

doi:10.12068/j.issn.1005-3026.2025.20240052

# 掺杂Bi/Pb/Au/Cu促进 $L1_0$ -FeNi有序转变的第一性原理

王群首<sup>1,2</sup>, 唐家雨<sup>1,2</sup>, 姚爽<sup>1,2</sup>, 裴文利<sup>1,2</sup>

(1. 东北大学材料科学与工程学院, 辽宁沈阳110819;

2. 东北大学材料各向异性与织构教育部重点实验室, 辽宁沈阳110819)

**摘要:**  $L1_0$ 有序结构的FeNi材料具有优异的磁性能,拥有广阔的应用前景。但FeNi中的 $L1_0$ 结构形成温度低,在此温度下原子有序化扩散缓慢,导致实验中难以直接合成 $L1_0$ -FeNi。本文针对该问题,利用第一性原理研究了掺杂Bi, Pb, Au和Cu元素对FeNi的有序化扩散和磁性能的影响。结果表明:掺杂第三元素可以有效改善FeNi的形成动力学,从而促进FeNi的有序转变。其中Au与Cu元素更易替位掺杂,更有利于结构的稳定性, Bi, Pb, Au和Cu更容易占据Fe位。元素的掺杂可有效降低FeNi的空位形成能,从而降低了扩散激活能,促进了Fe原子和Ni原子的扩散和转移,进而降低FeNi的无序-有序转变势垒,有效促进FeNi的有序转变。掺杂第三元素在Ni位点时对FeNi的电子结构和磁性能影响很小。

**关键词:**  $L1_0$ -FeNi; 有序转变; 磁性能; 扩散激活能

中图分类号: TG 111.2

文献标志码: A

文章编号: 1005-3026(2025)10-0059-07

## Ordering Transition of $L1_0$ -FeNi Promoted by Doping Bi/Pb/Au/Cu with First Principles

WANG Qun-shou<sup>1,2</sup>, TANG Jia-yu<sup>1,2</sup>, YAO shuang<sup>1,2</sup>, PEI Wen-li<sup>1,2</sup>

(1. School of Materials Science & Engineering, Northeastern University, Shenyang 110819, China; 2. Key Laboratory for Anisotropy & Texture of Materials, Ministry of Education, Northeastern University, Shenyang 110819, China. Corresponding author: PEI Wen-li, E-mail: peiwl@atm.neu.edu.cn)

**Abstract:** The FeNi material with  $L1_0$  ordered structure has excellent magnetic properties and broad application prospects. However, the formation temperature of the  $L1_0$  structure in FeNi is low, and the atomic ordering diffusion is slow at this temperature. Therefore, it is difficult to directly synthesize  $L1_0$ -FeNi in the experiment. The effects of doping with Bi, Pb, Au, and Cu elements on the ordering diffusion and magnetic properties of FeNi were investigated by using the first principles. The results show that doping with a third element can effectively improve the formation kinetics of FeNi, thereby promoting the ordering transition of FeNi. Among them, Au and Cu elements are easier to substitute for the matrix atoms and are doped into the lattice, which is more conducive to the stability of the structure. Bi, Pb, Au, and Cu are more likely to occupy the Fe site. The doping of elements can effectively reduce the vacancy formation energy of FeNi, which reduces the diffusion activation energy and promotes the diffusion and transfer of Fe and Ni atoms. Therefore, the disorder-order transition barrier of FeNi can be lowered to effectively improve the ordering transition of FeNi. The doping of third elements at the Ni site has little effect on the electronic structure and magnetic properties of FeNi.

**Key words:**  $L1_0$ -FeNi; ordering transition; magnetic property; diffusion activation energy

面心四方相( $L1_0$ )的FeNi磁性材料具有较大 的磁晶各向异性,同时不含稀土和贵金属元素,

收稿日期: 2024-03-05

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(52371179)。

作者简介: 王群首(1999—),男,河北邢台人,东北大学博士研究生;裴文利(1970—),男,辽宁沈阳人,东北大学教授,博士生导师。

是有望替代稀土永磁和 FePt 的新型永磁材料<sup>[1-3]</sup>,在磁学领域受到了广泛关注<sup>[4]</sup>.研究人员已经在实验上确定了 FeNi 有序-无序转变温度为 593 K<sup>[5]</sup>,但是该低温下,Fe 和 Ni 的扩散率低,使其动力学上的转变极其缓慢,导致实验上难以直接形成  $L1_0$  有序结构,而高温下体系的平衡转变困难,也难以获得高有序的  $L1_0$ -FeNi 结构<sup>[6]</sup>.

