨志雄 张卫兵

Prediction and magnetic study of a new stable SmCo_{12} structure

DAI Yudong LIU Yicong LI Zhenqing YANG Zhixiong ZHANG Weibing

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 176101 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20250389

CSTR: 32037.14.aps.74.20250389

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250389>

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

Li-Y-H三元氢化物的结构和稳定性研究

Structure and stability of possible new Li-Y-H ternary hydrides

物理学报. 2022, 71(1): 017401 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20210824>

过渡金属元素掺杂对 SmCo_3 合金结构和磁性能影响的第一性原理计算

First-principles calculations of structural and magnetic properties of SmCo_3 alloys doped with transition metal elements

物理学报. 2024, 73(3): 037502 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231436>

二维 SiP_2 同素异构体结构预测及其电子性质的第一性原理研究

First-principles study of structure prediction and electronic properties of two-dimensional SiP_2 allotropes

物理学报. 2022, 71(23): 236101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220853>

Co和Ni过量影响 Co_2NiGa 合金晶体结构及相稳定性的第一性原理研究

First-principles study of Co and Ni excess effects on crystal structure and phase stability of Co_2NiGa alloy

物理学报. 2023, 72(15): 156301 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230626>

基于机器学习和第一性原理计算的Janus材料预测

Prediction of magnetic Janus materials based on machine learning and first-principles calculations

物理学报. 2024, 73(23): 230201 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20241278>

高压下富氢高温超导体的研究进展

Progress on hydrogen-rich superconductors under high pressure

物理学报. 2021, 70(1): 017407 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202189>