

团簇 Fe_3Ni_3 的电子自旋及磁学性质

郑新喜, 方志刚, 王倩, 许友, 井润田
(辽宁科技大学 化学工程学院, 辽宁 鞍山 114051)

摘要:为探究非晶态合金 Fe-Ni 二元体系的电子自旋及其磁学性质,对其宏观优异磁学性能提供理论支撑,设计团簇 Fe_3Ni_3 作为局域结构模型,以密度泛函理论为基础,在 B3LYP/Lan12dz (level) 下对其进行全参数优化计算,最终得到 5 种三重态优化构型。从各优化构型 Mulliken 自旋布居数的角度对其成单电子分布情况进行分析,再通过各构型的电子自旋密度、磁矩及轨道态密度对其磁学性质进行研究。结果表明:团簇 Fe_3Ni_3 所有优化构型中,各原子的成单电子主要分布在 d 轨道,Fe 原子的成单电子均多于 Ni 原子且自旋方向相反,同时 Fe 原子对团簇磁性的贡献也大于 Ni 原子;团簇 Fe_3Ni_3 的 d 轨道对该团簇磁性起主要贡献作用;其部分 s、p 轨道特定能量片段上的 α 、 β 电子可以发生自旋相互耦合进而转换。

关键词:团簇;成单电子;电子自旋;磁矩;态密度

DOI:10.15938/j.jhust.2023.04.019

中图分类号: O641.12 **文献标志码:** A **文章编号:** 1007-2683(2023)04-0152-07

The Electron Spin and Magnetic Properties of Cluster Fe_3Ni_3

ZHENG Xinxi, FANG Zhigang, WANG Qian, XU You, JING Runtian

(School of Chemical Engineering, University of Science and Technology Liaoning, Anshan 114051, China)

Abstract:In order to explore the electron spin and magnetic properties of amorphous alloy Fe-Ni binary system, and provide theoretical support for its macroscopic excellent magnetic properties, the cluster Fe_3Ni_3 was designed as a local structure model. Based on density functional theory, full parameter optimization calculation is performed under B3LYP/Lan12dz (level), and finally five triplet optimized configurations are obtained. The single-electron distribution of each optimized configuration is analyzed from the angle of Mulliken spin population, and its magnetic properties are studied by the electron spin density, magnetic moment and orbital state density of each configuration. The results show that in all optimized configurations of Fe_3Ni_3 clusters, the single electrons of each atom are mainly distributed in the d orbital, and the single electrons of Fe atoms are more than those of Ni atoms and the spin directions are opposite. At the same time, the contribution of Fe atoms to the cluster magnetism is also larger than the Ni atom; the d orbital of the cluster Fe_3Ni_3 plays a major role in the magnetic properties of the cluster; the α and β electrons on the specific energy segments of some of the s and p orbitals can be spin-coupled and converted.

Keywords:cluster; single electron; electron spin; magnetic moment; density of state

0 引言

团簇作为一种由分子、原子、离子在一定物理与化学作用力下形成的微观团体,其自身物理化学性

质会随着其组成原子变化而变化^[1],该材料在金属材料领域与传统的晶态合金相比,在催化性能^[2-3]、储氢性能^[4-5]、磁性^[6-7]等方面都展现出优异性能,其中 Fe 基^[8]、Ni 基^[9-10]由于成本低廉、环保无毒、物理化学性能优越等因素,自发现以来,便受到新型

收稿日期: 2022-04-02

基金项目: 国家自然科学基金重点项目(51634004);国家级大学生创新创业训练计划(202110146027,202110146009,202110146016);辽宁省大学生创新创业训练计划(202110146056,202110146049,202110146030)。

作者简介: 郑新喜(2000—),男,本科生;

王倩(2001—),女,本科生。

通信作者: 方志刚(1964—),男,博士,教授,博士研究生导师,E-mail:lnfzg@163.com。

材料科学领域研究人员的重视,广泛研究该新型材料的各种综合性质。其中过渡金属团簇由于其本身原子 d 轨道电子未满的特殊性,更是吸引了广大科研人员的注意,在由 Fe、Ni 两种过渡金属元素组成催化物体系,例如 $\text{Fe-Cr}^{[11]}$ 、 $\text{Fe-Co}^{[12-13]}$ 、 $\text{Fe-Cr-Ni}^{[14-15]}$ 等均已取得众多显著的研究成果并应用于各现实领域之中。其中,ZHANG Y 等^[16]发现二元体系非晶态 Fe-Ni 合金在纳米 C 纤维结构中的光解水催化析氧性能表现突出,其电子性质特殊,有望成为电解水催化方面的新型材料,同时 YAO 等^[17]也研究发现 Fe 基对磁学性能方面具有重大影响。

但目前关于非晶态 Fe-Ni 合金众多优异性能都只是通过宏观试验进行测定,其微观电子自旋理论及磁学性质的研究目前鲜有报道,无法对其宏观性质进行解释,因此根据 YANG L 等^[18]的研究成果设计了团簇 Fe_3Ni_3 结构模型,从 Mulliken 自旋布居数、电子自旋密度、磁矩及轨道态密度 4 个方面对团簇 Fe_3Ni_3 的电子性质及磁性展开研究,期望能够对现实生产中的利用产生一定的理论指导作用。

