

金属磁记忆应变诱导磁性变化的原子尺度作用机理*

王思远¹⁾ 梁添寿¹⁾²⁾ 时朋朋^{1)†}

1) (西安建筑科技大学土木工程学院, 西安 710055)

2) (西安建筑科技大学机电工程学院, 西安 710055)

(2022 年 4 月 19 日收到; 2022 年 5 月 23 日收到修改稿)

基于力磁耦合效应的磁记忆检测技术, 被广泛应用于铁磁性结构件的应力和缺陷检测. 已有研究采用第一性原理针对 α -Fe 体系开展了轴向拉压作用下磁矩变化计算, 初步讨论了原子层面的磁检测技术力磁耦合机理. 本文以 Fe-C 和 Fe-Mn 掺杂体系为例, 在更为复杂的拉伸、压缩和剪切加载情形下, 深入讨论了 α -Fe 材料不同类型原子掺杂体系中磁矩变化等力磁耦合规律机理. 结果表明, α -Fe 和掺杂体系在不同类型应变作用下磁矩和能量的变化规律存在不同. 结合态密度、能带结构和原子磁矩的详细分析, 发现掺杂元素通过影响 Fe 原子的磁矩, 使掺杂体系能带结构的形貌和态密度的峰值发生改变, 进而导致掺杂体系的磁矩和能量变化规律存在差异. 本研究从原子层面考虑了铁磁材料在不同荷载类型、不同掺杂元素和含量下的力磁耦合效应, 是磁记忆检测中多场耦合物理机理的重要补充.

关键词: 金属磁记忆, 检测机理, α -Fe 掺杂体系, 应变作用, 磁矩

PACS: 75.80.+q, 51.60.+a, 75.50.Bb, 75.50.Gg

DOI: 10.7498/aps.71.20220745

1 引言

弹性应变工程研究受到广泛应用, 这是由于应力应变对力学性能^[1]、材料属性^[2]和电磁特性^[3]等特征存在重要影响. 随着材料建模方法和计算科学的发展, 基于密度泛函理论 (DFT)^[4]的第一性原理计算方法成为了材料设计、合成、模拟计算和评价等的重要研究方法^[5–8]. 由于晶体结构、系统能量和电子自旋密度分布与原子磁矩等材料磁性密切相关, 第一性原理计算可用于分析原子尺度的应力应变对磁性的作用规律, 这对力磁作用相关的弹性应变工程技术提供了新的研究角度和手段.

一些弹性应变工程的实现是利用了材料中的

力磁耦合效应^[9,10]. 力磁耦合效应是应力引起的磁导率变化导致铁磁材料表面磁感应强度发生改变的现象^[10–12]. 磁致伸缩效应的观察可以追溯到 1842 年, 重点讨论外加磁场引起的材料机械响应^[13]. 此外, 学者们对通过应力调节材料磁性产生极大兴趣^[14–16]. 学者 Doubrov 等提出了金属磁记忆 (MMM) 无损检测技术, 可用于检测铁磁结构中的应力集中和缺陷^[17–21]. MMM 检测技术的原理为铁磁材料的力磁耦合效应^[22,23]. 近年来, 一些学者通过第一性原理计算外载荷作用下的电子密度分布, 以研究应力-应变对铁磁材料磁性的影响, 解释磁记忆效应产生的微观机制. Yang 等^[24]研究了原子磁矩与压力的关系, 发现当压力增大时, 自旋极化体系中原子磁矩线性减小, 并针对晶胞受压和受拉

* 国家自然科学基金 (批准号: 11802225)、陕西省自然科学基金 (批准号: 2021JQ-494) 和中国博士后科学基金 (批准号: 2019M663935XB) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: shipengpeng@xjtu.edu.cn

两种情形^[25]计算了 α -Fe 晶体磁性能与应变之间的定量关系. 值得注意的是, 上述提到的磁检测技术相关的第一性原理分析仅考虑了 α -Fe 体系轴向应变作用导致的原子磁矩变化机理. 考虑到实际工程中存在不同的材料类型, 如硅钢、碳钢、锰钢等. 不同原子类型和含量下的力磁耦合机制存在差异, 相关研究对深入理解不同材料磁检测规律的差异至关重要. 拉伸、压缩和剪切等不同荷载类型下力磁耦合效应的差异也是一个值得关注的问题.

为了阐明原子层面的力磁耦合关系, 本文以 Fe-C 和 Fe-Mn 掺杂体系为例, 在更为复杂的拉伸、压缩和剪切加载情形下, 研究了金属磁记忆应变诱导磁性变化的原子尺度作用机理. 计算了 α -Fe 和掺杂 C, Mn 元素的掺杂体系在拉伸、压缩和剪切应变作用下的磁矩和能量, 发现不同体系的磁矩和能量随应变表现出差异, 同时从态密度图、能带结构图和原子磁矩三个方面分析不同体系间的磁特性存在差异的原因.

2 模型建立和计算方法

这里采用基于密度泛函 (DFT) 的第一性原理计算从原子尺度揭示应力应变对体系磁性作用机理和规律. 本文采用基于平面波的 DFT 计算方法,

该方法广泛应用于结构磁特性的计算^[26,27]. 通过平面波来展开晶体波函数, 并用赝势方法作有效的近似处理, 基于密度泛函理论的 PW-PP 方法^[28]可以方便地对大范围体系的基态属性进行有效精确计算^[29]. 本文计算采用 CASTEP 程序包^[30], 其中交换关联泛函采用的是广义梯度近似下的 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 泛函^[31]. 首先通过优化截断能量取值和 k 点选取, 获取合适的计算参数确保计算的收敛性, 详细的收敛性测试见附录中的图 A1. 根据优化结果, 本文采用平面波截断能量 480 eV, 布里渊区采样 k 点网格为 $6 \times 6 \times 6$, 能量计算精度达到 0.01 eV/atom. 利用上述参数, 对单胞晶格进行优化, 获得的磁矩为 $2.17 \mu_B$. 从理论计算结果来看, 本文的计算结果与文献^[25]和文献^[34]报道的理论计算结果 $2.17 \mu_B$ 一致. 此外, 文献^[35]和文献^[36]报道的实验测量值分别为 $2.22 \mu_B$ 和 $2.12 \mu_B$. 由此可知, 理论计算结果在实验测量误差范围内. 在基态单胞基础上建立了 α -Fe(BCC) $2 \times 2 \times 2$ 超胞结构, 图 1(a) 给出超胞受到拉伸、压缩和剪切应变作用下的计算模型示意图. 其中, 拉伸和压缩应变为变化后的晶格长度与初始晶格常数的比值; 对于剪切应变加载, 应变大小表示为剪切夹角 γ .

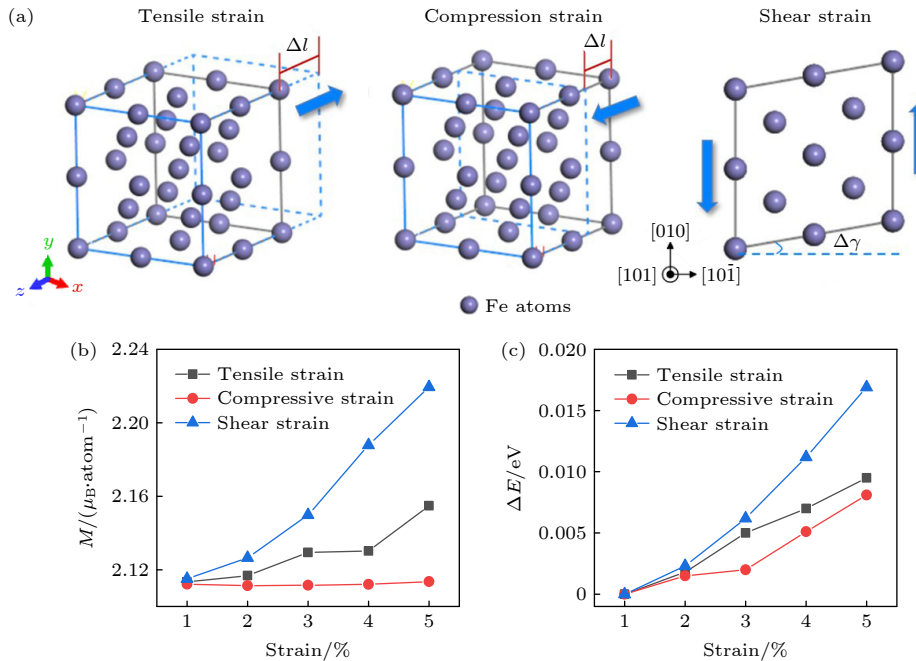


图 1 拉伸、压缩和剪切作用引起的 α -Fe 磁矩 (M) 和能量增量 (ΔE) 的变化图 (a) α -Fe 的 $2 \times 2 \times 2$ 超胞在拉伸、压缩和剪切应变作用下的计算模型; (b) 磁矩变化; (c) 能量增量

Fig. 1. Variation of α -Fe magnetic moment (M) and energy increment (ΔE) induced by tension, compression and shear strain: (a) Model of α -Fe $2 \times 2 \times 2$ supercell under tensile, compressive and shear strain; (b) Change of magnetic moment; (c) Increment of energy.