目前  $L1_0$ -FeNi 的实验研究主要集中在纳米尺度的材料合成上.研究人员通过循环还原以及高能球磨<sup>[7]</sup>的方法成功合成出了  $L1_0$ -FeNi 纳米粒子,尽管合成的  $L1_0$  结构浓度较低且存在大量缺陷,但这些工艺在交换耦合磁性复合材料中显示出了巨大的研究潜力<sup>[8-9]</sup>,使  $L1_0$ -FeNi 基磁性复合材料受到了广泛关注<sup>[10]</sup>.研究人员提出掺杂第三元素(Pd 和 N)的方法成功合成了一定浓度的  $L1_0$ -FeNi 纳米粒子<sup>[11-12]</sup>,该方法的优点是改善了  $L1_0$ -FeNi 的形成动力学,从而促进了 Fe 原子和 Ni 原子在体系中的自发扩散.但实验制备高有序度的  $L1_0$ -FeNi 结构依然是该领域的瓶颈.

第一性原理是计算材料科学的重要手段之一,被广泛应用于材料性能预测和结构分析.文献[13]利用第一性原理探究了  $L1_0$ -FeNi 垂直磁晶各向异性的起源.FeNi 晶格中加入不同金属和非金属对 Fe 和 Ni 的相互扩散以及形成相的性质有相当大的影响<sup>[13-15]</sup>.有学者通过掺杂 Bi, Pb 等元素降低了 FePt 纳米材料的有序转变温度,但关于第三元素掺杂促进 FeNi 有序转变机理的研究鲜有报道,掺杂元素在 FeNi 有序转变中的作用尚不清楚.

本文拟使用第一性原理计算来研究掺杂元素对 FeNi 有序转变的影响.首先用 SQS 方法<sup>[16]</sup>生成无序 FeNi 模型,disorder 程序生成最优随机掺杂模型,随后计算了 Bi, Pb, Au 和 Cu 元素对  $L1_0$ -FeNi 晶格参数、形成能、电荷密度、饱和磁化强度、有序转变能、扩散激活能以及空位形成能的影响.分析了掺杂元素原子后晶格的空位形成及 Fe, Ni 原子扩散情况,探讨了元素掺杂促进

FeNi 有序化转变机理,为阐明掺杂第三元素促进 FeNi 有序化转变机制提供理论指导.

## 1 计算模型与方法

### 1.1 计算模型

本文依照密度泛函理论(DFT)平面波赝势进行计算,软件包采用 Vienna Ab-initio Simulation Package(VASP).使用平面波(PAW)基组,GGA-PBE 作为交换关联势<sup>[17]</sup>.价电子选择: Fe  $3d^7 4s^1$ , Ni  $3d^8 4s^2$ , Bi  $6s^2 6p^3$ , Pb  $6s^2 6p^2$ , Au  $5d^{10} 6s^2$ , Cu  $3d^{10} 4s^1$ .使用 Gamma 中心方法对布里渊区进行取样,选取  $8 \times 8 \times 8$  的 K 点网格密度,平面波截断动能无序结构使用 450 eV,有序结构选取 400 eV.在结构优化方面,采用共轭梯度法对超胞的体积、形状、原子位置均进行完全弛豫.能量收敛标准设置为迭代计算过程中 2 个电子步的能量差小于  $1.0 \times 10^{-6}$  eV,原子间受力标准为 0.1 eV/nm.

$L1_0$ -FeNi 计算模型晶格参数为  $a=0.358$  nm,  $c=0.360$  nm(空间群: $P4/mmm$ ),其中 32 个原子沿  $c$  轴交替排列 Fe 原子层和 Ni 原子层,超胞模型为  $2 \times 2 \times 2$  结构.使用 ATAT 中 mcsqs 代码生成 FeNi 合金的无序模型<sup>[18-19]</sup>.第三元素掺杂模型采用 disorder 程序去除对称性随机生成掺杂模型,最终的掺杂计算模型如图 1 所示,有序计算模型掺杂原子的坐标如表 1 所示.

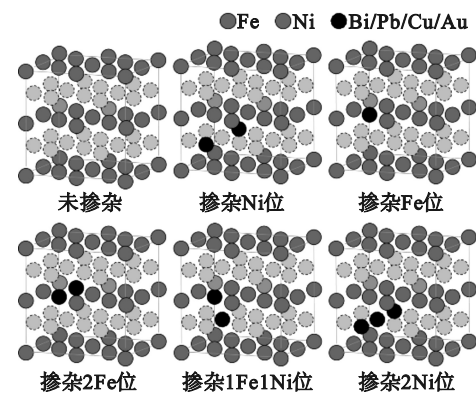


图 1 FeNiM 计算模型

Fig. 1 Calculation model of FeNiM

表 1 掺杂元素 M 的替位原子坐标

Table 1 Substituted atom coordinates of doped element M

结构类型	掺杂比/%	被替换原子	原子坐标		
有序	3. 125	1Fe	(0. 75,0. 25,0. 5)		
		1Ni	(0,0. 25,0. 25)		
	6. 250	2Fe	(0. 75,0. 25,0. 5)	(0. 25,0. 25,0. 5)	
		2Ni	(0,0. 25,0. 25)	(0. 5,0. 25,0. 25)	
		1Fe1Ni	(0. 75,0. 25,0. 5)	(0. 5,0. 25,0. 25)	

