



面向世界科技前沿, 面向国家重大需求, 面向国民经济主战场, 率先实现科学技术跨越发展,  
率先建成国家创新人才高地, 率先建成国家高水平科技智库, 率先建设国际一流科研机构。

——中国科学院办院方针



官方微博



官方微信

首页 组织机构 科学研究 人才教育 学部与院士 资源条件 科学普及 党建与创新文化 信息公开 专题

搜索

首页 > 科研进展

## X<sub>2</sub>YZ基Heusler磁性形状记忆合金成分敏感性研究获进展

文章来源: 金属研究所 发布时间: 2015-12-22 【字号: 小 中 大】

我要分享

X<sub>2</sub>YZ基Heusler合金中马氏体相变及磁转变耦合使其具有良好的形状记忆效应及磁热效应等优异性能, 在传感器、磁致冷冰箱等领域有着非常广泛的应用前景。这类合金的特征参数如马氏体相变温度 $T_M$ 、居里温度 $T_C$ 等对成分非常敏感。用合金化手段调节Heusler合金的特征参数以适应具体应用环境需求是该合金的研究重点之一, 预测其成分-性能(如 $T_M$ 等)关系是进行成分设计的关键。总结实验结果, 人们得到TM随成分变化的经验判据: 合金电子浓度 $c/a$ 越大,  $T_M$ 越高。然而, 某些合金体系如Ni<sub>2</sub>(Mn<sub>1-x</sub>Fe<sub>x</sub>)Ga ( $x < 0.7$ )、(Ni<sub>2-x</sub>Cu<sub>x</sub>)MnGa等并不满足这一普遍规律, 其机理仍不明确。另外, 不同成分及工艺下, Heusler合金的马氏体相可能呈现不同的结构如非调制四方相及复杂的5M及7M调制结构等。复杂的成分及结构共同作用下, 使得合金化对调制结构的影响理论研究极为困难。针对这一研究背景, 近年来, 中国科学院金属研究所沈阳材料科学国家(联合)实验室工程合金研究部研究人员采用第一原理EMTO-CPA方法, 对X<sub>2</sub>YZ基Heusler磁性形状记忆合金的成分敏感性 & 复杂调制结构进行了系统研究, 取得了一系列研究成果。

首先计算了不同原子占位情况下, Ni<sub>2</sub>MnGa基合金的自由能。通过比较自由能, 确定了过量原子及合金原子在Ni<sub>2</sub>MnGa中的稳定占位。发现在该合金中可能存在直接占位及间接占位两种方式。大多数情况下, 过量原子或合金原子占据贫组分的子晶格位置(直接占位), 但在某些情况下, 过量原子或合金原子并非直接占据贫组分的子晶格位置(间接占位), 如富Ga贫Ni合金, Ga占据Mn子晶格位置而相应量的Mn则被挤入Ni子晶格。在确定了原子稳定占位构型的基础上, 计算了立方母相的弹性模量 $C'$ 随合金成分及温度的变化, 结合实验测得的不同成分下的马氏体相变温度TM, 发现一般情况下,  $C'$ 增加, 则 $T_M$ 下降。 $C'$ 比 $c/a$ 能更好地反映 $T_M$ 随成分的变化规律, 例如,  $C'-T_M$ 关系能较好描述(Ni<sub>2-x</sub>Cu<sub>x</sub>)MnGa基合金 $T_M$ 随成分的变化, 但 $c/a-T_M$ 关系不能(见图1)。

然而, 对于Ni<sub>2</sub>(Mn<sub>1-x</sub>Fe<sub>x</sub>)Ga ( $x < 0.7$ )合金,  $C'-T_M$ 及 $c/a-T_M$ 关系均不能描述其 $T_M$ 随成分的变化。分析认为温度效应可能是引起 $C'-T_M$ 及 $c/a-T_M$ 关系失效的主要原因。基于此, 计算了磁熵、晶格振动及混合熵等温度效应对Ni<sub>2</sub>(Mn<sub>1-x</sub>Fe<sub>x</sub>)Ga ( $x < 0.7$ )合金和立方奥氏体L2<sub>1</sub>相及四方马氏体L1<sub>0</sub>相自由能的贡献。计算结果表明, 在不考虑温度效应时, 奥氏体与马氏体相的能量差 $\Delta E_M$ 随 $x$ (即 $c/a$ )增加而增加, 意味着马氏体的稳定性增加,  $T_M$ 升高, 不满足 $c/a-T_M$ 普遍关系。但若考虑温度效应, 在 $x < 0.7$ 时,  $\Delta E_M$ 随 $x$ (即 $c/a$ )增加而减小,  $x > 0.7$ 时,  $\Delta E_M$ 随 $x$ (即 $c/a$ )增加而增加, 如图2所示。利用含温度效应的DEAM计算了马氏体相变温度 $T_M$ , 理论预测值与实验值符合良好。进一步分析表明, 晶格振动是导致0 K及有限温度下 $\Delta E_M$ 随 $x$ 趋势不同的主要原因, 混合熵及磁熵的影响较小。

结合相干势近似及实验测得的调制函数研究了合金化对调制马氏体结构的影响。对调制马氏体结构进行了简化, 用调制振幅调制 $\eta$ 及晶格参数 $c/a$ 两个特征参数表征调制马氏体结构。利用这种方法, 得到了Ni<sub>2</sub>Mn(GaAl)及Ni<sub>2</sub>(MnFe)Ga的5M调制马氏体结构随成分的变化(见图3), 结果与实验符合良好。

