

# KKR-CPA-LDA 计算方法对 CuMnAl 和 CoMnAl 以及 CuCoMnAl 合金的磁性研究\*

冯 琳<sup>1)</sup> 朱志永<sup>1)</sup> 朱 伟<sup>1)</sup> 刘恩克<sup>1)</sup> 唐晓丹<sup>1)</sup> 钱金凤<sup>1)</sup> 吴光恒<sup>1)†</sup>  
孟凡斌<sup>2)</sup> 刘何燕<sup>2)</sup> 罗鸿志<sup>2)</sup> 李养贤<sup>2)</sup>

1) (中国科学院物理研究所磁学国家重点实验室, 北京 100190)

2) 河北工业大学材料科学与工程学院, 天津 300130)

(2009 年 11 月 19 日收到; 2009 年 12 月 25 日收到修改稿)

采用 KKR-CPA-LDA 方法研究了 CuMnAl, CoMnAl 和 CuCoMnAl 四元合金中磁性原子磁矩和 Co-Mn 间的交换作用. 通过与实验结果对比, 揭示了 Mn 的磁矩和 Co 的磁矩以及它们的相互作用随成分变化的规律. 研究发现, 在  $\text{Cu}_{50}\text{Mn}_{25-x}\text{Al}_{25-x}$  合金中超过化学配比并占据 Al 位的 Mn 原子是反铁磁的, 而且由于近邻环境的不同, 其磁矩大于原有 Mn 原子的磁矩. 在  $\text{Co}_{50}\text{Mn}_{25-x}\text{Al}_{25-x}$  合金中, 随着 Mn 含量的增大, Mn 原子的磁矩保持不变, 而 Co 原子的磁矩单调增大. 在  $\text{Cu}_{50-x}\text{Co}_x\text{Mn}_{25}\text{Al}_{25}$  四元合金中, 随着 Co 对 Cu 的替换, Mn 原子磁矩的减小引起了 Co 原子磁矩的减小. 这些结果揭示了 Co 磁矩会受到 Mn 磁矩影响, 两者磁矩值是正相关的. 同时, 研究结果指出, Co-Mn 之间的交换作用也因添加 Mn 而增强. Co-Mn 间的交换作用并非仅仅与 Co 的存在有关, 其中也包含了 Mn 原子的贡献.

**关键词:** KKR-CPA-LDA 计算, Co-Mn 间交换作用

**PACC:** 7500

## 1. 引 言

近年来, 由于在传感器和驱动器方面潜在的应用前景, 尤其是自 2005 年发现了外磁场驱动马氏体相变的性质后, Heusler 型铁磁性形状记忆合金引起了材料界的广泛关注<sup>[1-5]</sup>. 实现这种磁驱动相变的必要条件是相变过程中出现大的  $\Delta M$ , 即母相和马氏体相的磁化强度差别必须足够大. 在低磁化强度的富 Mn 亚铁磁性形状记忆合金中, 获得大的  $\Delta M$  的有效方法之一是添加 Co. 例如  $\text{Ni}_{41}\text{Co}_9\text{Mn}_{39}\text{Sb}_{11}$  磁性形状记忆合金, 掺杂之前, 其母相和马氏体相都是低磁化强度的亚铁磁相, 掺 Co 之后得到了高磁化强度的铁磁性的母相, 而其马氏体相仍然保持低磁化强度的亚铁磁结构, 从而实现了大的  $\Delta M$ <sup>[1]</sup>. 这种成分策略已经在  $\text{NiMnGa}$ ,  $\text{NiMnIn}$ ,  $\text{MnNiGa}$ ,  $\text{NiCoMnAl}$  等许多材料体系中得到广泛应用<sup>[2-5]</sup>. 这一事实说明, Co 具有独特的改变 Mn 原子磁结构的作用. 而这种 Co 对磁结构的影响机理, 并没有很系

统地研究过. 此外, 传统观点认为 Mn3d 电子的局域性使之具有几乎不变的接近整数的自旋磁矩 (3 或者  $4\mu_B$ ); 而且其他磁性元素, 如 Co, Fe 和 Ni 等原子的磁矩在 Heusler 合金成分变化过程中可以看成是不变的. 显然, 从目前发表的大量 Heusler 合金的磁性研究结果看, 这种观点是不正确的.

