

金属间化合物 $YFe_{11}Ti$ 中替代元素的致稳机理 与系统磁性的理论研究*

高国强^{1)†} 陈波¹⁾ 黄整^{2)†} 张秀兰²⁾ 孙光爱¹⁾ 黄华山²⁾ 余聪²⁾

1) 中国工程物理研究院核物理与化学研究所, 绵阳 621900)

2) 西南交通大学理学院, 成都 610031)

(2006 年 1 月 14 日收到, 2006 年 4 月 21 日收到修改稿)

基于密度泛函理论(DFT),采用线性缀加平面波展式结合改进的局域轨道方法(APW+lo),对具有 $ThMn_{12}$ 结构的永磁材料 $YFe_{11}Ti$ 的结构和磁性进行了计算和分析. 计算了 YFe_{12} , Y_2Fe_{17} , $YFe_{11}Ti$ 的生成能,探讨了替代元素 Ti 的加入使 YFe_{12} 系统能够保持稳定的 $ThMn_{12}$ 结构的原因以及 Ti 在系统中的最佳可能占位. 给出了系统的晶体磁矩和各晶位原子的磁矩以及系统的电子态密度,分析了系统磁性的来源和各晶位原子磁矩的大小与其配位数和平均近邻原子距离的关系.

关键词: $ThMn_{12}$, 密度泛函, 生成能, 磁矩

PACC: 7128, 7520H, 7530M

1. 引言

近十年来,具有 $ThMn_{12}$ 型结构的富 Fe 稀土 (R)—过渡族 (T) 金属间化合物的研究受到了极大的重视,一方面由于在这类化合物中发现了新型的稀土永磁材料,另一方面还因为这类化合物显示出了丰富的磁性^[1]. 大量的实验研究表明,具有 $ThMn_{12}$ 稳定结构的 $R-Fe$ 化合物是不存在的,只有在加入了作为致稳元素的第三方元素 M ($M = Ti, V, Mo, Si$ 等)之后,系统才能形成稳定的具有 $ThMn_{12}$ 结构的化合物^[2-6]. 目前,对此类化合物的结构和不同替代元素所产生的磁性特征方面的实验研究已有大量的报导^[7,8],但对于 RFe_{12} 化合物不能稳定存在的原因和替代元素导致系统稳定的机理以及替代元素在系统中的最佳占位的理论研究尚不多见. 祁守仁、黄晓东等曾采用 LMTO 方法对 $NdFe_{10}Mo_2$ 的电子结构与磁性进行了计算^[9]; Sakuma 也曾采用 LMTO-ASA 方法对 $YFe_{11}Ti$ 系统的结构和磁性进行了研究^[10,11],但这些计算与分析并未涉及到 $ThMn_{12}$ 型化合物的稳定性和替代元素的致稳机理,并且 Sakuma 得到的替

代元素占位顺序与实验结果并不一致. 本文针对 $Y-Fe-Ti$ 系统,采用 APW+lo 方法^[12],结合广义梯度近似(GGA),分析了 YFe_{12} 不能稳定存在的原因,探讨了替代元素 Ti 的加入导致系统结构稳定的机理和替代元素在系统中的占位顺序,计算了系统的磁性和电子态密度,以期为进一步研究 1:12 型化合物的磁温关系及其微观机理打下基础.

2. 计算方法

线性缀加平面波展开法(LAPW)是目前计算晶体电子结构最为准确的方法之一^[13]. LAPW 方法在处理电子的交换相关势时,以密度泛函理论(DFT)为基础,考虑相对论效应,并使用局域自旋密度近似(LSDA)或广义梯度近似(GGA)等方法. 与许多其他能带计算方法相同,LAPW 方法也是利用求解 Kohn-Sham 方程来得到系统电子的基态能量和密度,将系统分为非重叠的原子球区域和间隙区域,不同的区域采用不同的函数基集合. 在原子球区域,采用通常的径向函数和球谐函数乘积的线性组合作为系统的波函数;在间隙区域,采用平面波展式作为系统的波

* 中国工程物理研究院科学技术基金(批准号 20040863)资助的课题.

† 联系作者: E-mail: zhhuang@home.swjtu.edu.cn

函数. 在应用 LAPW 方法时, 为了增加波函数的灵活性并保证基函数的正交性质, 通常需要在波函数中加入额外的基函数, 即局域轨道(LO)标准的 LAPW 方法一般要求局域轨道在原子球边界上为零值并且光滑. 这种方法适应性广, 计算精度高, 但收敛速度比较慢. 在此基础上, Sjöstedt 等人提出了改进的 LAPW 方法, 即 APW + lo 方法^[12]. 在 APW + lo 方法中, 不要求局域轨道在原子球边界上平滑, 从而大大地加快了计算的收敛速度, 其计算精度与标准的 LAPW 方法相当, 能够有效地处理多电子系统.

