

中国科学院物理研究所 HM03组供稿
北京凝聚态物理国家研究中心

第89期

2021年11月16日

磁弹相变螺旋磁体中零热膨胀效应的发现

作为一大类磁功能材料，磁相变材料在磁性转变的同时，晶体结构对称性改变或晶格常数发生突变。由于自旋-晶格的强耦合作用，相变过程中材料的电子结构、熵和宏观尺寸等物理状态将产生明显变化，进而催生出丰富的物理效应，如巨磁热效应、大磁电阻、磁致应变、铁磁形状记忆效应和反常热膨胀等。

中国科学院物理研究所/北京凝聚态物理国家研究中心怀柔研究部HM03课题组长期致力于磁-结构相变材料和新型磁功能材料的开发和物性研究，先后开发多种磁性功能合金新材料体系。例如，在六角MM'X合金家族中，采用“等结构合金化”原则对体系进行原子占位选择，连续调控结构相变温度，先后获得了新型磁驱相变材料[Nature Communications 3, 873 (2012)]和具有自主知识产权的宽温区磁斯格明子新材料体系[Adv. Mater. 28, 6887(2016); Adv. Mater. 29, 1701144 (2017)]，并在这些新体系的物性调控和器件物理研究方面取得了一系列进展[Nature 561, 91 (2018); Nano Lett. 18, 1274 (2018); ASC Nano 13, 922 (2019); Phys. Rev. Applied 12, 054060 (2019)]。

近期，课题组博士后刘俊、研究员王文洪，同中科院物理所先进材料与结构分析实验室姚媛副研究员和澳大利亚卧龙岗大学程振翔教授、王建立教授合作，对MM'X家族中磁弹性MnCoSi基合金的磁结构展开了细致研究，实验证明该合金材料具有零热膨胀效应。他们首先利用原位变温粉末中子衍射手段，解析出MnCoSi合金的螺旋磁结构细节和演变过程（图1）：温度降低到磁有序温度（ ~ 380 K）以下，MnCoSi中顺磁结构将转变为普通helical螺旋磁结构。此外，合金中有Mn和Co两种磁性原子，其中磁矩主要承载在Mn原子上。而两种磁性原子形成四组磁螺旋结构Mn1-Mn3, Mn2-Mn4, Co1-Co3和Co2-Co4，所有磁矩平躺在 ab 面内，非公度的传播矢量 k 沿着 c 轴。有趣的是，不同于传统对MnCoSi磁结构的认识，当温度降低到220 K左右，磁结构将再次发生转变，普通helical螺旋结构将转变成摆线型cycloidal螺旋磁结构，传播矢量 k 方向不变，磁矩平躺在 bc 面内，四组螺旋结构如车轮般沿 c 轴滚动。进一步的晶格精修和相位分析可得，当温度升高时，传播矢量的模逐渐减小，这表明每组螺旋磁结构中相邻原子间磁矩夹角减小，螺旋周期变长。相邻两组Mn螺旋磁结构的夹角随着温度升高也逐渐减小，所以温度将诱发所有Mn原子磁矩平缓地一致转动（图2）。而少量Ni元素的引入则进一步加剧磁矩的转动幅度，使磁矩倾向平行排列，合金趋于形成铁磁态。

作为强磁弹相变合金， $Mn_{1-x}Ni_xCoSi$ 体系中磁矩的一致转动诱发耦合晶格中的各向异性热膨胀。温度升高时，正交结构的 a 轴急剧缩短，而 b 、 c 轴逐渐拉伸，这带来宽温区内晶胞体积的不变性，即本征零热膨胀效应（图3）。该工作明晰了MnCoSi磁结构演化图像，设计了一种全新的单相零热膨胀材料，并且磁矩一致转动的物理机制对寻找新型反常热膨胀材料具有重要的指导意义。相关成果以“Coherent spin rotation-induced zero thermal expansion in MnCoSi-based spiral magnets”为题于2021年11月5日在线发表于NPG Asia Materials 上。

该项研究工作得到了国家重点研发计划(2017YFA0206303)，国家自然科学基金(11974406)，中国科学院B类先导专项(XDB33000000)，中国博士后面上基金(2020M680735)和澳大利亚研究理事会(DP190100150)的支持。