1 模型与计算

B3LYP 泛函在过渡金属体系的计算是众多科研工作者的默认泛函,其运算时综合表现较为优异,因此选择 B3LYP 泛函;由于本文所研究的 Fe-Ni 体系,其两种原子均为第一行的过渡金属元素,Lan12dz 基组针对其内层电子用 Los Alamos ECP 赝势,外层电子用 DZ 基组,其计算精度完全达到要求。

由于 Fe-Ni 体系中两种过渡金属原子的 3d 轨道均具有各自的空间对称性,为满足对称性一致及最大重叠原则,依据拓扑学原理^[19],尽可能将团簇 Fe_3Ni_3 可能存在的二维、三维初始构型(包括平面构型、三棱柱型、四角双锥型等经典构型)均设计出来,共 19 种初始构型,使用密度泛函理论^[20-21](density functional theory, DFT),在 B3LYP/Lan12dz 量子化学水平下,对所有初始构型在三重态下进行全参数优化计算(由于单重态构型为闭壳层,其 2 个自旋的空间轨道同等,基态团簇的电子自旋成对,即净自旋为零,不具有磁性,因此不必进行分析),其中 Fe、Ni 原子采用 Hay P J 等^[22]的含相对论校正的有效核电势价电子从头计算基组,即 18-eECP 的双 ξ 基组。所有运算均在计算机 Z440 上运用 Gaussian 09 程序完成。

2 优化构型及能量

通过优化运行后,将不稳定的虚频构型以及同重态下能量较高的相同构型排除后,最终得到 5 种三重态优化构型。

将具有最低校正能的构型 1⁽³⁾ 作为基准(0 kJ/mol),分别计算出其他四种构型的相对能量,并将各优化构型的相对能量标注于构型下方,构型序号上标括号内的数字为构型的自旋重态。将 5 种优化构型按照热力学稳定性大小由高到低排序:1⁽³⁾ > 2⁽³⁾ > 3⁽³⁾ > 4⁽³⁾ > 5⁽³⁾,如图 1 所示。通过观察优化构型的空间立体图可以看出,团簇 Fe_3Ni_3 三重态下稳定构型均为四角双锥型,同时 5 种构型能量和几何空间结构相差较小,说明团簇 Fe_3Ni_3 的理论稳定构型为四角双锥型,这为该团簇催化剂的现实生产过程中基础构型的选择起到理论指导作用。

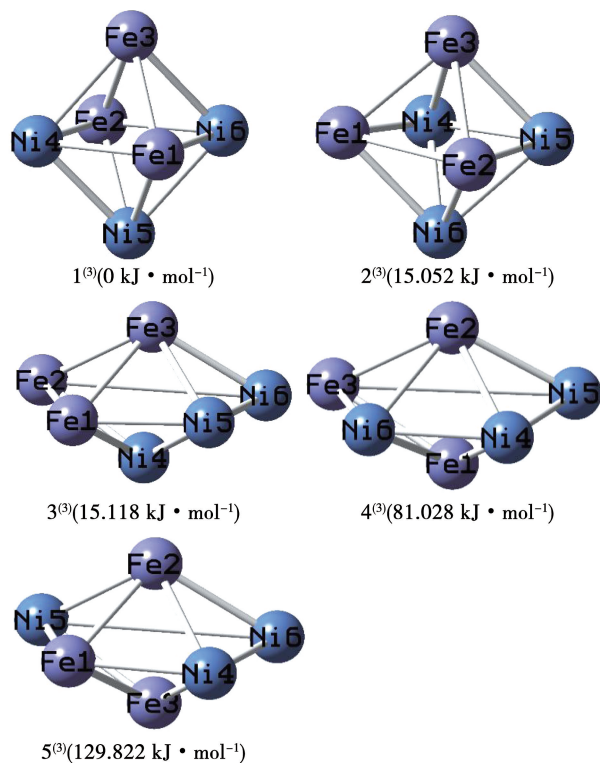


图 1 团簇 Fe_3Ni_3 的 5 种优化构型

Fig. 1 5 optimized configurations of cluster Fe_3Ni_3

3 团簇 Fe_3Ni_3 的磁性

3.1 自旋布居数分析

自旋布居数表示各原子轨道的成单电子数,可准确地表征原子或原子轨道所带单电子的种类及数

目。电子的自旋布居数为正值时,定义为自旋方向向上的 α 电子,负值定义为自旋向下的 β 电子(正负号只表示方向,不表示大小)。由于团簇 Fe_3Ni_3

的三重态优化构型中均含有成单电子,将所有构型内各原子对应 s、p、d 轨道的 Mulliken 自旋布居数绘制成表 1。

表 1 团簇 Fe_3Ni_3 优化构型中各原子不同轨道的 Mulliken 自旋布居数

Tab. 1 Mulliken spin population of different atomic orbitals of each atom in optimized configurations of cluster Fe_3Ni_3