图 1(b) 和图 1(c) 给出了晶胞磁矩和能量随拉伸、压缩和剪切三种应变加载的变化规律, 其中能量的相关解释见附录 A. 总体上, α -Fe 超胞的磁矩和能量均随应变的增大而增大, 但变化趋势和程度存在差异. 剪应变作用下变化值分别为 $0.1045 \mu_B$ 和 0.0169 eV , 拉应变作用下变化值分别为 $0.04162 \mu_B$ 和 0.0095 eV , 压应变作用下变化值分别为 $0.00136 \mu_B$ 和 0.0081 eV . 由此可知, 剪应变作用对 α -Fe 磁矩和能量的影响最大, 拉伸作用次之, 而压缩作用最小. 参见附录中的表 A3, 本文计算的磁矩变化与文献 [25] 的相关结果保持一致.

3 结果讨论

3.1 应变作用下掺杂体系磁特性

这里对比讨论了掺杂元素 C 和 Mn 对 α -Fe

体系磁特性的影响. 图 2(a) 给出了在 α -Fe 超晶胞结构基础上构建的 Fe-C 和 Fe-Mn 两种掺杂体系模型示意图. 此处考虑了采用 C 或 Mn 原子替换位于超晶胞中心 Fe 原子和关于中心对称的两个 Fe 原子的不同替换方式. 计算得到 Fe-C(1), Fe-C(2) 和 Fe-Mn 晶格常数分别为 2.8145 , 2.7907 和 2.8323 \AA , 对于不同 C 含量的掺杂, Fe-C(2) 的晶格常数为 2.7907 \AA , 小于 Fe-C(1) 的 2.8145 \AA . 图 2(b) 分析了计算得到的拉伸、压缩和剪切三种应变加载情形下, 掺杂体系能量增量随应变加载的变化规律, 详细的计算结果见附录表 A4. 对于三种不同类型的应变加载, 掺杂体系的能量均随着应变的增加而增加. 拉伸应变加载下, Fe-C(2) 体系的能量明显增加, 变化值为 0.0186 eV , 而 Fe-Mn 体系的能量略有增加, 变化值为 0.0095 eV . 在压缩应变

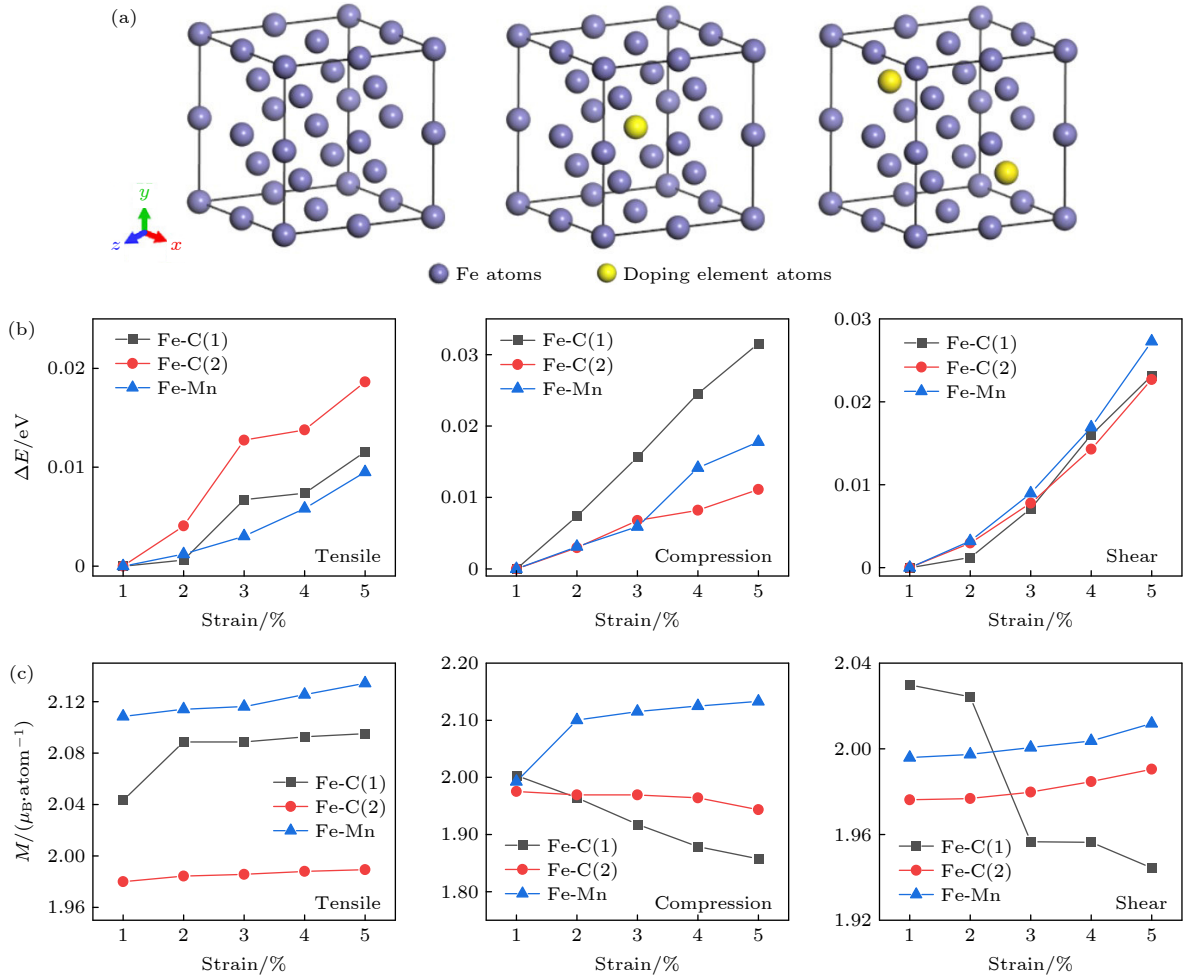


图 2 掺杂元素对 α -Fe 体系磁特性的影响 (a) $2 \times 2 \times 2$ 超晶胞及掺杂 1 个或 2 个原子的掺杂体系模型; (b) 不同类型应变作用下的能量增量 ΔE ; (c) 不同类型应变作用下磁矩 M 的变化

Fig. 2. Effect of doping elements on magnetic properties of the α -Fe system: (a) $2 \times 2 \times 2$ supercell structure and supercell structure doped with one or two atoms; (b) Energy increments (ΔE) under different types of strain; (c) Change of magnetic moment under different types of strain.

