

四氧化三铁界面磁性耦合研究取得进展

中国科学院金属研究所沈阳材料科学国家（联合）实验室固体原子像研究部研究员陈春林与日本东京大学教授 Yuichi Ikuhara 等人合作，利用扫描透射电镜差分相衬成像技术（DPC STEM）实现了对 Fe₃O₄ 孪晶界面磁性耦合的直接测定，在原子尺度上揭示了 Fe₃O₄ 孪晶界面的原子/电子结构与其界面磁性耦合之间的直接关系。研究发现，Fe₃O₄ 孪晶界面的磁性耦合具有铁磁耦合与反铁磁耦合两种不同的类型，界面上的磁性耦合类型取决于孪晶界面两侧几个原子层范围内的原子与电子结构。

界面磁性耦合是磁性材料研究领域的基础科学问题，对理解多晶磁性材料的磁学行为进而调控其磁学性能至关重要。以往的研究已经认识到磁性材料中的界面/晶界等缺陷会对其磁学性能产生不利影响。然而，目前主流的研究方法仍是通过比较单晶材料与多晶材料磁学性能的差异来研究材料界面/晶界对其磁学性能的影响，研究方法固有的局限性导致相关研究工作无法深入开展。由于材料中界面/晶界等缺陷种类繁多，比较差异的研究方法所得到的结果是材料中所有缺陷结构共同作用的综合效果，因此无法建立界面/晶界结构与其磁学性能之间一一对应的直接关系。揭示磁性材料界面结构与界面磁性耦合之间交互作用的内在机理是一个具有挑战性的研究工作。

陈春林等对 Fe₃O₄ 孪晶界进行了系统的 STEM 高角环形暗场像（HHADF）与环形明场像（ABF）结构表征，发现 Fe₃O₄ 孪晶界可形成三种不同的原子结构，并运用 STEM 电子能量损失谱（EELS）分析了此三种孪晶界面的电子结构。在此基础上，利用差分相衬成像技术（Differential phase contrast imaging）直接测定了此三种孪晶界面的磁性耦合类型，确立了孪晶界原子/电子结构与其界面磁性耦合之间一一对应的直接关系；综合电子显微成像与磁性耦合测试所得的结果，通过基于密度泛函理论的共线磁结构计算，阐明了 Fe₃O₄ 孪晶界原子/电子结构影响其界面磁性耦合的机理。该项研究实现了对传统研究方法的突破，为多晶材料界面磁学行为与性能的研究开辟了广阔前景。