构型	Fe1			Fe2			Fe3			Ni1			Ni2			Ni3		
	s	p	d	s	p	d	s	p	d	s	p	d	s	p	d	s	p	d
1 ⁽³⁾	0.153	0.105	3.418	-0.194	-0.147	-3.497	0.216	0.050	3.178	-0.065	0.013	0.957	-0.065	-0.025	-0.927	-0.075	-0.056	-1.037
2 ⁽³⁾	0.188	0.100	3.299	-0.233	-0.142	-3.467	0.058	0.108	3.267	-0.078	-0.102	-1.002	0.137	0.051	0.948	-0.112	-0.044	-0.975
3 ⁽³⁾	0.142	0.122	3.283	-0.243	-0.089	-3.270	0.172	0.180	3.077	0.042	0.097	0.832	-0.129	-0.082	-0.979	-0.113	-0.014	-1.027
4 ⁽³⁾	-0.047	0.048	-2.932	-0.019	0.047	-2.978	0.327	0.201	3.304	0.172	0.182	0.977	0.163	0.094	1.037	0.118	0.201	1.105
5 ⁽³⁾	-0.043	0.027	-1.279	-0.301	-0.126	-3.143	0.281	0.097	3.215	0.050	0.090	0.970	0.054	0.047	1.021	-0.006	0.030	1.016

对表 1 数据进行分析发现,团簇 Fe_3Ni_3 所有三重态构型中各自的 s、p 轨道的自旋布居数绝对值相差较小,并且无明显的大小关系,且构型 1⁽³⁾ ~ 3⁽³⁾ 中各原子的 s、p 轨道自旋布居数呈正负同步,即所带电子自旋方向一致。值得注意的是,在稳定最好的构型 1⁽³⁾ 中, Ni1 原子 s 轨道带自旋向下的 β 电子(-0.065),而 p 轨道所带单电子为自旋向上的 α 电子(0.013),但是在热力学稳定性较差的构型 4⁽³⁾ 中 Fe1 原子(s: -0.047、p:0.048)与 Fe2 原子(s: -0.019、p:0.047)、构型 5⁽³⁾ 的 Fe1 原子(s: -0.043、p:0.027)与 Ni3 原子(s: -0.006、p:0.030)的 s、p 轨道成单电子自旋方向相反。整体来看,构型 1⁽³⁾ 带有一个 s、p 轨道成单电子自旋方向相反的原子,构型 4⁽³⁾ 及构型 5⁽³⁾ 带有两个 s、p 轨道成单电子自旋方向相反的原子,说明原子的 s、p 轨道成单电子自旋方向会对构型的热力学稳定性造成一定的削弱影响。但构型 2⁽³⁾ 与构型 3⁽³⁾ 所有原子 s、p 轨道成单电子自旋方向上下同步,且稳定性弱于构型 1⁽³⁾,说明该削弱效果影响较小,对构型的热力学稳定性不起决定性作用。

团簇 Fe_3Ni_3 所有构型中每个原子的 d 轨道自旋布居数绝对值大于该原子的 s、p 轨道,且 Fe 原子的自旋布居数绝对值均大于 Ni 原子,说明团簇 Fe_3Ni_3 所有三重态构型中各原子的成单电子多分布于在 d 轨道,且 Fe 原子 d 轨道上的成单电子均多于 Ni 原子 d 轨道上的成单电子。

3.2 磁性分析

3.2.1 电子自旋密度分析

图 2 为各优化构型的电子自旋密度图,其电子自旋密度为原子中各轨道自旋向上的 α 电子与自

旋向下的 β 电子相互抵消产生的结果,若原子附近电子云为绿色,则表示该原子所带 α 电子多于 β 电子,原子的净成单电子为自旋向上的 α 电子,若原子附近电子云为蓝色,则表示该原子所带 β 电子多于 α 电子,净成单电子为自旋向下的 β 电子。两种自旋方向相反的成单电子共同存在于同一原子时会对该原子磁矩产生削弱作用。