加载下, Fe-C(1) 体系的能量随着应变的增加而迅速增加. 由于剪切应变作用下的晶格形状相较于拉伸和压缩应变作用下有明显改变, 因此剪切应变下掺杂体系的能量变化明显且变化值在 0.0227—0.0273 eV 之间. 图 2(c) 计算了 Fe-C 和 Fe-Mn 掺杂体系在不同类型应变作用下的磁矩变化规律, 这可以作为铁磁材料磁性的重要参数之一, 详细的计算结果见附录表 A5. Fe-Mn 体系的磁矩在不同应变作用下均随应变增加而增加, 但 Fe-C 体系却表现出不同的趋势, 不同应变作用下, 与 Fe-C(2) 相比 Fe-C(1) 磁矩变化较为明显. Fe-C(1) 的磁矩随拉应变增加而增加, 当拉应变达到 2% 时其增长趋于平缓, 但在压缩和剪切应变作用下其磁矩有明显下降的趋势. 在拉伸和剪切应变作用下, Fe-C(2) 体系磁矩随应变增加而增加, 但在压应变作用下有小幅下降, 变化量仅为 $0.03 \mu_B$. 从图 2(c) 可以看出, Fe-C 和 Fe-Mn 体系在应变作用下的磁矩变化规律存在差异.

3.2 能带结构和态密度

为了揭示 α -Fe 与掺杂体系磁矩产生差异的原因, 本文基于平衡结构计算了掺杂体系布里渊区 (BZ) 沿高对称线的能带结构和态密度 (DOS), 布里渊区路径为 $\Gamma(0, 0, 0) - F(0, 1/2, 0) - Q(0, 1/2, 1/2) - Z(0, 0, 1/2) - \Gamma(0, 0, 0)$. 详细的掺杂体系能带结构见附录图 A3. 掺杂 C 和 Mn 元素后能带结构有了显著改变, 同时费米能级附近的导带和价带相交, 这意味着掺杂 C 和 Mn 元素后体系仍保持金属性. 在此基础上进一步比较了 α -Fe 初始状态和施加三

种不同类型应变加载后的能带结构, 揭示了晶体中电子运动的特征. 从图 3 中的能带结构可知, α -Fe 初始状态以及施加应变后的能带结构在费米能级附近 (红色虚线) 的导带和价带相交, 电子可以无障碍地达到导带, 形成导电能力并表现出明显的金属性. 图 3(a) 和图 3(b) 比较了应变前后 α -Fe 的能带结构, 应变会使能带结构发生改变, 但不同类型应变加载对其影响较小, 如图 3(b)—(d) 所示.

为揭示能量上不稳定的潜在机制, 分析了掺杂体系的电子态密度. 能量 E 在 $E - (E + \Delta E)$ 范围内的电子能态数目为 ΔZ , 则能态密度为

$$N(E) = \lim_{\Delta E \rightarrow 0} \frac{\Delta Z}{\Delta E}, \quad (1)$$

其中 $N(E)$ 为能态密度 (或态密度) 以及 ΔE 为能量的变化量. 能态密度描述了电子态的能量分布, 由态密度的定义式 (1) 可推出, 第 n 个能带的态密度 $N_n(E)$ 为

$$N_n(E) = \frac{N\Omega}{4\pi^3} \int dk \delta[E - E_n(k)], \quad (2)$$

式中 Ω 为原胞体积, N 为晶体中原胞总数, $E_n(k)$ 为等能面, 在布里渊区内进行积分. 态密度总和 $N(E)$ 为所有能带的态密度之和, 即

$$N(E) = \sum_n N_n(E) = \frac{N\Omega}{4\pi^3} \int_{S_E} \frac{dS}{\nabla_k E(k)}, \quad (3)$$

在 S_E 上进行积分, $N\Omega$ 为晶体体积, dS 为面积元, $\nabla_k E(k)$ 是 $E_n(k)$ 的梯度. 基于 (3) 式, 可以得到拉伸、压缩和剪切应变加载过程中掺杂体系的 DOS 变化.

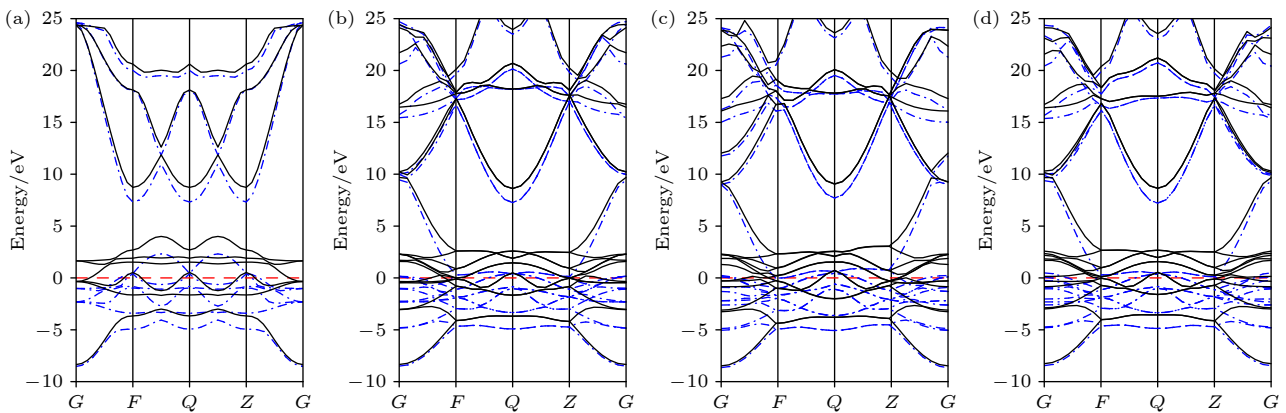


图 3 拉伸、压缩和剪切应变作用下 α -Fe 的能带结构图 (a) 初始状态; (b) 5% 拉应变; (c) 5% 压应变; (d) 5% 剪应变

Fig. 3. Band structure diagram of α -Fe under tensile, compression and shear strain: (a) Initial state; (b) 5% tensile strain; (c) 5% compressive strain; (d) 5% shear strain.

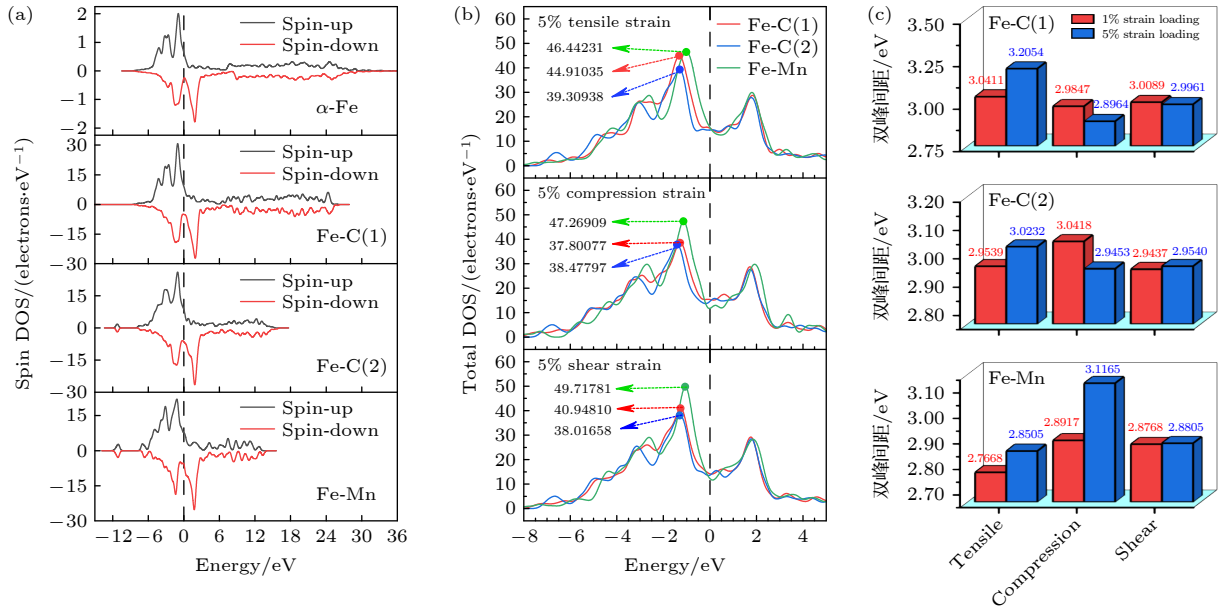


图 4 电子态密度图 (a) 不同体系自旋态密度; (b) 不同类型应变对掺杂体系 DOS 峰值的影响; (c) 不同类型应变加载对掺杂体系双峰间距的影响

Fig. 4. The density of states diagram: (a) Spin DOS of different systems; (b) Effects of different types of strain on DOS peaks of doping systems; (c) Effects of different types of strain loading on the spacing of double peaks in doping systems.