## 1.2 计算方法

体系产生空位时所引起的能量变化用空位形成能表示, 计算公式如下<sup>[20-21]</sup>:

$$E_v^f = E_{N-1} - E_N + \mu_M. \quad (1)$$

其中:  $E_{N-1}$ ,  $E_N$  为空位、完美体系的能量;  $\mu_M$  是空位原子的化学势。

第三元素掺杂时所引起的能量变化用替位形成能表示, 计算公式如下<sup>[22-23]</sup>:

$$E_{\text{def}} = E_{\text{doped}} - E_{\text{pure}} + \mu_{\text{lose}} - \mu_x. \quad (2)$$

其中:  $E_{\text{pure}}$ ,  $E_{\text{doped}}$  是掺杂前、后体系的能量;  $\mu_{\text{lose}}$  是被替换原子的化学势;  $\mu_x$  是掺杂原子的化学势。

结合能是原子由自由状态形成化合物时所释放的能量, 通常用来衡量合金化能力, 结合能越小, 体系形成时所需的能量越少, 晶体结构越稳定. 掺杂体系的结合能计算公式如下<sup>[24]</sup>:

$$E_{\text{coh}}(\text{Fe}_x\text{Ni}_y\text{M}_z) = [E_{\text{tot}}(\text{Fe}_x\text{Ni}_y\text{M}_z) - xE_{\text{iso}}(\text{Fe}) - yE_{\text{iso}}(\text{Ni}) - zE_{\text{iso}}(\text{M})]. \quad (3)$$

其中:  $E_{\text{coh}}(\text{Fe}_x\text{Ni}_y\text{M}_z)$  是掺杂体系的结合能;  $E_{\text{tot}}(\text{Fe}_x\text{Ni}_y\text{M}_z)$  是掺杂体系的总能量;  $E_{\text{iso}}(\text{Fe})$  是孤立 Fe 原子的能量;  $E_{\text{iso}}(\text{Ni})$  是孤立 Ni 原子的能量;  $E_{\text{iso}}(\text{M})$  是孤立掺杂原子 M 的能量;  $x, y, z$  为对应元素的原子数目。

差分电荷密度是用来研究电子结构的重要方法之一, 可以通过观测体系变化时产生的电子流向了解化学键的本质, 定义如下:

$$\rho_{\Delta} = \rho_{\text{FeNi}} - \rho_{\text{Fe}} - \rho_{\text{Ni}}. \quad (4)$$

其中:  $\rho_{\text{Fe}}/\rho_{\text{Ni}}$  是 Fe/Ni 的电荷密度;  $\rho_{\text{FeNi}}$  是 FeNi 的电荷密度。

利用以下公式描述 FeNi 有序转变势垒<sup>[25]</sup>:

$$E_{\text{tr}} = E_{\text{form}}^{\text{SQS}} - E_{\text{form}}^{L1_0}. \quad (5)$$

其中,  $E_{\text{form}}^{\text{SQS}}$ ,  $E_{\text{form}}^{L1_0}$  为 FeNi 无序、有序结构的形成能, 定义如下:

$$E_{\text{form}} = E_{\text{tot}} - E_{\text{Fe}} - E_{\text{Ni}} - E_{\text{M}}. \quad (6)$$

其中:  $E_{\text{tot}}$  为体系的总能量;  $E_{\text{Fe}}$  为体系中 Fe 原子的总能量;  $E_{\text{Ni}}$  为体系中 Ni 原子的总能量;  $E_{\text{M}}$  为体系中 Bi/Pb/Ag/Cu 原子的总能量。

扩散激活能即杂质原子或母体原子在固体中扩散的激活能, 在固溶体中的置换扩散或纯金属中的自扩散中, 原子的迁移主要是通过空位扩散机制<sup>[26]</sup>, 本文使用扩散激活能来描述掺杂元素对 FeNi 有序转变的影响, 计算公式如下:

$$Q = \Delta U + \Delta U_v. \quad (7)$$

其中:  $\Delta U$  为原子迁移能<sup>[26]</sup>;  $\Delta U_v$  为空位形成能。

FeNi 饱和磁化强度 ( $M_s$ ) 计算如下<sup>[27]</sup>:

$$M_s = \frac{m}{V}. \quad (8)$$

其中:  $V$  是体系的晶胞体积;  $m$  是体系总磁矩, 单位为玻尔磁子  $\mu_B$ ,

$$\mu_B = \frac{eh}{4\pi m_e}. \quad (9)$$

其中:  $e$  为电子电荷量;  $h$  为普朗克常数;  $m_e$  为电子质量。

## 2 结果与讨论

### 2.1 晶体结构与稳定性

表 2 所示为第三元素 (Bi, Pb, Cu, Au) 替换 Fe/Ni 位点时对  $L1_0$ -FeNi 晶格常数、体积和体积变化率的影响. 未掺杂体系晶格常数  $a=b=0.355$  nm,  $c=0.358$  nm,  $c/a=1.008$ , 与实际值基本一致 ( $a=b=0.358$  nm,  $c=0.361$  nm,  $c/a=1.008$ )<sup>[28]</sup>, 说明计算参数的选择和模型的建立合理可靠. 从表 2 中可以看出掺杂 Au, Cu 时产生的晶格畸变小于掺杂 Bi, Pb 的晶格畸变, 且晶格畸变的程度随原子半径的增大而增大 (Bi>Pb>Au>Cu>Fe>Ni), 其中 Cu 原子的半径与 Fe 原子和 Ni 原子差值最小 ( $\approx 0.002$  nm), 产生的晶格畸变也最少. 每种掺杂元素替换 Fe 位时的晶格畸变均小于替换 Ni 位点。