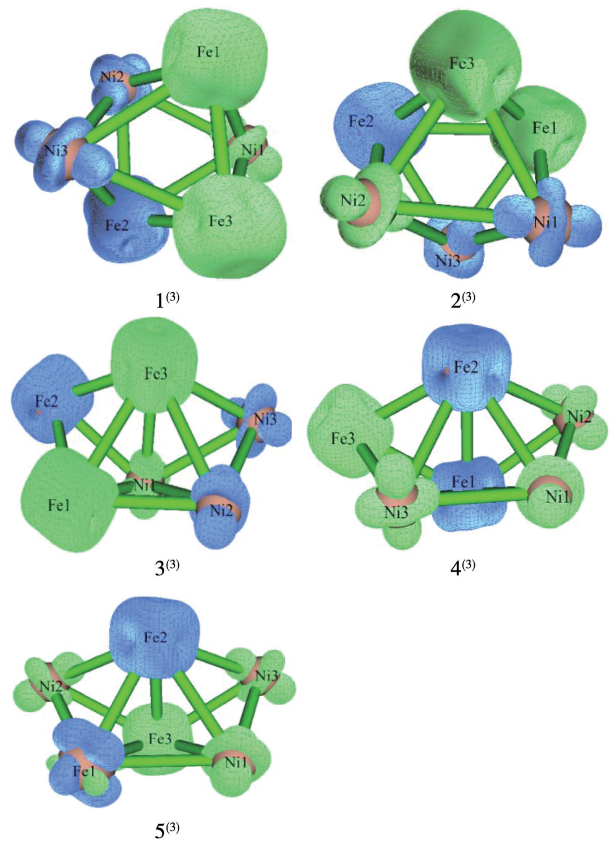


图 2 团簇 Fe_3Ni_3 各优化构型的电子自旋密度分布图

Fig. 2 The electron spin density distribution diagram of each optimized configuration of cluster Fe_3Ni_3

由图 2 可见,构型 $1^{(3)} \sim 3^{(3)}$ 中均存在 2 个 Fe 原子与 1 个 Ni 原子呈自旋向上的 α 电子,其余的 2 个 Ni 原子和 1 个 Fe 原子带自旋向下的 β 电子;而构型 $4^{(3)}$ 与构型 $5^{(3)}$ 均存在 2 个 Fe 原子带自旋向下的 β 电子,其余的 1 个 Fe 原子和 3 个 Ni 原子带自旋向上的 α 电子。同时观察各个构型原子周围的电子云大小发现,Ni 原子周围的成单电子云明显要比 Fe 原子的小,这也与前文 2.1 部分中 Ni 原子的成单电子小于 Fe 原子的结论相互印证,说明团簇 Fe_3Ni_3 的成单电子数主要由 Fe 原子提供,即 Fe 原子对团簇 Fe_3Ni_3 磁性的贡献大于 Ni 原子。值得注意的是构型 $5^{(3)}$ 中 Fe1 原子的电子云形状与其他构型的 Fe1 原子电子云具有明显差异,周围既有绿色代表自旋向上的 α 电子云,也有蓝色代表自旋向下的 β 电子云,分析认为该构型的 Fe1 原子 d 轨道中自旋向上的 α 电子较少,而与之成键的 Fe3、Ni1、Ni2 原子 d 轨道的 β 电子较多,进而影响该原子核外电子自旋态密度。

3.2.2 电子自旋磁矩

团簇 Fe_3Ni_3 中的两种原子 Fe、Ni 均为 3 d 过渡金属,其中电子绕原子核运动具有轨道磁矩,电子因自旋具有自旋磁矩,由于原子的电子会转化为相邻原子的共有电子,导致原子的电子结构发生转变,部分轨道磁矩冻结,无法对构型磁矩做出贡献,因此电子的自旋磁矩为构型磁矩的主要贡献者。电子自旋磁矩主要由未成对电子即成单电子自旋所产生,且电子自旋方向相反的自旋磁矩可相互抵消,因此电子自旋磁矩与成单电子的分布情况以及电子的自旋方向密切相关。目前常用自旋布居数 n (成单电子数)与玻尔磁子(μ_B)的乘积表示电子自旋磁矩,玻尔磁子的国际标准定义为

$$\mu_B = \frac{eh}{4\pi m_e}$$

(1)

其中: e 为电荷量; h 为普朗克常数; m_e 为电子质量,计算得出 $\mu_B = 9.274 \times 10^{-24} \text{ J/T}$ 。由于玻尔磁子为定值,所以只需通过比较自旋布居数(成单电子数),进而对各优化构型的磁矩进行分析。

结合表 1 中数据对 Fe、Ni 两种原子自旋布居数进行代数之和计算(ΣFe 、 ΣNi),绘制出各构型中两种原子自旋布居数曲线图如图 3 所示。

由图 3 可见,各构型中 Fe、Ni 两种原子内部所有的成单电子经过自旋方向相同的叠加与自旋方向相反的抵消后,所具有的自旋布居数数值上正负相反,即 Fe 原子与 Ni 原子所产生的电子自旋磁矩方

向相反。构型 $1^{(3)} \sim 3^{(3)}$ 的自旋布居数 ΣFe 均为正值,而 ΣNi 均为负值,且 ΣFe 的绝对值大于 ΣNi 的绝对值;而稳定性较差的构型 $4^{(3)} \sim 5^{(3)}$ 情况完全相反,两者的自旋布居数 ΣFe 均为负值,而 ΣNi 均为正值, ΣNi 的绝对值大于 ΣFe 的绝对值。综上所述,说明稳定性较好的构型 $1^{(3)} \sim 3^{(3)}$ 中 Fe 原子对团簇磁性起主要贡献作用,稳定性较差的构型 $4^{(3)} \sim 5^{(3)}$ 中 Ni 原子为团簇磁性的主要贡献者。由于稳定构型更有利于现实中存在与生产利用,因此稳定构型中 Fe 原子的含量对团簇 Fe_3Ni_3 的磁性起主要影响作用,为日后实际生产过程中团簇 Fe_3Ni_3 的制备起到指导作用。