图 4(a) 给出了掺杂 C 和 Mn 两种自旋电子的自旋态密度分布, 在费米能级附近电子自旋态密度的分布相似, 说明磁性行为相似, 结果表明掺杂 C 和 Mn 元素后的掺杂体系仍然保留铁磁性. 本文也研究了掺杂 C 和 Mn 原子各轨道对总态密度的贡献, d, s 和 p 三个轨道电子分波态密度 (PDOS) 的分析结果见附录图 A4. 掺杂体系中 Fe 原子的 d 轨道电子 PDOS 与体系总自旋态密度最为相似, 且态密度曲线的自旋向上态与自旋向下态在费米能级附近劈裂状态显著, 说明 Fe 原子的 d 轨道电子对掺杂体系的磁性贡献最大, 在力磁耦合关系中起主要作用. 掺杂的 C 原子 s 和 p 轨道电子分波态密度曲线峰值较小, 态密度曲线的自旋向上态与自旋向下态在费米能级附近劈裂状态不显著, 说明 C 原子不显磁性且对体系总自旋态密度贡献较小. 特别地, 掺杂的 Mn 原子 d 轨道电子分波态密度在费米能级表现出不对称性, Mn 原子表现出磁性同时对总自旋态密度有一定的贡献. 这也解释了 Fe-Mn 体系的磁矩大于 Fe-C 体系的磁矩. 图 4(b) 讨论了拉伸、压缩和剪切应变加载对掺杂体系总 DOS 峰值的影响. 费米能级附近峰值的大小存在明显差异, 特别是剪切应变作用下 Fe-Mn 体系峰值 49.71781 eV 与 Fe-C(2) 体系峰值 38.01658 eV 相差 11.70123 eV. 观察到拉伸、压缩和剪切作用

下 Fe-Mn, Fe-C(1) 和 Fe-C(2) 在费米能级附近的峰值依次减小, DOS 的峰值越高表明此区域中电子数量越高其磁性越高, 这解释了掺杂体系的磁矩 $\text{Fe-Mn} > \text{Fe-C(1)} > \text{Fe-C(2)}$.

图 4(c) 统计了拉伸、压缩和剪切应变加载过程中 Fe-C 和 Fe-Mn 体系在费米能级附近两个主峰的间距. 随着应变的不断增大 Fe-C 和 Fe-Mn 体系在费米能级附近两个主峰的间距表现出明显差异, 计算结果见图 A5, Fe-C 和 Fe-Mn 体系的上下自旋电子的态密度在费米能级附近均存在峰值很大的尖峰且呈劈裂状态, 两个主峰分离较大说明掺杂体系在应变加载过程中仍表现出较强磁性. 图 4(c) 显示, 对于 Fe-C(1) 体系, 压缩应变作用下两个峰的间距从 2.9847 eV 减小到 2.8964 eV, 剪切应变作用下两个峰的间距从 3.0089 eV 减小到 2.9961 eV, 拉伸应变则表现出截然相反的变化, 两个峰的间距从 3.0411 eV 增大到 3.2054 eV. 电子分布向费米能级靠近, 轨道电子局域性增强的同时系统磁性减弱, 最终表现为压缩和剪切应变作用下磁矩的不断减小, 拉应变与之相反则表现为磁矩随应变不断增加. Fe-C(2) 和 Fe-Mn 体系在费米能级附近两个主峰的间距变化规律与磁矩变化保持一致. 计算表明费米能级附近不同的电子分布是导致 Fe-C 和 Fe-Mn 体系的磁矩随应变表现出差异的原因.

3.3 掺杂原子对总磁矩改变的贡献

不同应变加载方式可以调节掺杂元素对体系磁性能的影响, 这里比较了原子磁矩和总磁矩的变化趋势, 结果如图 5 所示. 对于拉伸、压缩和剪切应变加载, Fe 原子与总磁矩的变化趋势一致, 表明整个体系的磁矩以 Fe 原子为主要贡献. 对于 Fe-C 体系, C 的原子磁矩随着应变的增大发生小幅的减小, 总磁矩变化是由于掺杂的 C 元素影响 Fe 的原子磁矩, 进而使总磁矩发生改变. 随着 C 元素含量的增多, Fe-C(2) 体系中 C 的原子磁矩相较于 Fe-C(1) 进一步减小, 这是导致 Fe-C(1) 和 Fe-C(2) 在应变作用下, 其磁矩变化产生差异的原因. 特别地, Fe-Mn 体系中 Mn 的原子磁矩数值相较于 Fe-C 体系中 C 的原子磁矩较大, Mn 的原子磁矩在应变作用下表现出与总磁矩截然相反的变化趋势. 掺杂的 C 原子 s 和 p 轨道电子分波态密度的自旋向上态与自旋向下态在费米能级附近的分布劈裂不显著, 掺杂元素 C 的 p 轨道电子对体系总自旋态密度有微弱贡献. 与之相反的是掺杂 Mn

的 p 轨道和 d 轨道在费米能级附近的分布具有明显的劈裂, 说明 Mn 的 d 轨道电子对体系的磁性有贡献, 如附录图 A4 所示. 这里, 从分波态密度的角度解释了 Fe-Mn 体系中 Mn 的原子磁矩数值大于 Fe-C 体系中 C 的原子磁矩.

随着应变的增大, Fe-Mn 体系总磁矩随着 Mn 原子磁矩的减小而增大, 明显区别于 Fe-C 体系中 C 元素对总磁矩的影响方式, 这意味着 Mn 掺杂原子的存在影响了体系的态密度, 使 Fe-Mn 体系的磁特性发生改变. 由于不同掺杂元素对总磁矩的作用方式不同, 导致 Fe-C 体系和 Fe-Mn 体系在不同应变作用下磁矩变化规律存在差异. 结合态密度、能带结构和原子磁矩的详细分析发现, 掺杂元素的存在使掺杂体系能带结构的形貌和态密度的峰值发生改变, 也导致掺杂体系的磁矩和能量变化规律存在差异.