相关研究成果发表在 ACS Nano 上。该研究得到了中科院前沿科学重点研究项目、国家自然科学基金与国家青年千人计划等的资助。

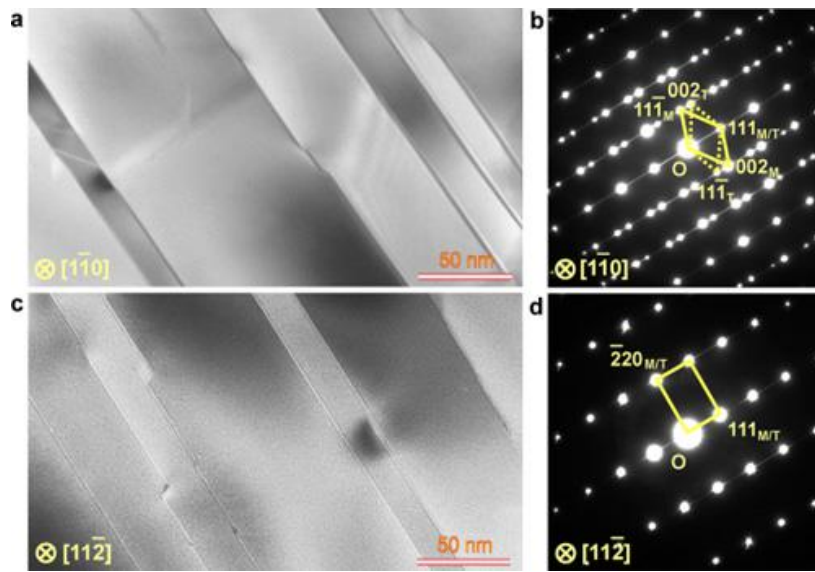


图 1、Fe₃O₄ 孪晶沿着 $[1\bar{1}0][11\bar{2}]$

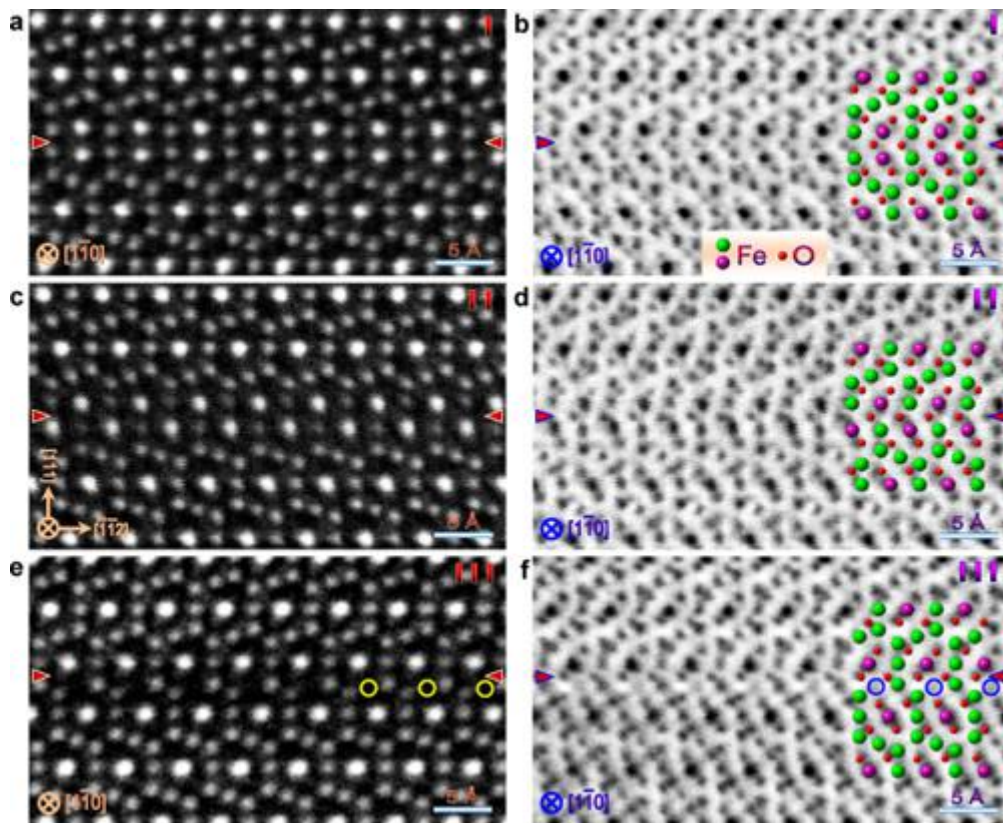


图 2. Fe₃O₄ 孪晶沿 $[1\bar{1}0]$

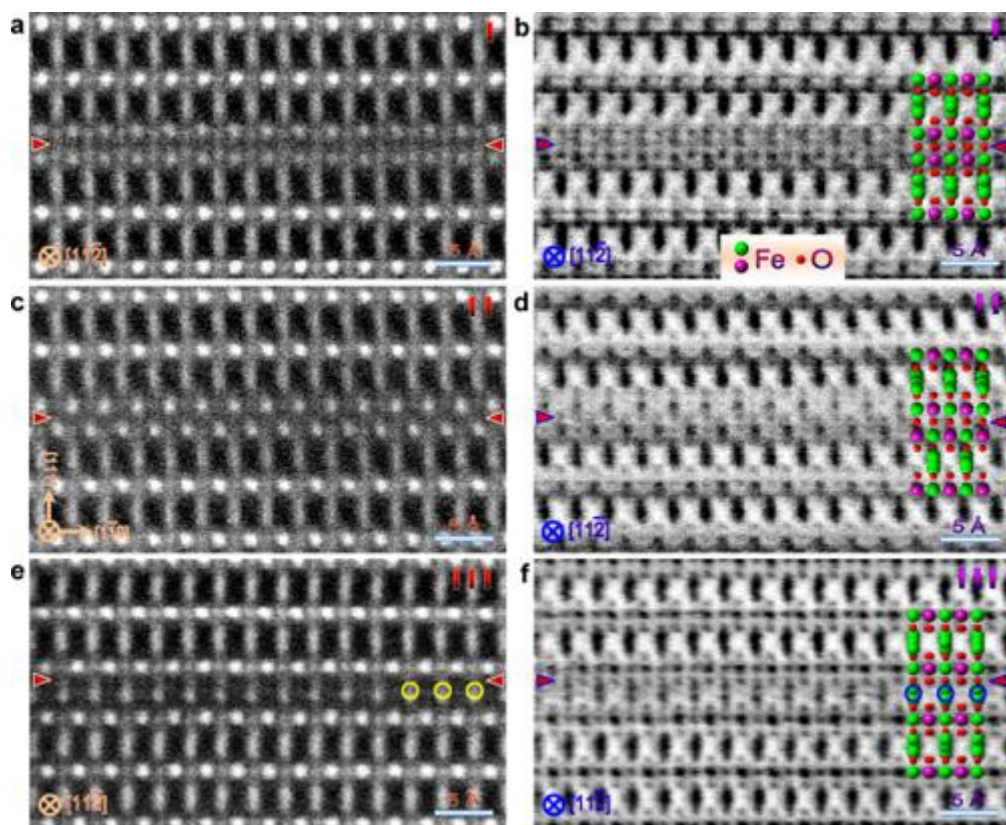


图 3. Fe₃O₄ 孪晶沿[11 $\bar{2}$]