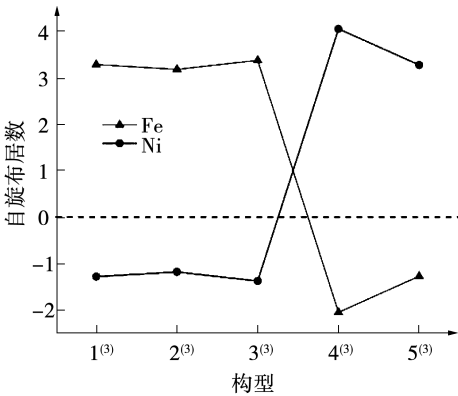


图 3 团簇 Fe_3Ni_3 5 种优化构型的自旋布居数 ΣFe 与 ΣNi 曲线图

Fig. 3 The spin population ΣFe and ΣNi curves of 5 optimized configurations of cluster Fe_3Ni_3

为直观地表现出团簇 Fe_3Ni_3 的各优化构型 s、p、d 原子轨道对磁矩的贡献特点,由表 1 数据绘制出各优化构型的 s、p、d 轨道自旋布居数条形柱状图,如图 4 所示。

由图 4 可知,除构型 $4^{(3)}$ 外,其余构型的 d 轨道成单电子均为自旋向上的 α 电子且数值上相较于 s、p 轨道较大,即表明大多数构型的磁矩由 d 轨道的 α 电子提供的。但值得注意的是,构型 $4^{(3)}$ 的 s、p 轨道自旋布居数大于 d 轨道且三者数值相差较小,由前文 2.1 部分中表 1 数据分析可知,构型 $4^{(3)}$ 的 Fe1、Fe2 原子 d 轨道具有自旋向下的 β 电子且数值较大,其余原子 d 轨道均为 α 电子,因此整体电子自旋磁矩抵消后 d 轨道自旋布居数数值较小,而该构型 p 轨道的成单电子均为 α 电子,除 Fe1、Fe2 原子以外其余原子的 s 轨道成单电子均为 α 电子,因而造成该构型 s、p 轨道电子自旋磁矩叠加后自旋布居数大于其 d 轨道自旋布居数。