为了弄清楚上述的 Co 的独特作用, 必须研究材料中引入 Co 之后, 母相和马氏体相的磁性原子磁矩和磁结构的变化规律. 其中, Co 原子在富 Mn 环境母相 (体心立方结构) 中的作用更为重要. 但由于目前各种富含 Mn 的磁性形状记忆合金中都含有磁性原子 Ni, 使得材料体系的磁结构变得复杂, 不利于我们研究 Co-Mn 之间的交换作用. 因此, 作为研究上述 Co 的作用的第一步, 在本工作中选择了仅有一种磁性原子的 CuMnAl 和在富 Mn 时仍保持铁磁性的 CoMnAl, 以及它们的中间合金 CuCoMnAl 作为研究对象, 采用可以处理偏离化学配比和原子混乱占位的 KKR-CPA-LDA 方法<sup>[6]</sup>, 进行了 *ab initio*. 计算. 通过与实验结果对比, 在确认计算结果

\* 国家自然科学基金 (批准号: 10774178, 50771103) 和北京市教育委员会学科与研究生教育建设项目专项资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: ghwu@iphy.ac.cn

正确可信的基础上,可以更清晰地揭示成分变化过程中 Co 和 Mn 原子磁矩以及 Co-Mn 之间交换作用的变化. 我们发现, Co-Mn 间的铁磁性交换作用, 在 Co 含量不变的情况下会因富 Mn 而增强, 同时, Mn 的磁矩也正相关地影响着 Co 的磁矩. 因此, 影响这一交换作用并非仅仅是 Co, Mn 原子也有相应的贡献.

## 2. 实验方法

全部样品采用电弧熔炼之后退火的方式制备, 以保证成分的均匀性和原子的有序占位. 部分 Mn 含量超过 35% (文中所出现的百分比全部为原子百分比) 的样品, 采取了甩带方法消除面心立方杂相, 以保证获得纯体心立方相. 以 Mn 替代 Al 的方式, 合成了不同 Mn 含量的 CuMnAl ( $\text{Cu}_{50}\text{Mn}_{25+x}\text{Al}_{25-x}$ ) 和 CoMnAl 合金 ( $\text{Co}_{50}\text{Mn}_{25+x}\text{Al}_{25-x}$ ), 并且采用 Co 取代 Cu 的方式, 合成了  $\text{Cu}_{50-x}\text{Co}_x\text{Mn}_{25}\text{Al}_{25}$  四元合金. 利用 X 射线衍射法分析它们的晶体结构, 并在 5 K 下测量它们在 5 T 场下的饱和磁化强度, 以计算出分子磁矩. 采用 KKR-CPA-LDA 方法<sup>[6]</sup> 计算这三种样品的磁结构, 并与实验结果进行对照. 这种计算方法的优越性在于它可以小步幅地计算各种取代成分和原子混乱占位的情况, 而不像 castep 方法由于受对称性的局限只能计算少数固定的成分.

## 3. 结果及讨论

XRD 分析发现, 在所有的合金样品中, 如果采用增加 Mn, 取代 Al 的成分变化方式, 晶格常数的变

化十分小, 小到可以忽略. 也就是说,  $\text{Cu}_{50}\text{Mn}_{25+x}\text{Al}_{25-x}$  和  $\text{Co}_{50}\text{Mn}_{25+x}\text{Al}_{25-x}$  以及  $\text{Cu}_{50-x}\text{Co}_x\text{MnAl}$  合金的晶格常数主要决定于 Cu 和 Co 原子, 即它们的晶格常数取决于  $X_2YZ$  中的 X 原子, 这一点与很多已有的 Heusler 合金一致<sup>[7]</sup>. 当 Co 或 Cu 的成分发生变化时, 样品的晶格常数则发生较大的变化. 图 1 给出了  $\text{Cu}_{50-x}\text{Co}_x\text{Mn}_{33}\text{Al}_{17}$  系列合金的晶格常数随 Co 含量的变化. 可以看出: 随着 Co 成分的增加, 晶格线性地缩小. 这是因为 Co 的原子半径小于 Cu 原子. 基于此, 在计算过程中, 对  $\text{Cu}_{50}\text{Mn}_{25+x}\text{Al}_{25-x}$  系列合金使用  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$  的晶格常数  $a = 5.95 \text{ \AA}$ , 而对于  $\text{Co}_{50}\text{Mn}_{25+x}\text{Al}_{25-x}$  系列合金使用  $\text{Co}_2\text{MnAl}$  的晶格常数  $a = 5.756 \text{ \AA}$ , 对于  $\text{Cu}_{50-x}\text{Co}_x\text{Mn}_{25}\text{Al}_{25}$  系列合金, 根据实验结果的线性拟合选取不同成分的晶格常数数值. 这些晶格常数的结果说明, 单纯变化 Mn 含量的样品中所发生的磁性变化与原子间距离的改变关系并不大.