表 2 掺杂对晶格常数的影响

Table 2 Effect of doping on lattice constants

掺杂元素	替换原子	a/nm	b/nm	c/nm	c/a	体积 $\times 10^3/\text{nm}^3$	变化率/%
无		0.355	0.355	0.358	1.008	360.95	
Bi	Fe	0.359	0.359	0.362	1.008	373.62	3.51
Pb		0.359	0.359	0.361	1.006	372.29	3.14
Au		0.358	0.358	0.359	1.003	367.85	1.91
Cu		0.356	0.356	0.357	1.003	361.34	0.11
Bi	Ni	0.358	0.358	0.365	1.020	374.81	3.84
Pb		0.358	0.358	0.365	1.020	373.67	3.52
Au		0.357	0.357	0.362	1.014	368.65	2.13
Cu		0.355	0.355	0.359	1.011	362.28	0.37

掺杂第三元素的替位形成能( $E_{\text{def}}$ )与体系的结合能( $E_{\text{coh}}$ )如图2所示.其中Au,Cu的替位形成能比Bi,Pb的替位形成能更低,说明Au,Cu元素更容易进行替位掺杂,且Au,Cu的结合能也更低,进一步说明FeNiAu,FeNiCu的体系更稳定.当掺杂比由3.125%升高到6.250%时,各元素的

形成能与结合能均有升高的趋势,说明掺杂变得困难.值得注意的是,对于每种体系,第三元素原子替换Ni原子的替位形成能比替换Fe原子的替位形成能更高,说明第三元素原子更容易取代Fe原子,从结合能的角度来看,第三元素替换Fe位时的结合能更低,体系也更稳定.

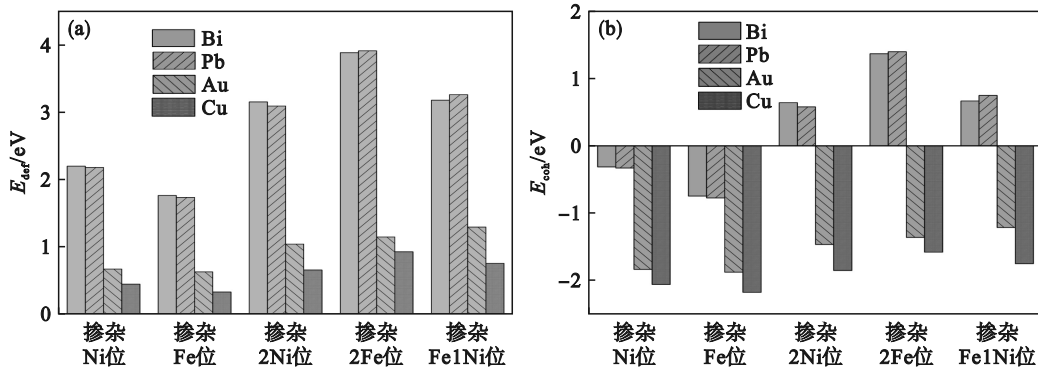


图2 形成能与结合能

Fig. 2 Formation energy and binding energy

(a)—形成能; (b)—结合能.

差分电荷密度可以帮助了解体系中的化学键本质与电子流向,掺杂Bi,Pb,Au和Cu的差分电荷密度如图3所示.图3a与图3b分别是 $L1_0$ -FeNi晶体中(001)面Fe原子层与Ni原子层的电荷分布,通过对比看出电荷流向主要分布在Fe原子与Ni原子间,说明对于FeNi体系而言,原子间的相互作用主要存在于Fe原子和Ni原子之间.图3c和图3d为Bi原子替换Fe/Ni原子的差分电荷密度图,其中Bi原子和Fe原子之间的电荷转

移少于Bi原子和Ni原子,因此替换Fe位点时所需的能量也较少,替换Ni位点时需要消耗更多的能量,这是第三元素更易替换Fe原子的原因,与图2中结果相符合.图3e~3h是不同掺杂元素替换Fe原子(010)面的电荷密度分布,相比于Bi,Pb原子,Au,Cu原子在FeNi体系中失电子更多,形成了更强的化学键,体系更稳定,这是Au,Cu元素更易掺杂的原因,与图2中替位形成能和结合能的结果一致.