4 结 论

本文以 Fe-C 和 Fe-Mn 掺杂体系为例, 深入讨

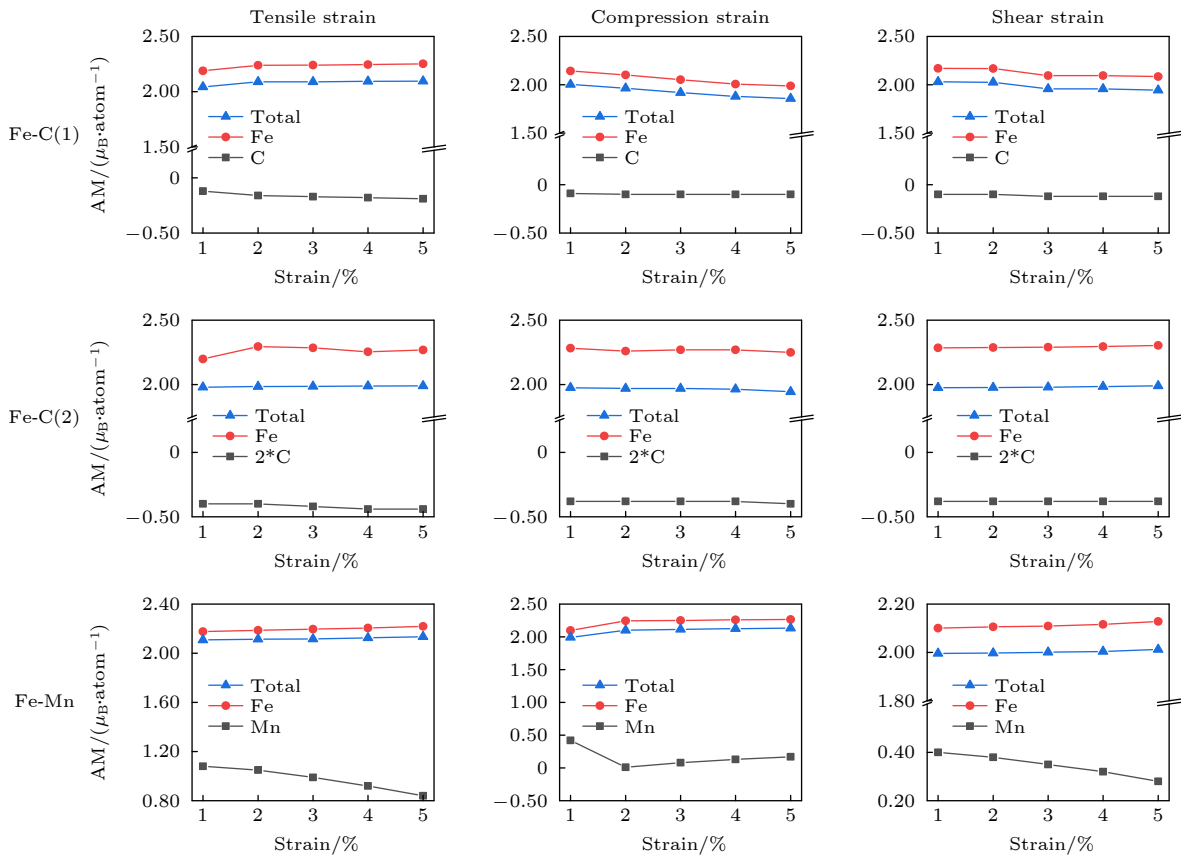


图 5 C 和 Mn 掺杂体系原子磁矩随三种不同应变加载方式 (拉伸、压缩和剪切) 的变化

Fig. 5. Variation of atomic magnetic moment with the three different types of strain loading (Tensile, compression and shear strain) for C- and Mn-doped systems.

论了 α -Fe 材料不同类型原子掺杂体系中磁矩变化等力磁耦合规律机理. 采用密度泛函理论平面波赝势法, 运用 GGA 法从原子层面计算了 α -Fe 及其掺杂 C 和 Mn 两种元素掺杂体系的力磁耦合效应, 分析了拉伸、压缩和剪切三种应变对 Fe-C 和 Fe-Mn 体系磁特性的影响, 得到以下结论:

1) 通过计算 α -Fe 在拉伸、压缩和剪切应变作用下的磁矩和能量变化, 发现在不同类型应变作用下磁矩和能量变化规律存在差异, 其中剪切应变作用对 α -Fe 磁矩和能量的影响最大, 拉伸作用次之, 而压缩作用最小.

2) 讨论了在拉伸、压缩和剪切应变作用下掺杂 C 和 Mn 对铁磁材料磁特性的影响, 对比拉伸、压缩和剪切三种不同应变加载方式, 剪切应变下 Fe-C 和 Fe-Mn 体系的能量变化明显. 相同应变作用下 Fe-C 和 Fe-Mn 体系的能量和磁矩变化规律存在差异, 掺杂 C 和 Mn 元素会对应变诱导磁矩增强产生影响.

3) 结合态密度、能带结构和原子磁矩的详细

分析, 发现掺杂元素的存在使掺杂体系能带结构的形貌和态密度的峰值发生改变, 也导致掺杂体系的磁矩和能量变化规律存在差异.

第一性原理可为微观磁畴动力学提供基础参数, 微观动力学可为宏观磁场信号分析提供非线性磁导率等基本参数, 进而采用宏观磁场有限元分析可为磁信号的定量规律计算提供可能. 本文研究结果从原子层面展示了铁磁材料在不同荷载类型、不同掺杂元素和含量下的力磁耦合效应机理和规律, 是磁记忆检测中多场耦合物理机理的重要补充.

附录 A

CASTEP 处理金属系统使用基于 K-S 方程的密度泛函理论计算晶胞的总能量^[32]:

$$E = E_{\text{KS}} - TS, \quad (\text{A1})$$

其中, E_{KS} 为 Kohn-Sham 能量, T 为 Smearing 温度, S 为 Mermin 熵.

这里给出了超晶胞体系总能量的 CASTEP 计算结果包含: Final energy(E), Final free energy($E - TS$), NB est. 0 K energy

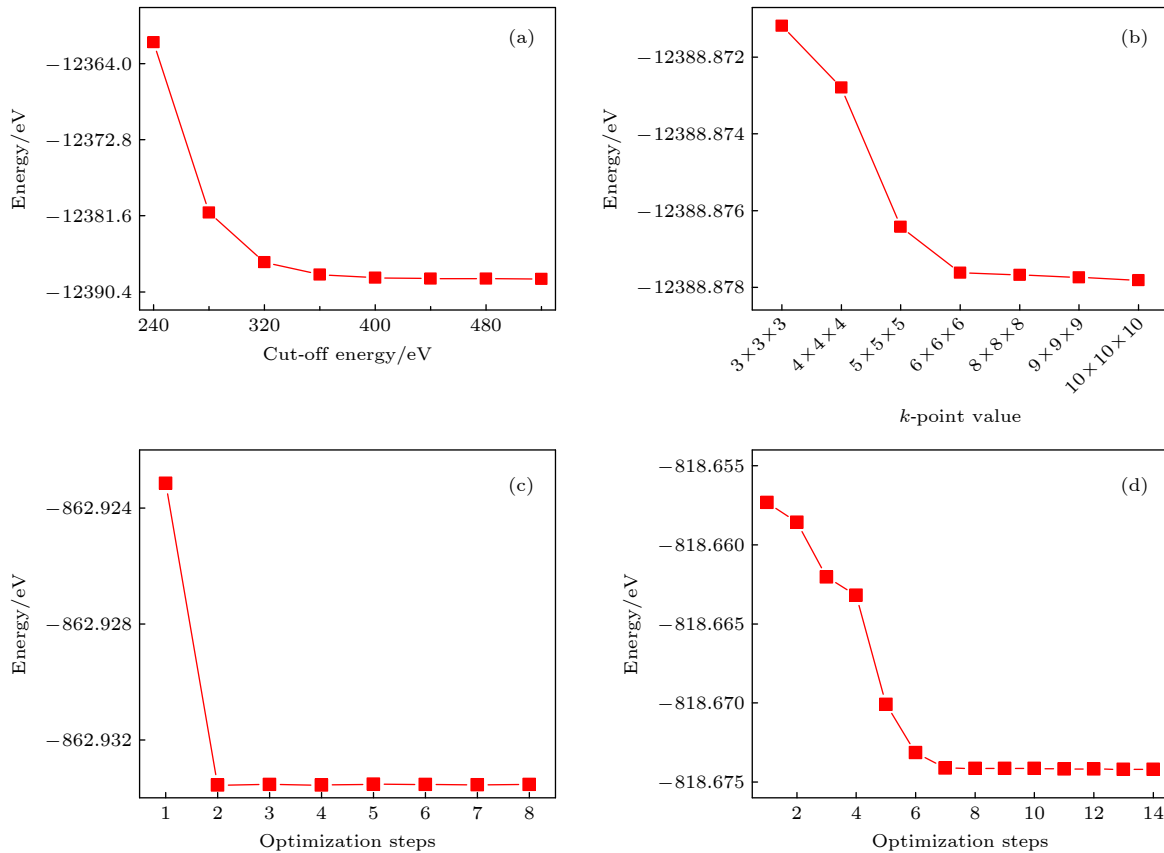


图 A1 收敛性测试 (a) 截断能收敛测试; (b) k 点取值收敛测试; (c) α -Fe 晶胞的能量收敛过程; (d) Fe-C(1) 晶胞的能量收敛过程
Fig. A1. Convergence test: (a) Cut-off energy test; (b) k -point value test; (c) Energy convergence process of α -Fe; (d) Energy convergence process of Fe-C(1).