本文计算中采用 APW + lo 方法结合 GGA 的密度泛函理论. 价态电子与内壳层电子的能量截断因子为 -0.6 Ry , 各原子的价带轨道分别为 Y: $4s4p4d5s$, Fe $3p3d4s$, Ti $3s3p3d4s$. Y, Fe, Ti 的原子球 muffin-tin 半径分别取 2.7 a.u. , 2.1 a.u. , 2.3 a.u. , 基函数的平面波 k 点数目为 100, 不可约布里渊区的采样点数为 26, 自洽场计算的收敛判据为总能量变化小于等于 0.0001 Ry . 计算由晶体结构计算程序包 Wien2k 完成^[14].

3. 计算结果与讨论

3.1. Y-Fe-Ti 系统的结构

R -Fe 金属间化合物为 $ThMn_{12}$ 结构, 如图 1 所示, 属于四方结构, 空间群为 $I4/mmm$, R 原子占据 $2a$ 位, Fe 原子在晶体中占据三种不同的晶位, 分别是 $8i$, $8j$, $8f$ 位, 每种晶位上有四个等价的 Fe 原子. 对于 Y-Fe-Ti 合金系统, Hu 等人曾实验研究 $YFe_{11-x}Ti_x$ 合金的结构变化随 Ti 含量的关系: 当 Ti 的含量很少时, 具有 $ThMn_{12}$ 结构的纯 YFe_{12} 并不存在, 而是具有 Th_2Ni_{17} 结构的 Y_2Fe_{17} 和 Fe 的混合物, 随着 Ti 的含量的增加, 系统逐渐由 Th_2Ni_{17} 结构相转变为具有 $ThMn_{12}$ 结构的 $YFe_{11}Ti$ ^[15,16]. 对于 YFe_{12} 不能存在的原因和 Ti 加入后导致系统能够保持 $ThMn_{12}$ 结构的机

理尚不是太清楚. 为此, 我们分别计算了 YFe_{12} , Y_2Fe_{17} , $YFe_{11}Ti$ 的生成能, 通过生成能的对比, 定量分析了具有 $ThMn_{12}$ 结构的 YFe_{12} 不能存在的原因和 Ti 在系统中的致稳机理.

对于 $YFe_{11}Ti$ 系统, 它是由一个 Ti 原子取代 YFe_{12} 中的一个 Fe 原子构成的, 由于 Fe 原子有 $8i$, $8j$, $8f$ 三个不同的晶位, 因此 Ti 取代系统的一个 Fe 原子时也有三种可能的取代方式, 在实际中 Ti 原子的最优取代占位方式应当遵循使系统能量最低的原则. 为此, 本文将晶胞参数和原子位置固定, 计算并比较 Ti 原子分别取代 $8i$, $8j$, $8f$ 晶位上的 Fe 原子时系统的能量, 根据能量最低原则探讨了 Ti 原子的最优取代方式. 表 1 和表 2 分别为计算中使用的晶格参数和原子的相对坐标.

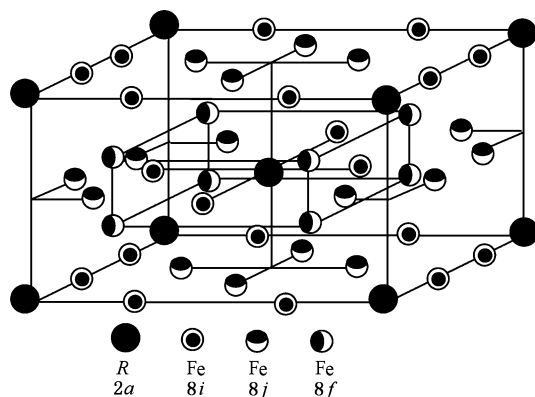


图 1 $ThMn_{12}$ 型晶体结构

表 1 晶格参数的实验值和优化值

		a/nm	c/nm	V/nm^3
Y	优化值	0.3477	0.3303	0.1037
Fe	优化值	0.2829	0.2829	0.0226
Ti	优化值	0.2778	0.2667	0.0535
$YFe_{11}Ti$	优化值	0.8359	0.4719	0.330
	实验值 ^[17]	0.8498	0.4785	0.3448
YFe_{12}	优化值	0.8482	0.4788	0.3445
Y_2Fe_{17}	实验值 ^[18]	0.848	0.826	0.514