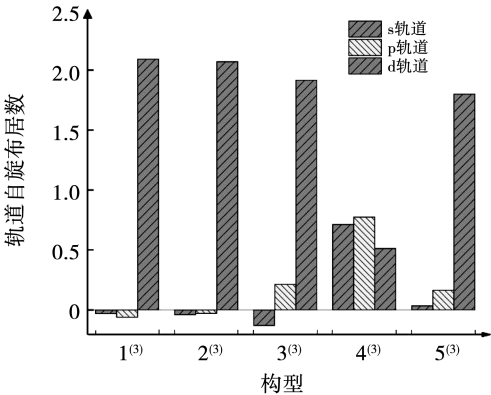


图 4 团簇 Fe_3Ni_3 5 种优化构型 s、p、d 轨道自旋布居数柱状图

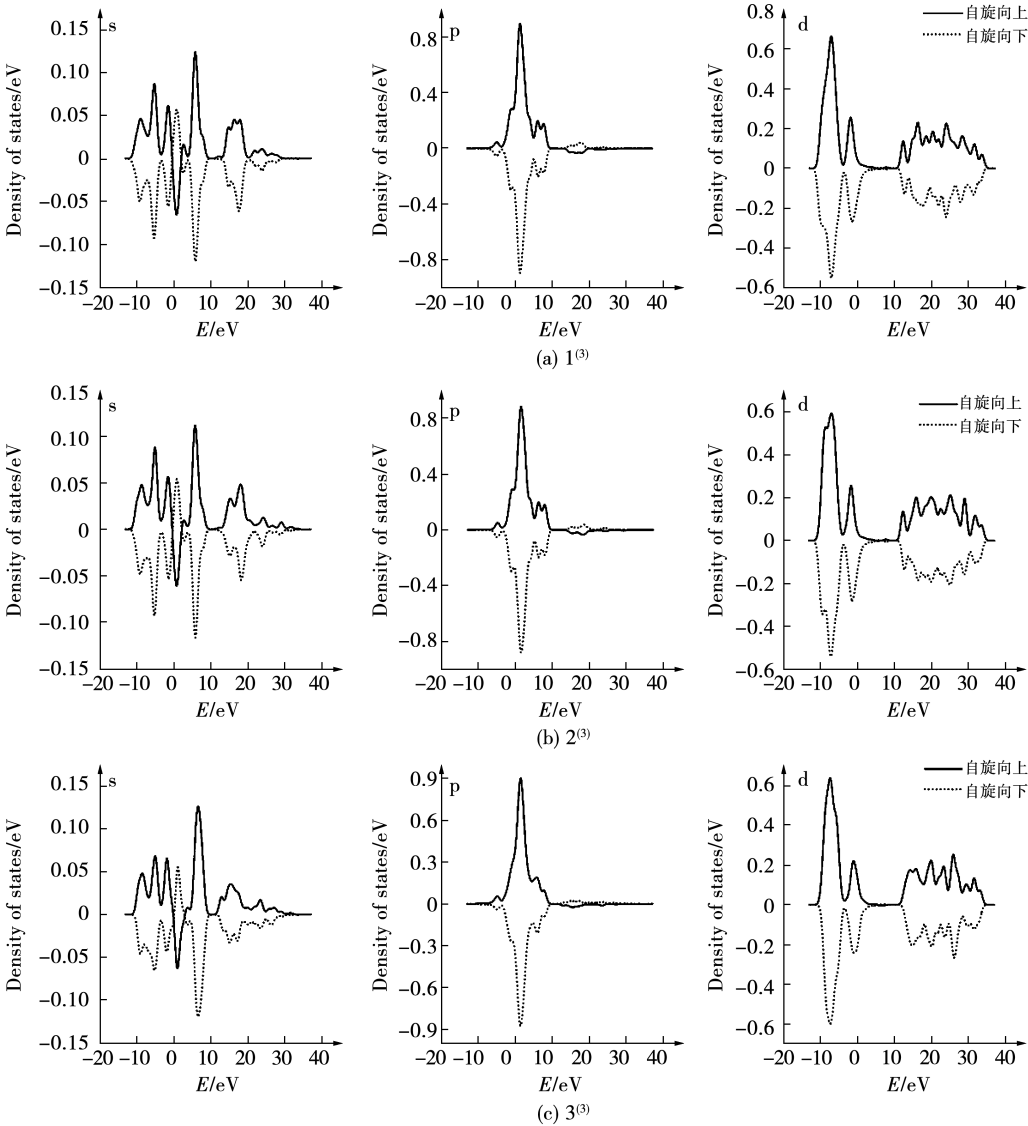
Fig. 4 Histogram of S, P, d orbital spin population of optimized configurations of cluster Fe_3Ni_3

3.2.3 轨道自旋态密度分析

轨道态密度不仅可以直观地分析团簇优化构型中各轨道的磁性贡献情况,还可以通过轨道态密度

了解各构型自旋向上的 α 电子和自旋向下的 β 电子以及不同类型的电子在具体能量片段上的分布情况。轨道态密度图分布越对称,说明该轨道的成单电子数越少,对磁性的贡献越小,反之,态密度图分布越不对称,说明该轨道的成单电子数越多,对磁性的贡献越大。

由图 5 可知,团簇 Fe_3Ni_3 各优化构型中,除构型 3⁽³⁾ 的 s 轨道低能量区(- 15 ~ 10 eV)对称性较差之外,其余构型 s 轨道低能量区(- 15 ~ 10 eV)对称性较好,而高能量区片段(10 ~ 30 eV)对称性均较差;p 轨道整体来看对称性较好,但构型 3⁽³⁾ 与 4⁽³⁾ 的低能量区(- 5 ~ 10 eV)对称性稍差;在所有构型中 d 轨道的对称性均最差。整体分析说明各优化构型的 s、p 轨道的成单电子数较少,即表明各优化构型的 s、p 轨道对团簇磁性贡献较小;d 轨道的态密度曲线对称性最差,表明各优化构型的成单电子主要存在于 d 轨道中,说明 d 轨道对团簇 Fe_3Ni_3 的磁性贡献起主要贡献作用。