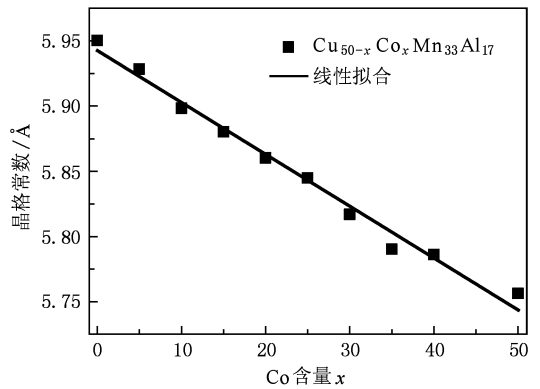


图 1  $\text{Cu}_{50-x}\text{Co}_x\text{Mn}_{33}\text{Al}_{17}$  的晶格常数随 Co 含量的变化

表 1  $\text{Cu}_{50}\text{Mn}_{25+x}\text{Al}_{25-x}$  系列分子磁矩的计算值、实验值及 B, D 位 Mn 磁矩的计算值和居里温度

成分	分子磁矩实	分子磁矩	$\text{Mn}_B$ 磁矩	$\text{Mn}_D$ 磁矩	$T_c$
	验值/ $\mu_B$	计算值/ $\mu_B$	计算值/ $\mu_B$	计算值/ $\mu_B$	实验值/K
$\text{Cu}_2\text{MnAl}$	3.5612	3.5408	3.5474		630
$\text{Cu}_{50}\text{Mn}_{30}\text{Al}_{20}$	2.7888	2.7208	3.5029	-3.7305	534
$\text{Cu}_{50}\text{Mn}_{33}\text{Al}_{17}$	2.2812	2.2704	3.4973	-3.7014	500
$\text{Cu}_{50}\text{Mn}_{35}\text{Al}_{15}$ (ribbon)	1.8024	1.9817	3.4990	-3.6839	458
$\text{Cu}_{50}\text{Mn}_{37}\text{Al}_{13}$ (ribbon)	0.6548	1.6986	3.5032	-3.6687	
$\text{Cu}_{50}\text{Mn}_{40}\text{Al}_{10}$ (ribbon)	0.1184	1.2829	3.5139	-3.6495	

我们已经知道,  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$  是  $L2_1$  结构. 正分化学配比时, 其中 Cu 占据 A, C 位, Mn 和 Al 分别占据 B, D 位<sup>[8]</sup>. 用 Mn 取代 Al (Mn 含量大于 25%) 时, 多余的 Mn 原子占据减少的 Al 所腾出的 D 位. 表 1 给出了  $\text{Cu}_{50}\text{Mn}_{25+x}\text{Al}_{25-x}$  系列中 6 个不同样品的分子磁

矩的计算值、实验值及 B, D 位 Mn 磁矩的计算值和实验得到的居里温度. 可以看到, 随着 Mn 含量的增加, 样品的分子磁矩单调下降. 在 Mn 含量小于等于 35% 时计算值和实验值十分接近, 二者的差值最大只有  $0.18 \mu_B$ . 这说明计算结果相当可靠. 如果采用

castep 方法,在这个成分范围内,只有  $\text{Cu}_{50}\text{Mn}_{37.5}\text{Al}_{12.5}$  一个成分点可以进行计算.这也说明 KKR-CPA-LDA 方法的确是计算偏分样品磁性,并区别磁性原子占不同位时磁矩的有效方法.