上述研究对理解Heusler磁性形状记忆合金的成分——马氏体相变温度关系进而对该类合金进行合理的成分设计具有重要的理论意义。基于这些研究结果, 在*Phys. Rev. B* (11)、*Acta Mater.* (3)、*Appl. Phys. Lett.* (1)、*J. Appl. Phys.: Condens. Matter* (1)上发表系列论文20余篇。该研究得到了国家自然科学基金面上项目(50871114)的支持。

### 热点新闻

#### 中科院与广东省签署合作协议 ...

自春礼在第十三届健康与发展中山论坛上...  
中科院江西产业技术创新与育成中心揭牌  
中科院西安科学园暨西安科学城开工建设  
中科院与香港特区政府签署备忘录  
中科院2018年第3季度两类亮点工作筛选结...

### 视频推荐

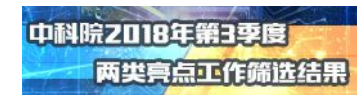


【新闻联播】“率先行动”计划 领跑科技体制改革



【时代楷模发布厅】王逸平 先进事迹

### 专题推荐



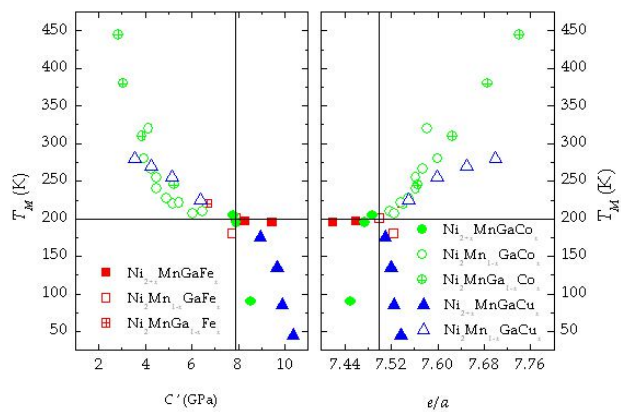


图1 实测Fe/Co/Cu合金化Ni<sub>2</sub>MnGa合金的马氏体相变温度 $T_M$ 随正交剪切模量 $C'$ 及电子浓度 $e/a$ 的变化。

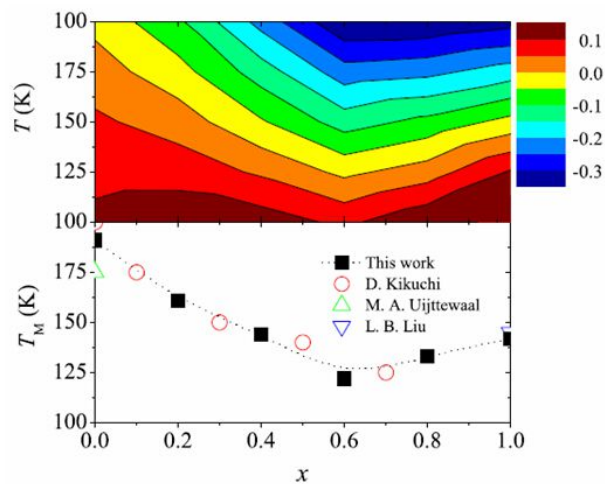


图2 上图: Ni<sub>2</sub>(Mn<sub>1-x</sub>Fe<sub>x</sub>)Ga合金奥氏体与马氏体相自由能差 $\Delta EAM$ 随Fe含量 $x$ 及温度 $T$ 的变化; 下图: 马氏体相变温度随Fe含量 $x$ 的变化, 其中实心方块为理论预测值, 圆圈及三角为实验测量值。

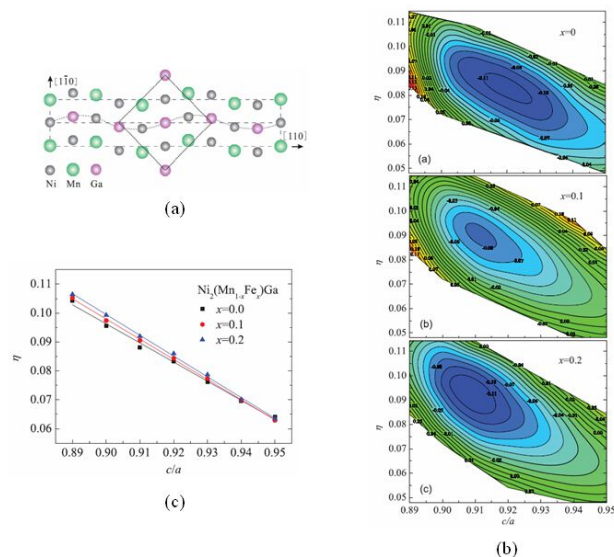


图3 (a) 5M调制马氏体结构示意图; (b) Ni<sub>2</sub>(Mn<sub>1-x</sub>Fe<sub>2x</sub>)Ga合金5M调制马氏体能量随结构参数 $\eta$ 及 $c/a$ 随成分的变化; (c) 结构参数 $\eta$ 随 $c/a$ 的变化。

(责任编辑: 叶瑞优)



© 1996 - 2018 中国科学院 版权所有 京ICP备05002857号 京公网安备110402500047号 联系我们  
地址：北京市三里河路52号 邮编：100864