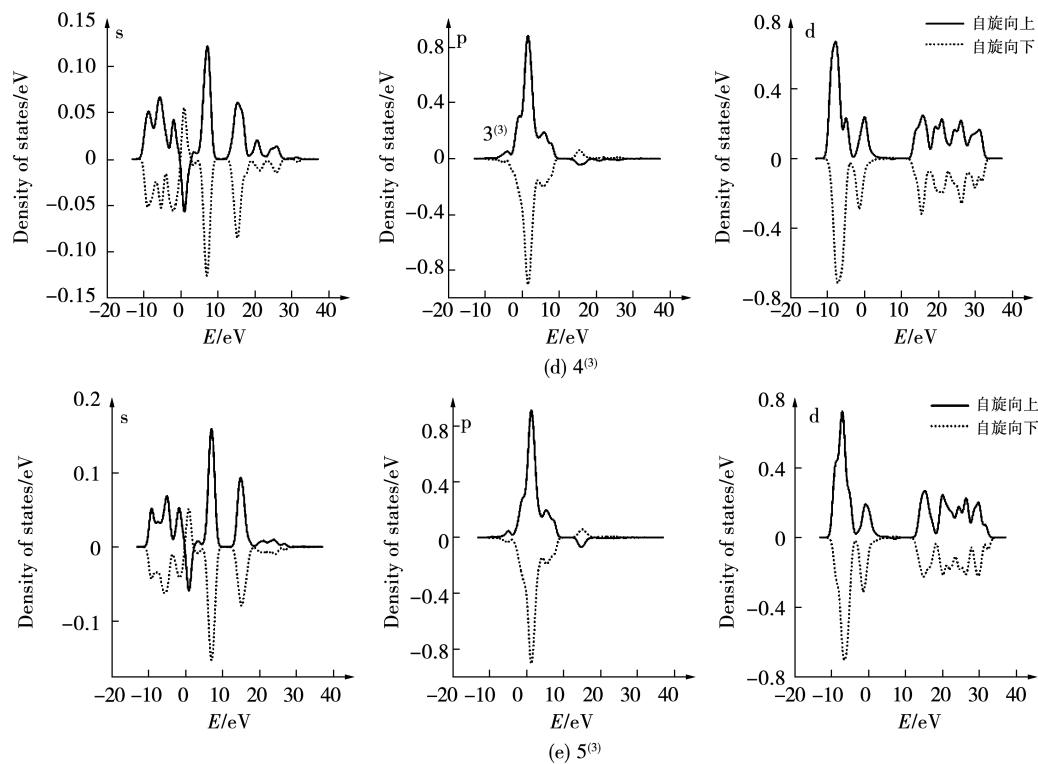


图 5 团簇 Fe_3Ni_3 各构型 s、p、d 轨道态密度分布
Fig. 5 Density distribution of states of s、p and d orbital of various configuration of Fe_3Ni_3

值得注意的是, s 轨道的 0 ~ 3 eV 能量区与 p 轨道的 10 ~ 30 eV 高能量区均出现 α 电子与 β 电子进行相互转换。这是由于 Fe、Ni 原子的电子自旋磁矩相反, 部分电子的自旋方向在具有相反磁性原子附近通过自旋 - 轨道耦合作用发生转变^[23], 但对整体团簇的磁性影响较小。

4 结 论

对团簇 Fe_3Ni_3 的 5 种优化构型从 Mulliken 自旋布居数及磁学性质进行分析得到以下结论:

1) 团簇 Fe_3Ni_3 所有构型中, Fe 原子与 Ni 原子的成单电子自旋方向相反, 且 Fe 原子 d 轨道上的成单电子多于 Ni 原子; 各原子的成单电子主要分布在 d 轨道; 各构型中原子内 s、p 轨道具有自旋方向相反的成单电子, 对构型的热力学稳定性具有一定的削弱作用, 但不起决定性作用。

2) 各优化构型的 Fe、Ni 两种原子电子自旋磁矩方向相反, 对构型的磁性起拮抗作用, Fe 原子的对磁矩的贡献相较于 Ni 原子高, 对团簇磁性起主要贡献作用; 各优化构型的 s、p 轨道对磁性贡献较小, d 轨道对团簇 Fe_3Ni_3 的磁性贡献占主要部分; 团簇 Fe_3Ni_3 的 s、p 轨道特定能量片段上的 α 、 β 电子可

以发生自旋相互耦合进而相互转换。

参 考 文 献:

[1] 王广厚. 团簇物理学 [M]. 上海: 上海科技出版社, 2003: 1.

[2] GLASSCOTT M W, PENDERGAST A D, Goines S, et al. Electrosynthesis of High-entropy Metallic Glass Nanoparticles for Designer, Multi-functional Electrocatalysis [J]. Nature Communications, 2019, 10(1): 1.

[3] ZUO L, LI R, JIN Y, et al. Homogeneous Nanoporous Ni Particles Produced by Dealloying Mg-based Metallic Glass as Efficient Hydrogen Evolution Electrocatalyst [J]. Journal of The Electrochemical Society, 2018, 165 (3): 207.

[4] 方志刚, 许友, 王智瑶, 等. 基于量子化学的团簇 Co_4P 非晶态合金析氢反应研究 [J]. 江西师范大学学报 (自然科学版), 2022, 46(3): 221.

FANG Z G, XU Y, WANG Z Y, et al. Study on Hydrogen Evolution Reaction of Cluster Co_4P Amorphous Alloy Based on Quantum Chemistry [J]. Journal of Jiangxi Normal University (Natural Science Edition), 2022, 46(3): 221.

[5] 秦渝, 方志刚, 张伟, 等. Co_3NiB 催化析氢活性研究 [J]. 江西师范大学学报 (自然科学版), 2020, 44 (1): 56.