从计算结果可以看出,占了 Al 位的 Mn (即  $\text{Mn}_D$ ) 与占据原位的 Mn ( $\text{Mn}_B$ ) 的磁矩是反铁磁排列的.这与过去报道的穆斯堡尔谱测量结果是一致的<sup>[9]</sup>.而这一点再次验证了 Mn-Mn 交换作用对于距离的敏感性:在不含有 Co 的  $L2_1$  型 Heusler 合金中, Mn-Mn 处在次近邻时(大约 2.975 Å)它们一般都是反铁磁排列的,只有处在第三近邻时(大约 4.200 Å)才呈铁磁排列.表 1 的计算值还表明,在所研究的成分范围之内,  $\text{Mn}_B$  和  $\text{Mn}_D$  的磁矩随着 Mn 含量

的增加,都略有减小.但  $\text{Mn}_D$  与  $\text{Mn}_B$  的磁矩是不相等的,后者总是大于前者约 0.2  $\mu_B$ .这一差别应该源于二者周围环境的不同.两者的最近邻原子都是 Cu,  $\text{Mn}_B$  的次近邻是 Al 原子围成的八面体,而  $\text{Mn}_D$  的次近邻是 Mn 原子八面体.此外,还可以看出,当 Mn 含量大于 35% 时,计算结果与实验值有较大差异,这是由于甩带制备方式使得原子占位出现较大的混乱,有更多的 Mn 占到了 D 位上,使得磁化强度急剧下降.如果计算一下实验值中分子磁矩随 Mn 含量的变化,其变化率达到  $-4.04\mu_B/\text{Mn atom}$ .这个数值大于  $\text{Mn}_D$  的磁矩,也说明了一些本应占据 B 位的 Mn 原子,错占位到 D 位,加强了反铁磁作用从而使分子磁矩降低.

表 2  $\text{Co}_{50}\text{Mn}_{25+x}\text{Al}_{25-x}$  系列分子磁矩的计算值、实验值及 Mn 和 Co 磁矩的计算值和居里温度

成分	分子磁矩	分子磁矩	Mn 磁矩	Co 磁矩	$T_c$
	实验值/ $\mu_B$	计算值/ $\mu_B$	计算值/ $\mu_B$	计算值/ $\mu_B$	实验值/K
$\text{Co}_2\text{MnAl}$	3.9900	4.1152	3.0212	0.6195	656
$\text{Co}_{50}\text{Mn}_{30}\text{Al}_{20}$	5.0840	4.8743	2.9593	0.7319	674
$\text{Co}_{50}\text{Mn}_{35}\text{Al}_{15}$	5.5628	5.6833	2.9644	0.8325	699
$\text{Co}_{50}\text{Mn}_{37}\text{Al}_{13}$ (ribbon)	6.3352	5.9853	2.9085	0.8971	

表 2 给出了  $\text{Co}_{50}\text{Mn}_{25+x}\text{Al}_{25-x}$  系列中 4 个不同样品的分子磁矩的计算值、实验值及 Mn 和 Co 磁矩的计算值和实验得到的居里温度.  $\text{Co}_2\text{MnAl}$  与  $\text{Cu}_2\text{MnAl}$  结构不一样,它是典型的 B2 结构.其中 Co 占据 A, C 位,而 Mn, Al 随机地占据 B, D 位<sup>[8]</sup>.当用增加的 Mn 取代 Al (Mn 含量大于 25%), Mn, Al 依然是随机占据 B, D 位.因此,表 2 中给出的 Mn 磁矩计算值是不区分 B, D 位的.我们曾假设 Mn 原子按照  $L2_1$  结构严格占位,分别计算 B, D 位上 Mn 原子的磁矩,发现此时占据 B, D 位的 Mn 磁矩几乎是相同的,数值相差在 0.01  $\mu_B$  数量级.从表 2 可以看出,计算值比实验值偏小一些,但是与实验值的偏差保持在 6% 以内,所以计算结果仍然是可信的.从计算结果可以看出,由于有了 Co 的存在,增加的 Mn 同原有的 Mn 是铁磁排列的,这与前人的工作是一致的,Co 的存在可以使增加的 Mn 磁矩与原有的 Mn 磁矩铁磁排列<sup>[9]</sup>.