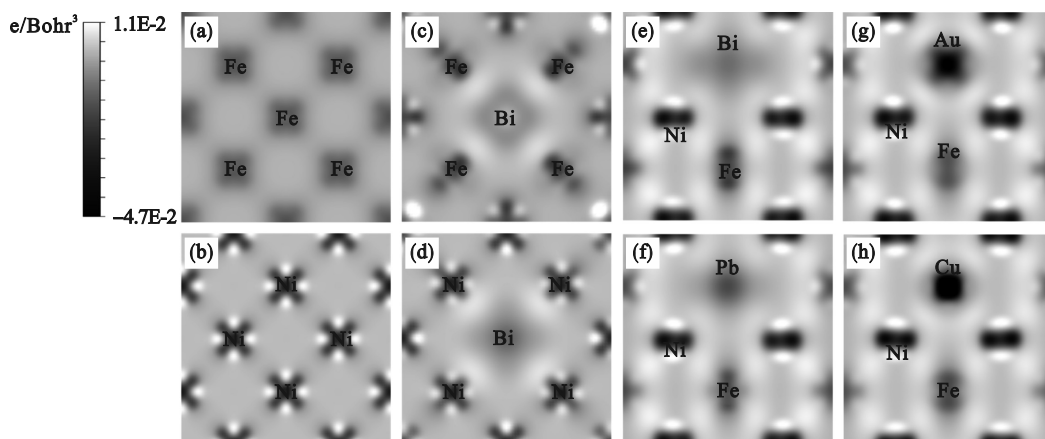


图3 掺杂对差分电荷密度的影响

Fig. 3 Effect of doping on differential charge density

(a)— $\text{Fe}_{16}\text{Ni}_{16}\text{Fe}$  (001); (b)— $\text{Fe}_{16}\text{Ni}_{16}\text{Ni}$  (001); (c)— $\text{Fe}_{15}\text{BiNi}_{16}\text{Fe}$  (001); (d)— $\text{Fe}_{16}\text{BiNi}_{15}\text{Ni}$  (001); (e~h)— $\text{Fe}_{15}\text{MNi}_{16}$  (010).

## 2.2 有序转变

图4显示了掺杂元素对FeNi有序转变的影

响,其中未掺杂体系转变势垒如图4中虚线所示,计算的无序到 $L1_0$ 结构转变能垒为1.74 eV,有序

转变温度为 603.19 K, 与理论值一致 (593 K)<sup>[29]</sup>, 说明此转变势垒较为合理. 当掺杂比为 3.125% 时, Bi 与 Pb 替换 Fe 原子转变势垒分别为 1.40 eV 与 1.43 eV, Au 与 Cu 替换 Fe 原子的转变势垒分别为 1.48 eV 与 1.59 eV, 元素掺杂均降低了 FeNi 结构的有序转变能, 表明其可以促进有序转变. 当掺杂比升高到 6.25% 时, 势垒进一步降低, 从而进一步促进有序转变的进行. 从降低有序转变势垒的角度看, 掺杂第三元素对有序转变的促进程度为  $Bi > Pb > Au > Cu$ .

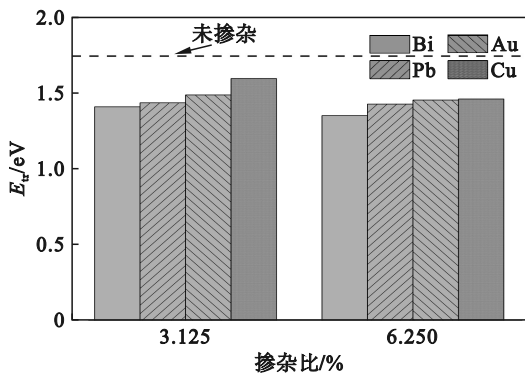


图 4 掺杂元素对有序转变势垒的影响  
Fig. 4 Effect of doped elements on barrier of ordering transition

图 5 显示了掺杂第三元素对 FeNi 体系中扩散激活能的影响. 针对产生的单空位 (Fe/Ni) 与双空位 (2Fe/2Ni) 体系, 未掺杂 FeNi 的平均扩散激活能为 5.59 eV, Bi 原子取代 Fe 位点后使平均扩散激活能降低至 4.59 eV, 扩散激活能越低, 原子的自发扩散行为越容易发生, 对 FeNi 体系来讲意味着 Fe 原子与 Ni 原子的扩散迁移更易发生, 从而重排至低能量的有序相. 掺杂第三元素能够有效降低 FeNi 体系的扩散激活能, 表明掺杂 Bi, Pb, Au, Cu 可以促进 FeNi 有序转变的进行, 且促进程度为  $Bi > Pb > Au > Cu$ , 这与图 4 中的

结果一致.