- QIN Y, FANG Z G, ZHANG W, et al. Study on the Catalytic Activity of Co_3NiB for Hydrogen Evolution [J]. Journal of Jiangxi Normal University (Natural Science Edition), 2020, 44(1): 56.
- [6] 徐诗浩,方志刚,韩建铭,等. 团簇 V_3B_2 成键及磁性性质研究[J]. 广西师范大学学报(自然科学版), 2017, 35(3): 89.
- XU S H, FANG Z G, HAN J M, et al. Research on the Bonding and Magnetic Properties of V_3B_2 Clusters [J]. Journal of Guangxi Normal University (Natural Science Edition), 2017, 35(3): 89.
- [7] LV Y, CHEN Q, HUANG Y. Tunable Curie Temperature and Magnetocaloric Effect of FeCrMoCBYNi Bulk Metallic Glass with Different Crystallized Phases [J]. Journal of Rare Earths, 2019, 37(4): 74.
- [8] 侯欠欠,方志刚,秦渝,等. 团簇 Fe_4P 的成键及极化率探究[J]. 广西师范大学学报(自然科学版), 2021, 39(6): 140.
- HOU Q Q, FANG Z G, QIN Y, et al. Study on the Polarization of Fe_4P Clusters [J]. Journal of Guangxi Normal University (Natural Science Edition), 2021, 39(6): 140.
- [9] 朱泓宇,杨慧敏. V 对 Ti-48Ni-3Fe 合金组织及力学性能的影响[J]. 哈尔滨理工大学学报, 2021, 26(4): 9.
- ZHU H Y, YANG H M N. V Effect on Microstructure and Mechanical Properties of Ti-48Ni-3Fe Alloy [J]. Journal of Harbin University of Science and Technology, 2021, 26(4): 9.
- [10] 郑新喜,方志刚,秦渝,等. 团簇 Fe_3Ni_3 电子性质[J]. 贵州大学学报(自然科学版), 2021, 38(5): 7.
- ZHENG X X, FANG Z G, QIN Y, et al. Electronic Properties of Cluster Fe_3Ni_3 [J]. Journal of Guizhou University (Natural Science Edition), 2021, 38(5): 7.
- [11] ZHANG B, WANG J, WU B, et al. Unmasking Chloride Attack on the Passive Film of Metals [J]. Nature Communications, 2018, 9(1): 1.
- [12] LIU J, LI X, RYKOV A I, et al. Zinc-modulated Fe-Co-prussian Blue Analogues with Well-controlled Morphology for Efficient Cesium Sorption [J]. Journal of Materials Chemistry A, 2017, 5(7): 3284.
- [13] YAMAZAKI T, YAMAMOTO T, FURUYA Y, et al. Magnetic and Magnetostrictive Properties in Heat-treated Fe-Co Wire for Smart Material/Device [J]. Mechanical Engineering Journal, 2018, 5(2): 1.
- [14] YET, GORBATO A O I, BORGENTAM A, et al. Deformation Microstructure and Deformation-Induced Martensite in Austenitic Fe-Cr-Ni Alloys Depending on Stacking Fault Energy [J]. Metallurgical and Materials Transactions, 2017, 48(1): 1.
- [15] KUMAR A, KHATIRKAR R K, GUPTA A, et al. Deciphering the Possible Role of Strain Path on the Evolution of Microstructure, Texture, and Magnetic Properties in a Fe-Cr-Ni Alloy [J]. Metallurgical & Materials Transactions A, 2018, 49(8): 3402.
- [16] ZHANG Y, HOU X, LI X, et al. FeNi Alloy Nanoparticles Embedded in Electrospun Nitrogen-doped Carbon Fibers for Efficient Oxygen Evolution Reaction [J]. Journal of Colloid and Interface Science, 2020, 578: 805.
- [17] 姚可夫,施凌翔,陈双琴,等. 铁基软磁非晶/纳米晶合金研究进展及应用前景 [J]. 物理学报, 2018, 67(1): 8.
- YAO K F, SHI L X, CHEN S Q, et al. Research Progress and Application Prospect of Iron-based Soft Magnetic Amorphous/Nanocrystalline Alloys [J]. Journal of Physics, 2018, 67(1): 8.
- [18] YANG L, ZENG X, WANG D, et al. Biomass-derived FeNi Alloy and Nitrogen-codoped Porous Carbons as Highly Efficient Oxygen Reduction and Evolution Bifunctional Electrocatalysts for Rechargeable Zn-air Battery [J]. Energy Storage Materials, 2018, 12: 277.
- [19] YU X G. Hyperbolic Multi-topology and the Basic Principle in Quantum Mechanics [J]. Advances in Applied Clifford Algebras, 1999, 9(1): 109.
- [20] ARGAMAN N, MAKOV G. Density Functional Theory: An Introduction [J]. American Journal of Physics, 2000, 68(1): 69.
- [21] TOUZANI R S, REHORN C W. G and FOKWA B P. T. Influence of Chemical Bonding and Magnetism on Elastic Properties of the $A_2\text{MB}_2$ Borides ($A = \text{Nb, Ta}$; $M = \text{Fe, Ru, Os}$) from First-principles Calculations [J]. Computational Materials Science, 2015, 104: 52.
- [22] WADT W R, HAY P J. Ab Initio Effective Core Potentials for Molecular Calculations. Potentials for Main Group Elements Na to Bi [J]. The Journal of Chemical Physics, 1985, 82(1): 284.
- [23] KISELVE S I, SANKEY J C, Krivorotov I N, et al. Microwave Oscillations of a Nanomagnet Driven by a Spin-polarized Current [J]. Nature, 2003, 425(6956): 380.

(编辑:温泽宇)