在正分的  $\text{Co}_2\text{MnAl}$  中用 Mn 取代 Al,由于增加的 Mn 的磁矩与原有的 Mn 磁矩是铁磁排列的,因此,分子磁矩的增加似乎得到了完全的解释.但是,进一步分析表 2 所给出的实验值,我们发现磁矩随 Mn 含量的变化率达到了  $4.06\mu_B/\text{Mn atom}$ ,也就是

说每增加一个 Mn 原子,分子磁矩增加大约 4.06  $\mu_B$ .这似乎意味着新加入的 Mn 的磁矩大于已有的 Mn 的磁矩.这是不合理的,因为在增加 Mn 的过程中, Mn 和 Al 仍然是随机地占据 B, D 位,也就是说,统计地看来,所有 Mn 的周围环境是没有差别的,它们的磁矩也就不应当有差别.但是为什么分子磁矩随 Mn 含量的变化率 ( $4.06\mu_B/\text{Mn atom}$ ) 却远大于  $\text{Co}_2\text{MnAl}$  中 Mn 的磁矩 ( $3.02\mu_B$ , 见表 2) 呢? 可能的解释就是 Co 的磁矩随 Mn 含量的增加也在逐步增大.我们的计算结果证实了这一点:当 Mn 增加时, Mn 的磁矩基本保持不变而 Co 的磁矩却在逐步增大,并且每增加一个 Mn 原子, Co 原子的磁矩增大大约 0.02  $\mu_B$ .所以对分子式为  $\text{Co}_{50}\text{Mn}_{25+x}\text{Al}_{25-x}$  的合金,每增加一个 Mn 原子,所有 Co 原子的总磁矩贡献就增加 1  $\mu_B$ ,再加上添加的 Mn 原子本身的磁矩 (约 3  $\mu_B$ ),就得到了  $4.06\mu_B/\text{Mn atom}$  的比率.以上分析表明,在 Heusler 合金  $\text{CoMnAl}$  中, Co 的磁矩并非一直不变,而是随着 Mn 原子磁矩的增大而增大的.其分子磁矩的增大,并不仅仅是由于 Mn 原子数目增多,也来源于 Co 原子磁矩的增大.而这个结论是以往的实验和计算工作都没有报道过的.表 2 中还给出了居里温度  $T_c$  的变化情况,可以发现  $T_c$

随着 Mn 含量的增加也在逐步升高. 而  $T_c$  的高低反映着交换作用的强弱, 这说明 Co-Mn 之间的交换作用因 Mn 含量的增加而加强了. 以上分析说明, 过去观察到的, 添加 Co 提高磁性形状记忆合金母相磁性的现象, 并非仅仅来源于添加的 Co. 事实是, Co-Mn 间交换作用的增强, 也包含了样品中增加的 Mn 的贡献.

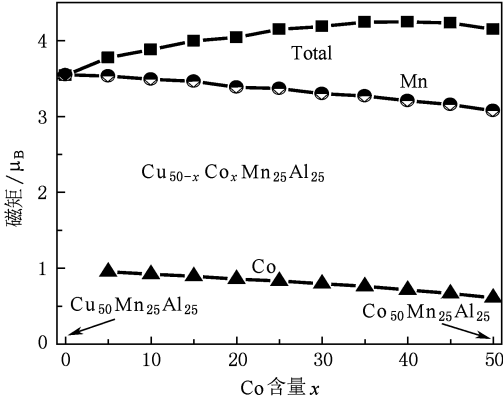


图2  $\text{Cu}_{50-x}\text{Co}_x\text{Mn}_{25}\text{Al}_{25}$  分子磁矩及 Co, Mn 磁矩随 Co 含量变化的计算值