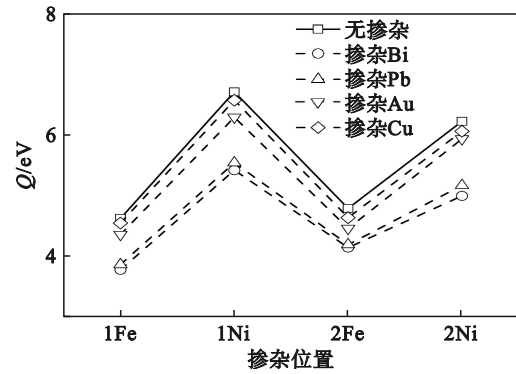
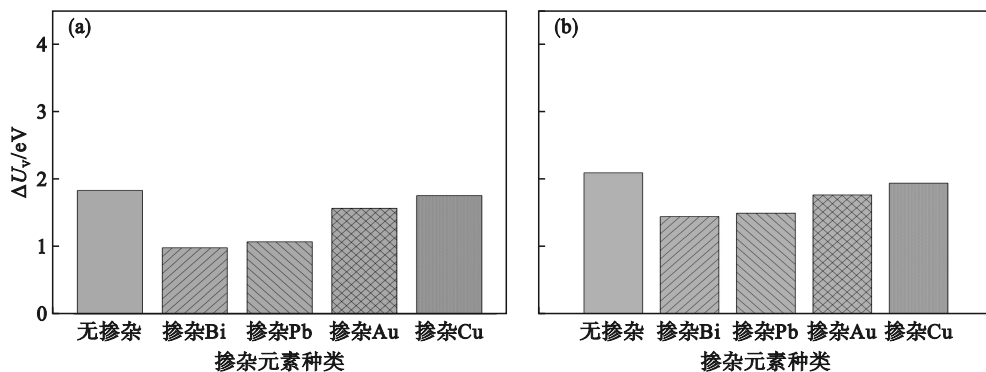


图 5 掺杂元素对扩散激活能的影响  
Fig. 5 Effect of doped elements on diffusion activation energy

在密堆积无序合金的原子迁移运动中, 大多数情况下原子扩散是借助空位机制的, 阻碍 FeNi 有序转变的原因之一就是 Fe 和 Ni 原子在体系中的扩散缓慢, 导致有序转变很难进行, 而空位的存在使原子迁移更容易, 进而促进有序转变的进行. 图 6 是掺杂对空位形成能的影响. 可以看出对所有体系来讲, 单空位情况下 Fe 的空位形成能更低, 双空位情况下 Ni 的空位形成能更低, 表明在 FeNi 中低空位浓度时更易产生 Fe 空位, 高空位浓度时更易产生 Ni 空位. 对于未掺杂体系, Fe 的单空位形成能为 1.83 eV, Ni 的单空位形成能为 2.09 eV, 掺杂第三元素明显降低了空位形成能, 其中 Bi 原子产生的促进作用最大, 使单空位形成能降低到了 0.98 eV (Fe) 与 1.45 eV (Ni), 表明掺杂第三元素可以促进 FeNi 体系中空位的形成, 从而促进 Fe/Ni 原子的自发扩散, 最终形成低能量的有序相. 从空位形成能的角度讲, 第三元素掺杂促进有序转变程度为  $Bi > Pb > Au > Cu$ , 与之前的结果一致.



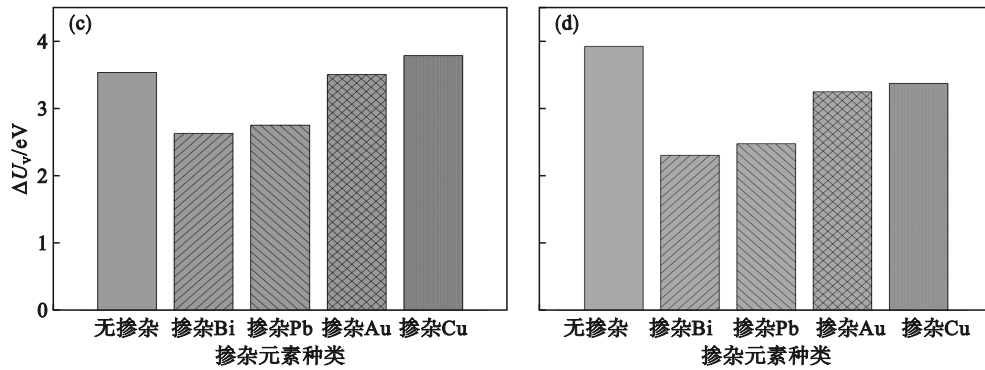


图6 掺杂对空位形成能的影响

Fig. 6 Effect of doping on vacancy formation energy

(a)—1Fe空位; (b)—1Ni空位; (c)—2Fe空位; (d)—2Ni空位.

### 2.3 磁性能

表3所示为掺杂第三元素对 $L1_0$ -FeNi磁矩和 $M_s$ 的影响.其中未掺杂体系的饱和磁化强度为1.61 T,与理论值(1.47~1.59 T)基本符合<sup>[30]</sup>.对比FeNiM的磁性能与纯FeNi的磁性能,发现掺杂体系的饱和磁化强度有所降低,原因为掺杂的第三元素(Bi, Pb, Au, Cu)均为非磁性原子,取代后使整个体系产生了磁损耗,所以使体系的磁性能有

所下降,但整体下降率仍小于9%.对比不同掺杂元素可以发现掺杂Au, Cu元素时产生的磁损耗少一些,整体的磁矩和饱和磁化强度略高于掺杂Bi, Pb元素,且对于每种掺杂元素,其取代Fe原子时磁矩与饱和磁化强度均低于取代Ni原子,这也说明Fe是FeNi中磁性的主要来源,Fe的损耗对体系磁性能的影响更大.