($E - 0.5 TS$). Final energy (E)为忽略熵的 Kohn-Sham 能量 E_{KS} , Final free energy ($E - TS$)则为考虑温度的自由能. 密度泛函计算中, Kohn-Sham 能量和 S 均对 Smearing 设置存在一阶依赖关系, 所以 NB est. 0 K energy ($E - 0.5 TS$)将 Smearing 引入的熵进行平均考虑获得 $T = 0 K$ 时近似精确的体系总能量. 固体的物理性质与其总能量有着密切的关系, 故本文选择校正形式的 $E - 0.5 TS$ 来获得近似精确的体系总能量.

为了比较自旋极化和非自旋极化两种状态的相对稳定性, 计算了两种状态下掺杂体系的总能量, 定义了自旋极化能 $\Delta E = E_s - E_{ns}$. 其中 E_s 和 E_{ns} 分别为自旋极化状态和非自旋极化状态下掺杂体系的能量. 自旋极化能计算结果如表 A1 所列. 自旋极化态能量较低, 表明系统的自旋极化态比非自旋极化态更稳定.

表 A1 平衡态 α -Fe 及掺杂体系的自旋极化能

Table A1. Spin polarization energy of equilibrium α -Fe (BCC) and doping systems.

Energy state	Fe(bcc)	Fe-C(1)	Fe-C(2)	Fe-Mn
spin-polarized	-862.9295	-818.6694	-774.3459	-987.8903
non-spin-polarized	-862.4899	-818.5050	-774.3104	-987.8903
ΔE	-0.4396	-0.1644	-0.0355	-1×10^{-5}

表 A2 给出了无应变 α -Fe 的晶格常数、原子体积和磁矩的计算结果, 与文献 [34] 结果保持一致, 证明了本文计算过程的正确性. 为了验证模拟过程中能带结构计算方法的正确性, 计算了四方晶系 (TET)SnO₂ 的能带结构, 布里渊区的高对称路径选取为 $\Gamma(0, 0, 0) - X(0, 1/2, 0) - M(1/2,$

$1/2, 0) - \Gamma(0, 0, 0) - Z(0, 0, 1/2) - R(0, 1/2, 1/2) - A(1/2, 1/2, 1/2) - Z(0, 0, 1/2)|X(0, 1/2, 0) - R(0, 1/2, 1/2)|M(1/2, 1/2, 0) - A(1/2, 1/2, 1/2)$. 结果与文献 [33] 一致, 能带结构计算结果见图 A2.

表 A2 平衡态 α -Fe 的晶格常数、原子体积和磁矩
Table A2. The lattice constant, atomic volume, and magnetic moment of equilibrium α -Fe(BCC).

Structural properties of α -Fe (BCC)	Lattice constant/ Å	Atomic volume/ Å ³	Magnetic moment/ ($\mu_B \cdot \text{atom}^{-1}$)
Present results	2.833	11.36	2.17
Reference results	[25] 2.813	11.13	2.17
	[34] 2.83	11.33	2.17
Experimental results	[35] 2.87	11.78	2.22
	[36] 2.866	11.77	2.12

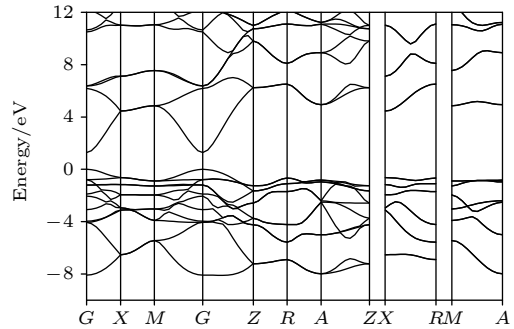


图 A2 SnO₂ 能带结构图

Fig. A2. SnO₂ band structure diagram.

表 A3 不同应变作用下 α -Fe 体系的磁矩和能量变化

Table A3. The magnetic moments and energies of α -Fe under different types of strain.

Strain	Tensile strain		Compressive strain		Shear strain	
	Magnetic moment/ ($\mu_B \cdot \text{atom}^{-1}$)	Energy/ eV	Magnetic moment/ ($\mu_B \cdot \text{atom}^{-1}$)	Energy/ eV	Magnetic moment/ ($\mu_B \cdot \text{atom}^{-1}$)	Energy/ eV
1%	2.1133	-862.9176	2.1121	-862.9178	2.1150	-862.9175
2%	2.1168	-862.9157	2.1114	-862.9163	2.1265	-862.9152
3%	2.1294	-862.9125	2.1116	-862.9157	2.1498	-862.9112
4%	2.1303	-862.9105	2.1121	-862.9126	2.1878	-862.9063
5%	2.1549	-862.9081	2.1135	-862.9097	2.2195	-862.9006

表 A4 三种不同应变加载方式下掺杂体系能量的变化 (eV)

Table A4. Variation of the energy in doping systems under three different types of strain loading (eV).

Strain	Tensile strain			Compressive strain			Shear strain		
	Fe-C(1)	Fe-C(2)	Fe-Mn	Fe-C(1)	Fe-C(2)	Fe-Mn	Fe-C(1)	Fe-C(2)	Fe-Mn
1%	-818.5083	-774.3584	-987.8857	-818.5039	-774.3536	-987.9533	-818.5257	-774.3450	-987.9536
2%	-818.5077	-774.3543	-987.8845	-818.4965	-774.3507	-987.9679	-818.5245	-774.3420	-987.9504
3%	-818.5016	-774.3457	-987.8827	-818.4882	-774.3469	-987.9711	-818.5186	-774.3372	-987.9446
4%	-818.5009	-774.3446	-987.8799	-818.4794	-774.3454	-987.9652	-818.5097	-774.3307	-987.9367
5%	-818.4967	-774.3398	-987.8762	-818.4723	-774.3425	-987.9569	-818.5026	-774.3223	-987.9267

表 A5 不同应变作用下掺杂体系的磁矩变化

Table A5. Variation of the total magnetic moment of doping systems under different strain states (μ_B).

Strain	Tensile strain			Compressive strain			Shear strain		
	Fe-C(1)	Fe-C(2)	Fe-Mn	Fe-C(1)	Fe-C(2)	Fe-Mn	Fe-C(1)	Fe-C(2)	Fe-Mn
1%	2.0433	1.9800	2.1084	2.0031	1.9753	1.9925	2.0299	1.9762	1.9959
2%	2.0887	1.9843	2.1142	1.9645	1.9693	2.1004	2.0242	1.9768	1.9974
3%	2.0887	1.9856	2.1226	1.9175	1.9694	2.1152	1.9566	1.9798	2.0006
4%	2.0927	1.9880	2.1255	1.8791	1.9642	2.1248	1.9564	1.9847	2.0037
5%	2.0952	1.9894	2.1343	1.8573	1.9436	2.1327	1.9444	1.9905	2.0118