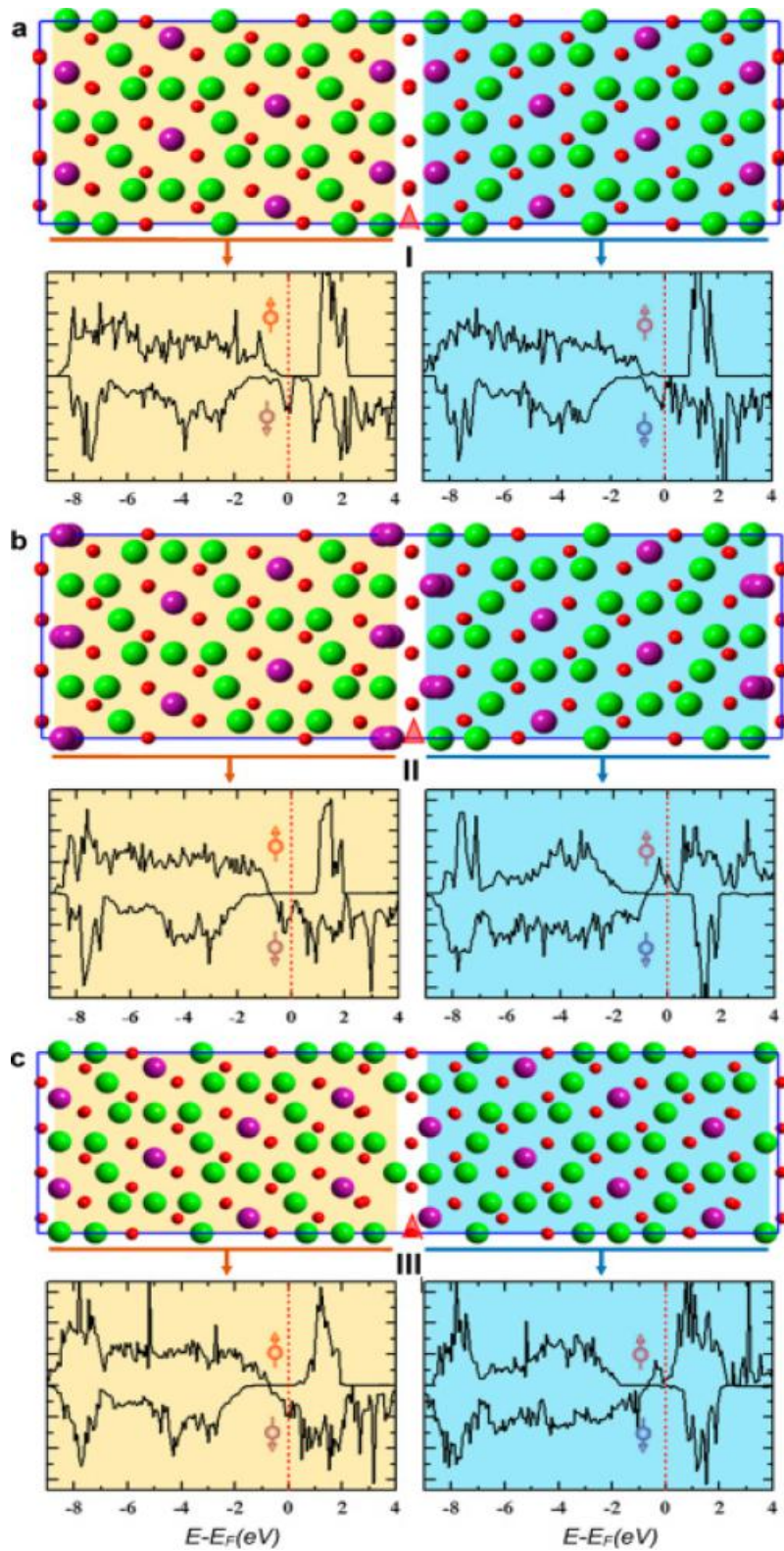


图 4. Fe₃₀₄ 孪晶自旋极化态密度图 (DOS)。态密度计算结构显示 I 型孪晶界面为铁磁耦合，II、III 型孪晶界面为反铁磁耦合。

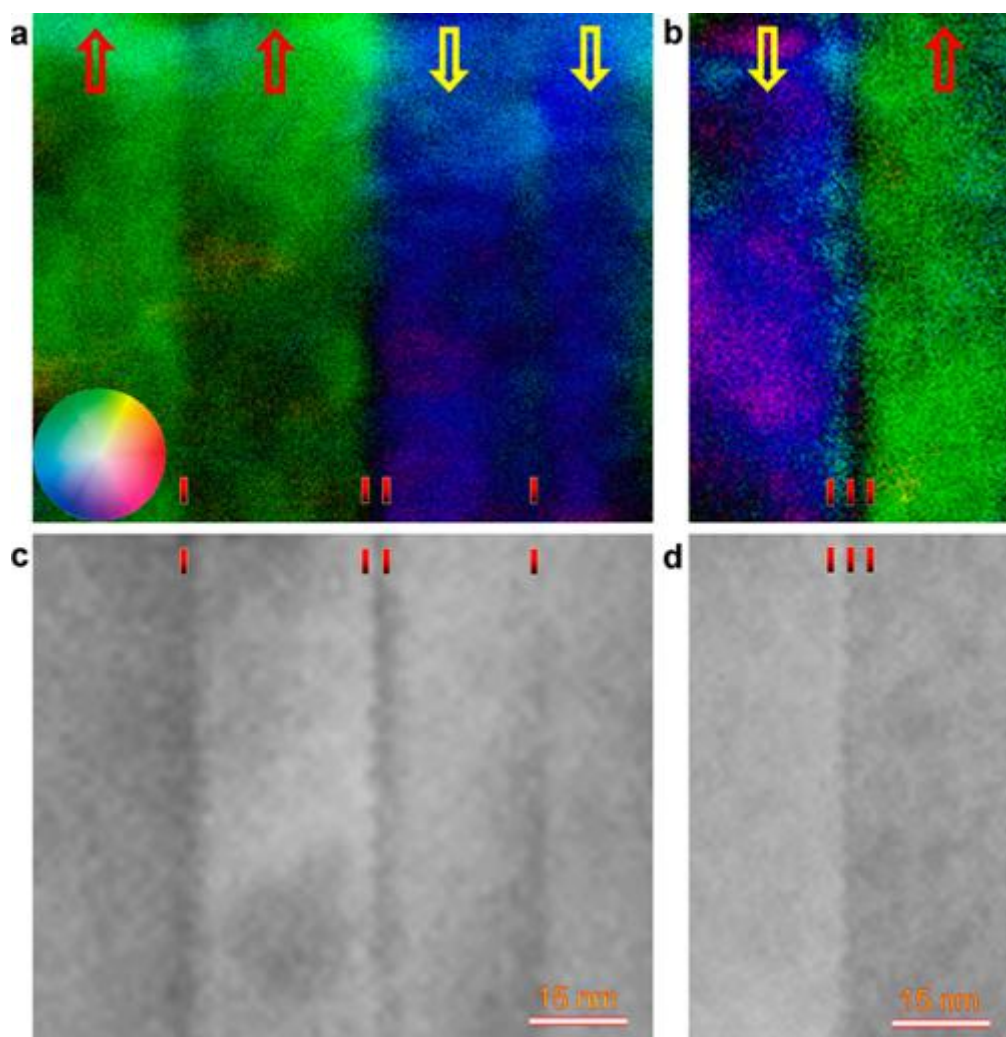


图 5. Fe_3O_4 孪晶界面磁性耦合的测定。a、b，DPC STEM 实验测得的 Fe_3O_4 孪晶板条的面内磁化矢量分布图；c、d，对应的透射电镜明场像。I 型孪晶界两侧的磁化矢量方向相同，为铁磁耦合；II、III 型孪晶界两侧磁化矢量相反，为反铁磁耦合。