表3 掺杂对FeNi饱和磁化强度的影响

Table 3 Effect of doping on saturation magnetization of FeNi

掺杂元素	磁矩 $\mu_B$	体积 $\times 10^3/\text{nm}^3$	饱和磁化强度/( $\text{kA}\cdot\text{m}^{-1}$ )
无	50.11	360.95	1 287.49
Bi	46.85	373.62	1 162.91
Pb	46.92	372.29	1 168.90
Au	47.96	367.85	1 209.11
Cu	47.60	361.34	1 221.59
Bi	48.86	374.81	1 209.00
Pb	48.96	373.67	1 215.08
Au	49.91	368.65	1 255.57
Cu	49.61	362.28	1 270.01

## 3 结 论

1) 掺杂第三元素(Bi, Pb, Au, Cu)在Fe位点比在Ni位点时的晶格畸变更小,结合能与替位形成能更低,差分电荷密度分析表明Fe原子被取代时的电荷密度变化更小,第三元素(Bi, Pb, Au, Cu)原子更易占据FeNi中的Fe位,相比于Bi, Pb原子, Au, Cu原子更易取代Fe/Ni原子.

2)  $L1_0$ -FeNi合金中, Fe原子是磁性的主要来源.对于未掺杂的体系,其饱和磁化强度为1.61 T.当第三元素取代Fe原子时,磁矩的变化与饱和磁化强度的下降幅度相较于取代Ni原子时

更为显著,但下降幅度仍控制在9%以内,具体数值范围为1.45~1.51 T.值得注意的是,掺杂Cu和Au原子对FeNi的磁性能影响较小,而掺杂Bi和Pb原子则会导致更显著的磁损耗.

3)  $L1_0$ -FeNi中的平均扩散激活能为5.59 eV,掺杂第三元素(Bi, Pb, Au, Cu)均在不同程度上降低了FeNi体系的扩散激活能,其中大原子半径元素Bi取代Fe位点后的扩散激活能降低至4.59 eV,促进了体系中原子的自发扩散,利于有序转变的形成. Bi原子掺杂在Fe位点后, FeNi无序-有序转变势垒从1.74 eV降低到1.40 eV,分析原因为掺杂第三元素可以促进FeNi中空位的形成,进而降低了体系的扩散激活能,使Fe原子与Ni原子更

易自发扩散形成更稳定的有序相. 掺杂第三元素 (Bi, Pb, Au, Cu) 可以促进 FeNi 有序转变, 促进程度为  $\text{Bi} > \text{Pb} > \text{Au} > \text{Cu}$ .