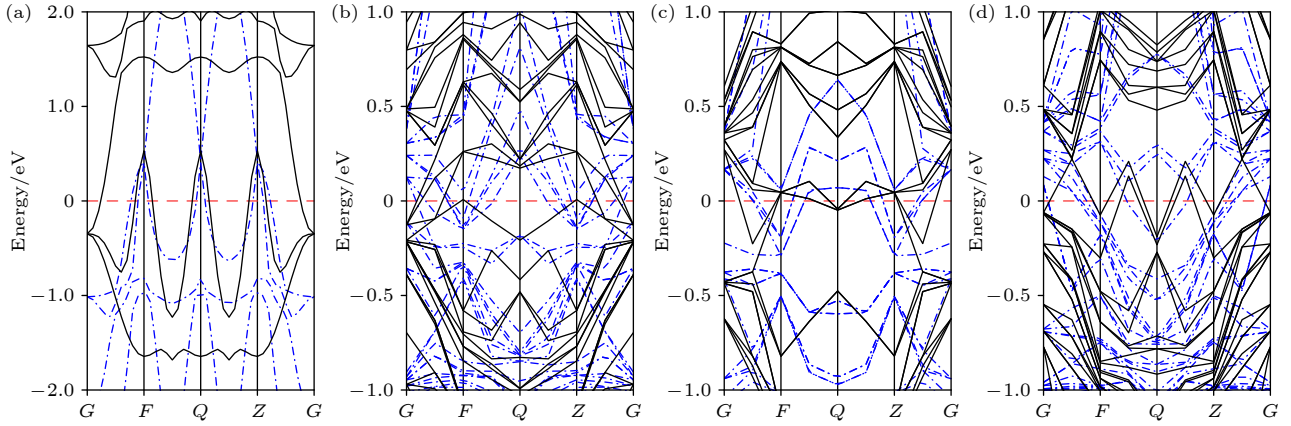
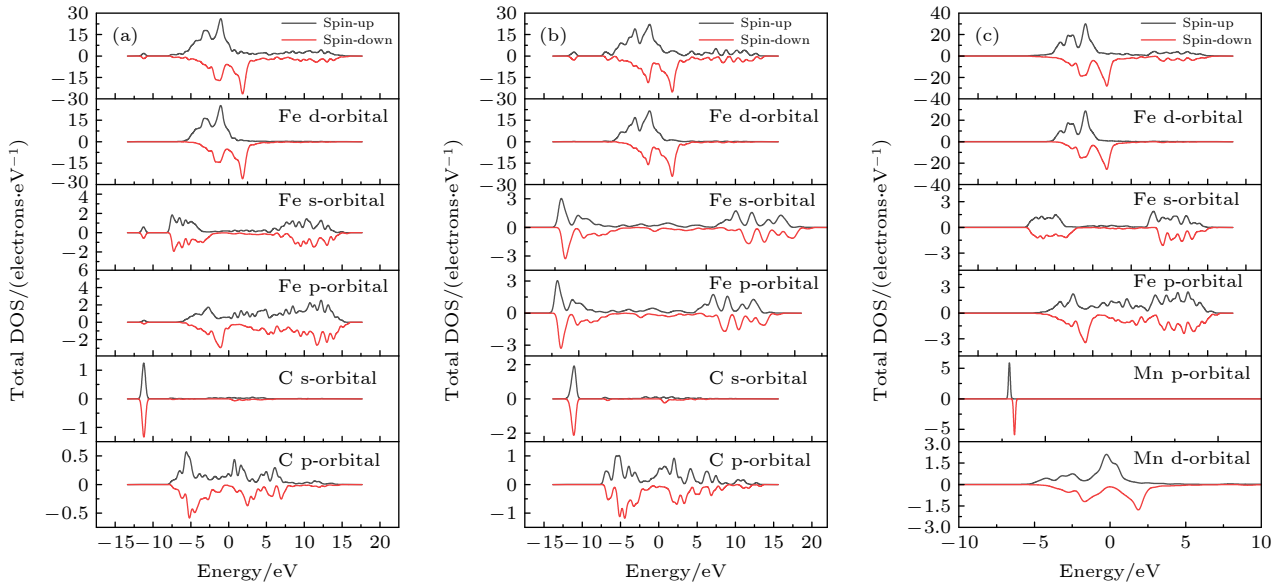
图 A3 无应变作用下 α -Fe 及其 Fe-C 和 Fe-Mn 掺杂体系的能带结构 (a) α -Fe; (b) Fe-C(1); (c) Fe-C(2); (d) Fe-MnFig. A3. Band structure of α -Fe and its C- and Mn-doped systems without strain: (a) α -Fe; (b) Fe-C(1); (c) Fe-C(2); (d) Fe-Mn.

图 A4 不同轨道电子分波态密度 (a) Fe-C(1) 分波态密度; (b) Fe-C(2) 分波态密度; (c) Fe-Mn 分波态密度

Fig. A4. Different orbitals of PDOS: (a) PDOS of Fe-C(1); (b) PDOS of Fe-C(2); (c) PDOS of Fe-Mn.

本文通过改变晶格常数 c 或剪切角 γ 来模拟应变作用。首先设置了切割方向和厚度, 将超晶胞结构在三个结晶方向上扩展两个单元。然后在切割面上添加 0 Å 的真空层, 并

沿设定方向对超胞施加三种不同类型的应变载荷。垂直于应变方向和原子位置的晶格矢量同时松弛以获得平衡结构。将应变逐步增加到 5% 并重复上述过程。

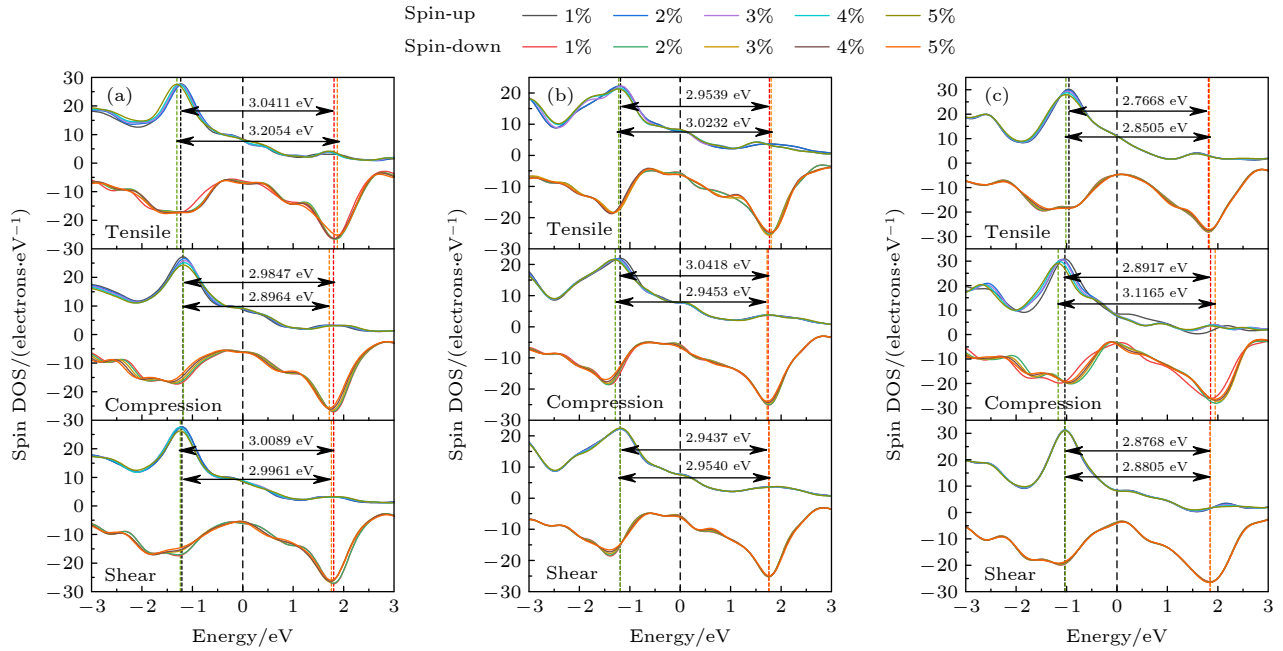


图 A5 掺杂体系在不同应变类型作用下(拉伸、压缩和剪切)的自旋态密度图 (a) Fe-C(1) 体系 DOS; (b) Fe-C(2) 体系 DOS; (c) Fe-Mn 体系 DOS

Fig. A5. The spin density distribution of states of doping systems under different types of strain (tensile, compression and shear strain): (a) DOS changes of Fe-C(1) doping system; (b) DOS changes of Fe-C(1) doping system; (c) DOS changes of Fe-Mn doping system.

