

## · 封面故事 ·

在磁性马氏体结构相变研究中,元素替代是对材料相变温度调控的一个有效方法.替代过程中不同原子配置下的化学键合作用势必影响体系的相稳定性.因此,研究体系化学键强度的变化成为理解相变温度变化的有效途径.电子定域函数(ELF)可以反映不同原子成键时的电子对分布情况,而成为直观而定量地描述各类化学键成键状态及变化的有力工具.

封面图片显示了借助第一性原理计算获得的  $\text{MnNi}_{0.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Ge}$  体系的价电子定域函数结果.上图和中图分别为 Ni-Ge 和 Fe-Ge 层内的等值面基域,下图显示了(110)晶面内的定域结果剖面图.根据空间拓扑分析,相对于原有的 Ni、Ge 原子,Fe 与层内及层间近邻 Ge 原子之间的电子定域程度显著增强.同时,Fe 使得相邻的 Mn 原子层间距发生收缩,这导致了层间相邻 Mn 原子之间也产生可观的电子定域.这些表明,Fe 替代 Ni 原子后,Fe 与近邻 Ge 原子以及层间 Mn 原子之间产生了极性共价键作用的增强,这使得母相的稳定性增大,意味着相变失稳温度下降,反映出 Fe 替代 Ni 后体系马氏体相变温度下移的内在原因.

(中国科学院物理研究所 刘恩克 王文洪 吴光恒)