图2给出了  $\text{Cu}_{50-x}\text{Co}_x\text{Mn}_{25}\text{Al}_{25}$  分子磁矩以及 Mn 和 Co 原子磁矩的计算值. 两端的合金, 即  $\text{Cu}_{50}\text{Mn}_{25}\text{Al}_{25}$  和  $\text{Co}_{50}\text{Mn}_{25}\text{Al}_{25}$  的计算结果与实验测量的结果是一致的. 从表1和表2中可以知道, 在这两种化合物中, Mn 的磁矩分别是  $3.55$  和  $3.02 \mu_B$ . 这意味着, Mn 的磁矩随着 Co 含量的增加, 是逐渐减小的, 这与图2中 Mn 磁矩的计算结果是一致的. 计算发现, 四元合金的分子磁矩随 Co 的增加在非常接近  $\text{Co}_2\text{MnAl}$  ( $\text{Cu}_{10}\text{Co}_{40}\text{Mn}_{25}\text{Al}_{25}$ ) 前一直是单调增加的, 只是在最后一个小范围内略有下降. 这个结果似乎比较难以理解. 这可能是因为 CPA 计算只能模拟 B, D 位被完全随机占据的情况, 而实际材料中的情况可能并非如此. 计算结果指出, 随着 Co 含量的增加, Co 的磁矩随着 Mn 磁矩减小而减小. 这是上述  $\text{Co}_{50}\text{Mn}_{25+x}\text{Al}_{25-x}$  系列中所得出的 Co 磁矩随着 Mn 磁矩增大而增大现象的反证. 这再次证明, Mn 的磁矩的大小影响着单个 Co 的磁矩. 它们是正相关的.

传统观点认为, Mn3d 电子的局域性使得 Mn 具

有整数磁矩, 并且只随主族元素种类变化而变化, 而不过渡金属原子的影响. 此外, 还认为 Co 和 Fe 的磁矩在成分变化时变化不大. 但实际情况并非如此. 假如 Co 和 Fe 的磁矩在 Heusler 合金中是不变的, 则因为 Co 和 Fe 的原子磁矩是不同的 (单质中分别约为  $1.6$  和  $2.2 \mu_B$ ),  $\text{Co}_2\text{FeGa}$  和  $\text{Fe}_2\text{CoGa}$  的磁矩应该有很大差别. 但实际的情况是, 二者具有接近的磁矩  $5.035 \mu_B$ <sup>[10]</sup> 和  $5.09 \mu_B$ <sup>[11]</sup>. 这意味着在这两种合金中, Co 和 Fe 的磁矩是会变化的. 而本工作采用了 KKR-CPA-LDA 方法, 能够在在一个相对小的成分范围内, 计算各种不同成分的合金磁性. 这样的计算结果经过与实验结果对比, 在更高的可信度的基础上, 揭示了 Mn 原子局域的 3d 磁矩和其他过渡金属磁性原子的磁矩以及它们的相互作用随成分变化的某些规律. 并由此初步推断, Co-Mn 间的交换作用是由二者共同加强的.

## 4. 结 论

为了便于研究 Heusler 合金中 Co-Mn 间的交换作用, 选择了仅有一种磁性原子的  $\text{CuMnAl}$  和在富 Mn 时仍保持铁磁性的  $\text{CoMnAl}$ , 以及它们的中间合金  $\text{CuCoMnAl}$  三种合金作为研究对象, 采用 KKR-CPA-LDA 方法小步幅地计算了  $\text{Cu}_{50}\text{Mn}_{25+x}\text{Al}_{25-x}$  和  $\text{Co}_{50}\text{Mn}_{25+x}\text{Al}_{25-x}$  及其四元合金  $\text{Cu}_{50-x}\text{Co}_x\text{Mn}_{25}\text{Al}_{25}$  的磁结构. 通过与实验结果对比, 揭示了 Mn 的磁矩和 Co 的磁矩以及它们的相互作用随成分变化的规律: 1) 在  $\text{Cu}_{50}\text{Mn}_{25+x}\text{Al}_{25-x}$  合金中,  $\text{Mn}_D$  是反铁磁的, 并且由于近邻环境的不同, 它的磁矩大于  $\text{Mn}_B$  的磁矩; 2) 在  $\text{Co}_{50}\text{Mn}_{25+x}\text{Al}_{25-x}$  合金中, 随着 Mn 含量的增大, Mn 原子的磁矩保持不变而 Co 原子的磁矩逐步增大, 并且 Co-Mn 间的交换作用因富 Mn 而增强; 3) 在  $\text{Cu}_{50-x}\text{Co}_x\text{Mn}_{25}\text{Al}_{25}$  合金中, 随着 Co 含量的增大, Mn 磁矩的减小引起了 Co 磁矩的减小. 这与 2) 的结果一同说明 Co 的原子磁矩会受到 Mn 磁矩的影响, 两者磁矩是正相关的. 由此可以推论 Co-Mn 交换作用在这种正相关作用下的增强. 研究结果说明, Co 添加导致的磁性形状记忆合金母相磁性的提高, 并非仅仅来源于 Co, Mn 原子也有其贡献.