参考文献

- [1] De Sousa J M, Aguiar A L, Girão E C, Fonseca A F, Souza Filho A G, Galvão D S 2021 *Chem. Phys* **542** 111052
- [2] Li J, Liu L S, Xu S, Zhang J Y 2020 *Acta Phys. Sin.* **69** 043102 (in Chinese) [李君, 刘立胜, 徐爽, 张金咏 2020 物理学报 **69** 043102]
- [3] Hadji S, Bouhemadou A, Haddadi K, Cherrad D, Khenata R, Bin-Omran S, Al-Douri Y 2020 *Physica B* **589** 412213
- [4] Kohn W, Sham L J 1965 *Phys. Rev* **140** A1133
- [5] Han Z K, Sarker D, Ouyang R, Mazheika A, Gao Y, Levchenko S V 2021 *Nat. Commun* **12** 1833
- [6] Zhu P, Zhang Q, Gou H S, Wang P P, Shao P Z, Kobayashi Equo, Wu G H 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 178101 (in Chinese) [祝平, 张强, 苟华松, 王平平, 邵博真, 小林郁夫, 武高辉 2021 物理学报 **70** 178101]
- [7] Ganose A M, Park J, Faghaninia A, Woods-Robinson R, Persson K A, Jain A 2021 *Nat. Commun* **12** 1
- [8] Shiojiri D, Iida T, Kadono T, Yamaguchi M, Kodama T, Yamaguchi S, Imai Y 2021 *J. Appl. Phys* **129** 115101
- [9] Kohl M, Krevet B, Yeduru S R, Ezer Y, Sozinov A 2011 *Smart Mater. Struct* **20** 094009
- [10] Daniel L, Rekik M, Hubert O 2014 *Arch. Appl. Mech* **84** 1307
- [11] Shi P P, Zheng X J 2016 *Nondestruct. Test. Eval* **31** 45
- [12] Jiles D C 1995 *J. Phys. D* **28** 1537
- [13] Joule J P 1847 *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* **30** 76
- [14] Corte-Leon P, Zhukova V, Blanco J M, et al. 2021 *J. Alloys Compd* **855** 157460
- [15] Zhang J M, Nie Y Z, Wang X G, Xia Q L, Guo G H 2021 *J. Magn. Magn. Mater* **525** 167687
- [16] Ray R B, Kaphle G C, Rai R K, Yadav D K, Paudel R, Paudyal D 2021 *J. Alloys Compd* **867** 158906
- [17] Shi P P, Su S Q, Chen Z M 2020 *J. Nondestruct. Eval* **39** 1
- [18] Dubov A A 2012 *Chem. Petrol. Eng* **47** 837
- [19] Tanasienko A G, Suntsov S I, Dubov A A 2002 *Chem. Petrol. Eng* **38** 624
- [20] Kuleev V G, Dubov A A, Lopatin V V 2002 *Russ. J. Nondestruct. Test* **38** 343
- [21] Dubov A A 2015 *Metallurgist* **59** 164
- [22] Shi P P, Hao S 2020 *Acta Phys. Sin.* **70** 034101 (in Chinese) [时朋朋, 郝帅 2020 物理学报 **70** 034101]
- [23] Shi P P 2021 *Chin. J. Theor. Appl. Mech.* **70** 3341 (in Chinese) [时朋朋 2021 力学学报 **70** 3341]
- [24] Yang L J, Liu B, Chen L J 2013 *NDT & E Int.* **55** 15
- [25] Yang L J, Liu B, Gao S W, Chen L J 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 086201 (in Chinese) [杨理践, 刘斌, 高松巍, 陈立佳 2013 物理学报 **62** 086201]
- [26] Essaoud S S, Jbara A S 2021 *J. Magn. Magn. Mater* **531** 167984
- [27] Maskar E, Lamrani A F, Belaiche M, Es-Smairi A, Khuili M, Al-Qaisi S, Rai D P 2021 *Surf. Interfaces* **24** 101051
- [28] Payne M C, Teter M P, Allan D C 1992 *Rev. Mod. Phys* **64** 1045
- [29] Milman V, Winkler B, White J A 2000 *Int. J. Quantum Chem* **77** 895
- [30] Stewart J C, Matthew D S, Chris J P, Phil J H, Matt I J, Keith R, Mike C P 2005 *Z. Kristallogr* **220** 567
- [31] Ernzerhof M, Scuseria G E 1999 *J. Chem. Phys* **110** 5029
- [32] Marzari N, Vanderbilt D, Payne M C 1997 *Phys. Rev. Lett* **79** 1337
- [33] Setyawan W, Curtarolo S 2010 *Comput. Mater. Sci* **49** 299
- [34] Rahman G, Kim I G 2008 *J. Magn* **13** 124
- [35] Kittel C 2021 *Introduction to Solid State Physics* (8th Ed.)
- [36] Fang C M, Van Huis M A, Sluiter M H F, Zandbergen H W 2010 *Acta Mater* **58** 2968

Mechanism of strain-induced magnetic properties changes for metal magnetic memory technology on atomic scale^{*}

Wang Si-Yuan¹⁾ Liang Tian-Shou¹⁾²⁾ Shi Peng-Peng^{1)†}

1) (*School of Civil Engineering, Xi'an University of Architecture and Technology, Xi'an 710055, China*)

2) (*School of Mechanical and Electrical Engineering, Xi'an University of Architecture and Technology, Xi'an 710055, China*)

(Received 19 April 2022; revised manuscript received 23 May 2022)

Abstract

Magnetic non-destructive testing technology is widely used to detect stresses and defects in ferromagnetic materials based on the magneto-mechanical coupling effect. In the existing studies, calculated are the magnetic moment variations of the α -Fe system under axial tension and compression by using first-principles study, and the magneto-mechanical coupling mechanism is preliminarily discussed at an atomic level for the magnetic testing technology. In this work, taking the more complex doping systems Fe-C and Fe-Mn for examples, under different loading conditions of tension, compression and shearing, the coupling mechanisms such as the magnetic moment changes in different types of atomic doping systems are discussed in detail. The results show that the α -Fe and doping systems follow different changing laws of magnetic moments and energy under different types of strains. The detailed analyses of the density of states, the band structure, and the atomic magnetic moment show that doping elements change the morphology of band structure and the peak value of density of states by affecting the magnetic moment of Fe atoms, which leads the changing laws of magnetic moment and energy to be different from each other. In this work, discussed are the magneto-mechanical effects on the atomic level for ferromagnetic materials with different loading types, different doping elements and different element content. The results can be used as an important part of the multi-field coupling mechanism for magnetic testing technology.

Keywords: metal magnetic memory, testing mechanism, α -Fe doping systems, strain effect, magnetic moment

PACS: 75.80.+q, 51.60.+a, 75.50.Bb, 75.50.Gg

DOI: 10.7498/aps.71.20220745

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11802225), the Basic Research Program of Natural Science Foundation of Shaanxi Province, China (Grant No. 2021JQ-494), and the China Postdoctoral Science Foundation (Grant No. 2019M663935XB).

[†] Corresponding author. E-mail: shipengpeng@xjtu.edu.cn

金属磁记忆应变诱导磁性变化的原子尺度作用机理

王思远 梁添寿 时朋朋

Mechanism of strain-induced magnetic properties changes for metal magnetic memory technology on atomic scale

Wang Si-Yuan Liang Tian-Shou Shi Peng-Peng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 197502 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20220745

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220745>

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

磁记忆检测的力磁耦合型磁偶极子理论及解析解

Analytical solution of magneto-mechanical magnetic dipole model for metal magnetic memory method

物理学报. 2021, 70(3): 034101 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20200937>

基于面磁荷密度的金属磁记忆检测正演模型

Forward model of metal magnetic memory testing based on equivalent surface magnetic charge theory

物理学报. 2022, 71(15): 154101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220176>

基于机器学习的无机磁性材料磁性基态分类与磁矩预测

Classification of magnetic ground states and prediction of magnetic moments of inorganic magnetic materials based on machine learning

物理学报. 2022, 71(6): 060202 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211625>

非金属原子边缘修饰InSe纳米带的磁电子学特性及应变调控

Magneto-electronic properties of InSe nanoribbons terminated with non-metallic atoms and its strain modulation

物理学报. 2019, 68(19): 198503 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190547>

二维应变作用下超导薄膜LiFeAs的磁性和电子性质

Magnetism and electronic properties of LiFeAs superconducting thin film under two-dimensional strains effect

物理学报. 2019, 68(2): 027401 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20180957>

柔性基周期性厚度梯度薄膜的应变效应

Strain effects of periodic thickness-gradient films on flexible substrates

物理学报. 2021, 70(1): 016801 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201008>