#### 参考文献:

- [1] Li D, Li Y, Pan D S, et al. Prospect and status of iron-based rare-earth-free permanent magnetic materials [J]. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 2019, 469: 535–544.
- [2] Silveyra M J, Ferrara E, Huber L D, et al. Soft magnetic materials for a sustainable and electrified world [J]. *Science*, 2018, 362(6413): eaao0195.
- [3] Coey J M D. Perspective and prospects for rare earth permanent magnets [J]. *Engineering*, 2020, 6(2): 119–131.
- [4] Mandal S, Debata M, Sengupta P, et al.  $L1_0$  FeNi: a promising material for next generation permanent magnets [J]. *Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences*, 2023, 48(6): 703–725.
- [5] Reuter K B, Williams D B, Goldstein J I. Ordering in the Fe–Ni system under electron irradiation [J]. *Metallurgical Transactions A*, 1989, 20: 711–718.
- [6] Bordeaux N, Montes-Arango A M, Liu J, et al. Thermodynamic and kinetic parameters of the chemical order-disorder transformation in  $L1_0$  FeNi (tetrataenite) [J]. *Acta Materialia*, 2016, 103: 608–615.
- [7] Geng Y L, Ablekim T, Kotten M A, et al. Defect generation and analysis in mechanically alloyed stoichiometric Fe–Ni alloys [J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2015, 633: 250–255.
- [8] Savchenko A G, Menushenkov V P, Plastinin A Y, et al. Phase composition and magnetic properties of  $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}/\alpha$ -Fe nanocomposites prepared by mechanical alloying [J]. *Russian Metallurgy (Metally)*, 2018, 2018: 354–358.
- [9] Pop V, Gutoiu S, Dorolti E, et al. The influence of milling and annealing on the structural and magnetic behavior of  $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}/\alpha$ -Fe magnetic nanocomposite [J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2013, 581: 821–827.
- [10] Kurichenko V L, Karpenkov D Y, Gostischev P A. Micromagnetic modelling of nanorods array-based  $L1_0$ -FeNi/SmCo<sub>5</sub> exchange-coupled composites [J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2020, 32(40): 405806.
- [11] Montes-Arango A M, Bordeaux N C, Liu J, et al.  $L1_0$  phase formation in ternary FePdNi alloys [J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2015, 648: 845–852.
- [12] Goto S, Kura H, Watanabe E, et al. Synthesis of single-phase  $L1_0$ -FeNi magnet powder by nitrogen insertion and topotactic extraction [J]. *Scientific Reports*, 2017, 7(1): 13216.
- [13] Miura Y, Ozaki S, Kuwahara Y, et al. The origin of perpendicular magneto-crystalline anisotropy in  $L1_0$ -FeNi under tetragonal distortion [J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2013, 25(10): 106005.
- [14] Rani P, Kashyap M K, Singla R, et al. Magnetism and magneto crystalline anisotropy of tetragonally distorted  $L1_0$ -FeNi: N alloy [J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2020, 835: 155325.
- [15] Manchanda P, Skomski R, Bordeaux N, et al. Transition-metal and metalloid substitutions in  $L1_0$ -ordered FeNi [J]. *Journal of Applied Physics*, 2014, 115(17): 17A710.
- [16] Zunger A, Wei S H, Ferreira L G, et al. Special quasirandom structures [J]. *Physical Review Letters*, 1990, 65(3): 353–356.
- [17] Blöchl P E. Projector augmented-wave method [J]. *Physical Review B*, 1994, 50(24): 17953–17979.
- [18] Ghosh G, Walle A, Asta M. First-principles calculations of the structural and thermodynamic properties of bcc, fcc and hcp solid solutions in the Al–TM (TM=Ti, Zr and Hf) systems: a comparison of cluster expansion and supercell methods [J]. *Acta Materialia*, 2008, 56(13): 3202–3221.
- [19] Dahlborg U, Cornide J, Calvo-Dahlborg M, et al. Efficient stochastic generation of special quasirandom structures [J]. *Journal of Alloys and Compounds*, 2016, 681: 330–341.
- [20] Luo H B, Du J, Yan A R, et al. A theoretical study of thermal vacancy formation enthalpy of disordered FePt doped by Cu, Zn and Ag [J]. *Computational Materials Science*, 2018, 144(12): 120–125.
- [21] He W Y, Zhang S H, Luo Y, et al. Exploring monolayer GaN doped with transition metals: insights from first-principles studies [J]. *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, 2024, 37: 157–163.
- [22] 刘传值, 赵东, 王群首, 等. 掺杂 Bi 促进  $L1_0$ -FePt 有序转变的第一性原理研究 [J]. *稀有金属材料与工程*, 2022, 51(10): 3699–3706.  
(Liu Chuan-zhi, Zhao Dong, Wang Qun-shou, et al. Study on ordering transition of  $L1_0$ -FePt promoted by doping Bi with first principles [J]. *Rare Metal Materials and Engineering*, 2022, 51(10): 3699–3706.)
- [23] 郑健. Ag/Cu/Pb 掺杂促进 FePt 纳米材料有序转变机理的第一性原理研究 [D]. 沈阳: 东北大学, 2020.  
(Zheng Jian. Study on the mechanism of promoting the ordering transition of FePt nanomaterials doped with Ag/Cu/Pb by first principles [D]. Shenyang: Northeastern University, 2020.)
- [24] 黄慧, 张彩丽, 何燕, 等. 过渡金属 (W, Mo, Nb, Fe, Ni) 掺杂  $\text{Cr}_2\text{N}$  的结构稳定性及电子特性 [J]. *稀有金属与硬质合金*, 2017, 45(3): 31–35.  
(Huang Hui, Zhang Cai-li, He Yan, et al. Phase stability and electronic properties of  $\text{Cr}_2\text{N}$  doped with transition metals (W, Mo, Nb, Fe, Ni) [J]. *Rare Metals and Cemented Carbides*, 2017, 45(3): 31–35.)
- [25] Jiang C, Wolverton C, Sofo J, et al. First-principles study of binary bcc alloys using special quasirandom structures [J]. *Physical Review B*, 2004, 69(21): 214 202.
- [26] 胡赓祥, 蔡珣. 材料科学基础 [M]. 上海: 上海交通大学出版社, 2010.  
(Hu Geng-xiang, Cai Xun. Fundamentals of materials science [M]. Shanghai: Shanghai Jiao Tong University Press, 2010.)
- [27] Shu X L, Chen Q, Chen Z Y, et al. Structural defects in  $L1_0$  FePt by modified analytic embedded-atom method [J]. *Transactions of Nonferrous Metals Society of China*, 2006, 16(3): 2034–2037.
- [28] Kotsugi M, Maruyama H, Ishimatsu N, et al. Structural, magnetic and electronic state characterization of  $L1_0$ -type ordered FeNi alloy extracted from a natural meteorite [J]. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2014, 26(6): 064206.
- [29] Néel L, Pauleve J, Pauthenet R, et al. Magnetic properties of an iron-nickel single crystal ordered by neutron bombardment [J]. *Journal of Applied Physics*, 1964, 35: 873–876.
- [30] Bordeaux N, Montes-Arango A M, Liu J, et al. Thermodynamic and kinetic parameters of the chemical order-disorder transformation in  $L1_0$  FeNi (tetrataenite) [J]. *Acta Materialia*, 2016, 103: 608–615.