- [1] Yu S Y, Ma L, Liu G D, Liu Z H, Chen J L, Cao Z X, Wu G H 2007 *Appl. Phys. Lett.* **90** 242501
- [2] Yu S Y, Cao Z X, Ma L, Liu G D, Chen J L, Wu G H 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 102507
- [3] Kainuma R, Imano Y, Ito W, Sutou Y, Morito H, Okamoto S, Kitakami O, Oikawa K, Fujita A, Kanomata T, Ishida K 2006 *Nature*(London) **439** 957
- [4] Ma L, Zhang H W, Yu S Y, Zhu Z Y, Chen J L, Wu G H 2008 *Appl. Phys. Lett.* **92** 032509
- [5] Kainuma R, Ito W, Umetsu R Y, Oikawa K, Ishida K 2008 *Appl. Phys. Lett.* **93** 091906
- [6] Ogura M, Akai H 2007 *J. Phys. : Condens. Mat.* **19** 365215
- [7] Kubler J, Williams A R, Sommers C B 1983 *Phys. Rev. B* **28** 1745
- [8] Webster P J 1969 *Contemp. Phys.* **10** 559
- [9] Khoi L D, Veilleit P, Campbell I A 1978 *J. Phys. F: Met. Phys.* **8** 8
- [10] Zhang M, Bruck E, De Boer F R, Li Z Z, Wu G H 2004 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **37** 2049
- [11] Kulkova S E, Kulkov S S, Subashiev A V 2006 *Comput. Mater. Sci.* **36** 249

## Magnetism research on CuMnAl, CoMnAl and CuCoMnAl alloys by KKR-CPA-LDA calculation \*

Feng Lin<sup>1)</sup> Zhu Zhi-Yong<sup>1)</sup> Zhu Wei<sup>1)</sup> Liu En-Ke<sup>1)</sup> Tang Xiao-Dan<sup>1)</sup> Qian Jin-Feng<sup>1)</sup> Wu Guang-Heng<sup>1)†</sup>  
Meng Fan-Bin<sup>2)</sup> Liu He-Yan<sup>2)</sup> Luo Hong-Zhi<sup>2)</sup> Li Yang-Xian<sup>2)</sup>

1) (Beijing National Laboratory for Condensed Matter Physics, Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

2) (School of Material Science and Engineering, Hebei University of Technology, Tianjin 300130, China)

(Received 19 Novmeber 2009; revised manuscript received 25 December 2009)

### Abstract

Comparing with the experimental data, the composition dependence of atomic moment and Co-Mn exchange interaction in CuMnAl, CoMnAl and CuCoMnAl alloys have been investigated by KKR-CPA-LDA calculation. It has been found that, due to the different surrounding environments, the magnetic moment of excess Mn atom occupying Al sites is larger than that of the original Mn atoms on B sites in  $\text{Cu}_{50}\text{Mn}_{25+x}\text{Al}_{25-x}$  alloys. When the Mn content increases in  $\text{Co}_{50}\text{Mn}_{25+x}\text{Al}_{25-x}$  alloys, the moment of Co atom increases monotonically, while the Mn moment almost has the same value. In  $\text{Cu}_{50-x}\text{Co}_x\text{Mn}_{25}\text{Al}_{25}$  alloys, it has been revealed that the moment of Co decreases resulting from the decrease of the moment of Mn atom with the substitution of Co for Cu. These results indicate that the atomic moments of Mn and Co atoms are positively related. It has also been found that the Co-Mn exchange interaction can be enhanced by increasing Mn content and its strength comes not only from the added Co but also from the contribution of Mn.

**Keywords:** KKR-CPA-LDA calculation, Co-Mn exchange interaction

**PACC:** 7500

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10774178 and 50771103) and Specific Fund of Discipline and Graduate Education Project of Beijing Municipal Commission of Education.

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