文章链接：<https://www.nature.com/articles/s41427-021-00338-4>

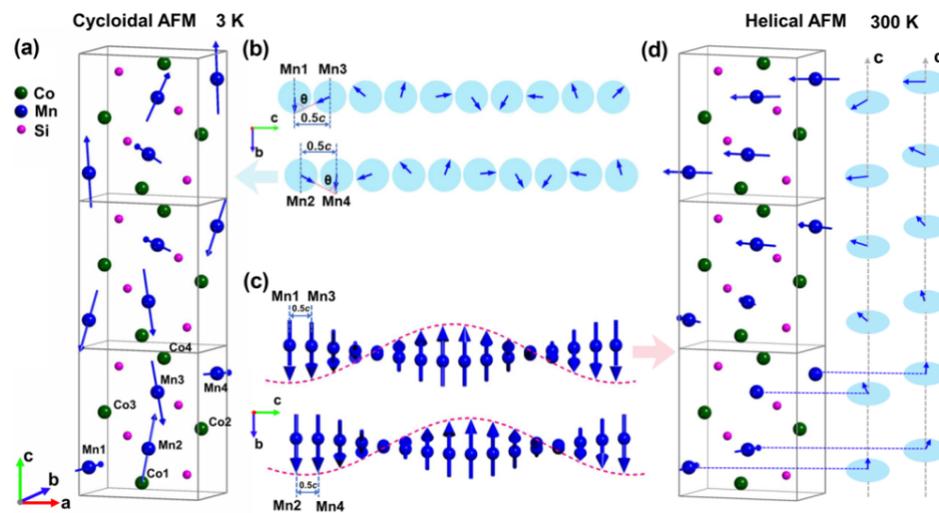


图1. (a) MnCoSi基合金在3 K时cycloidal摆线型磁结构示意图；(b) bc 面内Mn1-Mn3和Mn2-Mn4两组Mn摆线型磁结构示意图；(c) bc 面内Mn1-Mn3和Mn2-Mn4两组Mn普通helical螺旋磁结构示意图，该面内磁矩分量呈正弦调制；(d) MnCoSi基合金300 K时helical普通螺旋磁结构的示意图。

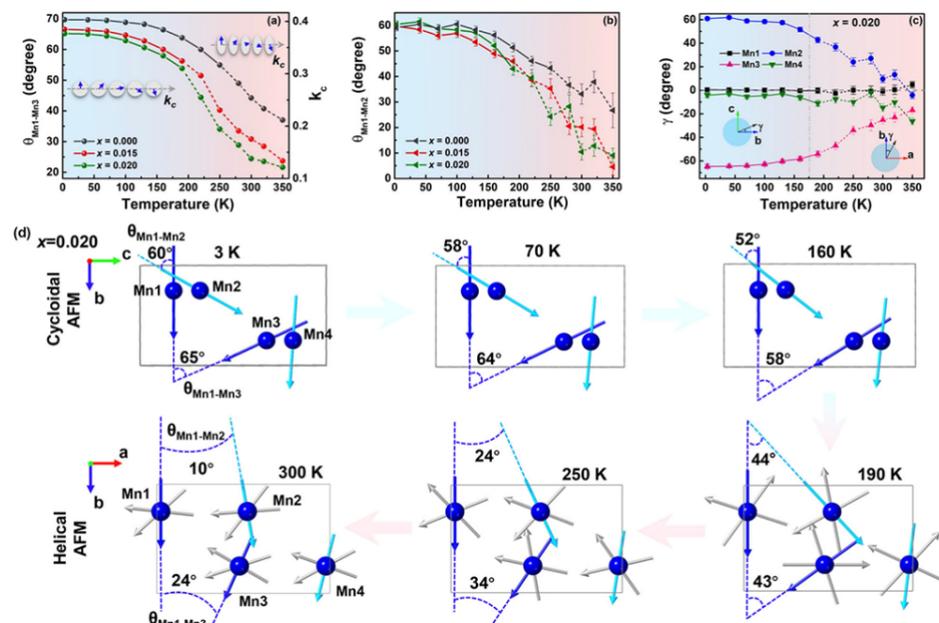


图2. 温度依赖的MnCoSi基合金磁结构中(a) Mn1和Mn3之间的夹角，(b) Mn1和Mn2之间的夹角和(c) Mn1、Mn2、Mn3和Mn4和晶格 b 轴之间的夹角。(d) 3 K, 70 K和100 K时 bc 面内（摆线型螺旋磁结构）和190 K, 250 K, 300 K时 ab 面内（普通螺旋型磁结构）的Mn自转动及夹角示意图。

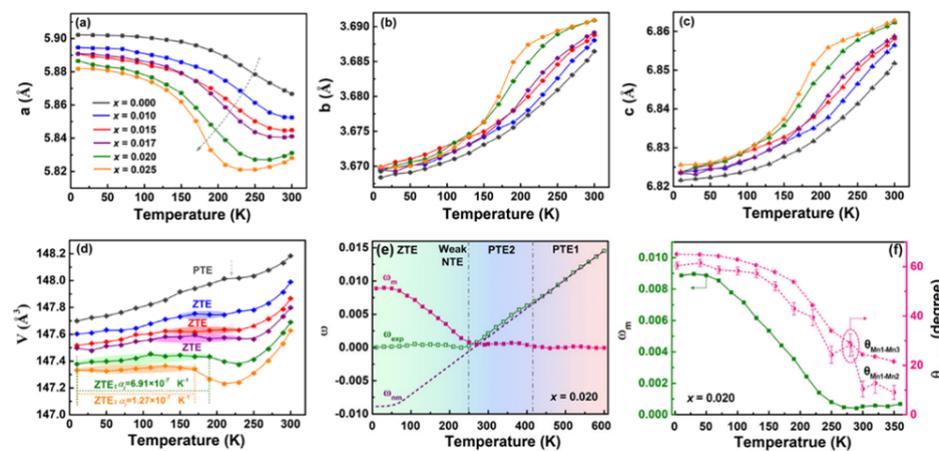


图3. $Mn_{1-x}Ni_xCoSi$ 合金体系随温度变化的晶格常数(a) a , (b) b , (c) c 和 (d) 单胞体积 V 的变化。(e) Debye-Grüneisen模型拟合提取出的热膨胀的非简谐振动贡献和磁贡献，(f) 提取的磁贡献热膨胀值和Mn自旋夹角的关系图。

[NPG Asia Materials 13, 70 \(2021\).pdf](#)