表 2 原子的相对坐标

原子	R				Fe			
晶位	$2a$		$8i$		$8j$		$8f$	
坐标	(0.00 0.00 0.00)		(0.36 0.00 0.00)		(0.00 0.22 0.50)		(0.25 0.25 0.25)	
			(0.64 0.00 0.00)		(0.00 0.78 0.50)		(0.75 0.25 0.25)	
			(0.00 0.36 0.00)		(0.22 0.00 0.50)		(0.25 0.75 0.25)	
			(0.00 0.64 0.00)		(0.78 0.00 0.50)		(0.75 0.75 0.25)	

3.2. 系统结构稳定性

通过优化计算,我们得到了具有 ThMn_{12} 结构的

表 3 Y, Fe, Ti, YFe_{12} , YFe_{11}Ti , Y_2Fe_{17} 的晶体能量

	YFe_{12}	YFe_{11}Ti	Y_2Fe_{17}	Y	Fe	Ti
E/Ry	-37318.5038	-36480.6237	-56818.0080	-6771.3930	-2545.5825	-1707.5992

这里所计算的晶体能量是指一个原胞的能量.

金属单质生成金属化合物的过程中, YFe_{12} , YFe_{11}Ti 和 Y_2Fe_{17} 的生成能分别为:

$$\begin{aligned} \text{Y} + 12\text{Fe} &\longrightarrow \text{YFe}_{12}, \\ \Delta E(\text{YFe}_{12}) &= E(\text{YFe}_{12}) - E(\text{Y}) \\ &\quad - 12E(\text{Fe}) = -0.1208\text{Ry}; \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \text{Y} + 11\text{Fe} + \text{Ti} &\longrightarrow \text{YFe}_{11}\text{Ti}, \\ \Delta E(\text{YFe}_{11}\text{Ti}) &= E(\text{YFe}_{11}\text{Ti}) - E(\text{Y}) \\ &\quad - 11E(\text{Fe}) - E(\text{Ti}) = -0.2240\text{Ry}; \end{aligned} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} 2\text{Y} + 17\text{Fe} &\longrightarrow \text{Y}_2\text{Fe}_{17}, \\ \Delta E(\text{Y}_2\text{Fe}_{17}) &= E(\text{Y}_2\text{Fe}_{17}) - 2E(\text{Y}) - 17E(\text{Fe}) \\ &= -0.3195\text{Ry}. \end{aligned} \quad (3)$$

这三种金属化合物的生成能都小于零,它们都应该能以稳定的金属化合物存在,但在现实中,并没有发现具有 ThMn_{12} 结构纯的 YFe_{12} 晶体. Hu 等人的实验结果表明当 $x < 0.7$ 时, $\text{Th}_2\text{Ni}_{17}$ 结构为主相,当 $0.7 \leq x \leq 1.25$ 时, ThMn_{12} 结构为主相^[15,16]. 由此可以认为,当 Y 和 Fe 混合时,系统容易形成具有 $\text{Th}_2\text{Ni}_{17}$ 结构的 Y_2Fe_{17} 和 $\alpha\text{-Fe}$ 混合合金而不易形成具有 ThMn_{12} 结构的 YFe_{12} 晶体. 考察由 YFe_{12} 转变为 Y_2Fe_{17} 的过程: $2\text{YFe}_{12} \longrightarrow \text{Y}_2\text{Fe}_{17} + 7\text{Fe}$ 相变能量为

$$\begin{aligned} \Delta E(\text{YFe}_{12} \longrightarrow \text{Y}_2\text{Fe}_{17}) &= E(\text{Y}_2\text{Fe}_{17}) + 7E(\text{Fe}) - 2E(\text{YFe}_{12}) \\ &= -0.0779\text{Ry}, \end{aligned} \quad (4)$$

这是一个释放能量的过程,它是具有 ThMn_{12} 结构的 YFe_{12} 不能稳定存在的原因.

同理,随着替代元素 Ti 的加入,系统将逐渐由 $\text{Th}_2\text{Ni}_{17}$ 结构转变成具有 ThMn_{12} 结构的 YFe_{11}Ti : $\text{Y}_2\text{Fe}_{17} + 5\text{Fe} + 2\text{Ti} \longrightarrow 2\text{YFe}_{11}\text{Ti}$, 这个转变过程的相变能量为

$$\begin{aligned} \Delta E(\text{Y}_2\text{Fe}_{17} \longrightarrow \text{YFe}_{11}\text{Ti}) &= 2E(\text{YFe}_{11}\text{Ti}) - E(\text{Y}_2\text{Fe}_{17}) \\ &\quad - 5E(\text{Fe}) - 2E(\text{Ti}) \\ &= -0.1285\text{Ry}. \end{aligned} \quad (5)$$

由此可见,形成具有 ThMn_{12} 结构的 YFe_{11}Ti 系统比形

YFe_{12} , YFe_{11}Ti 和具有 $\text{Th}_2\text{Ni}_{17}$ 结构的 Y_2Fe_{17} 的晶体能量以及 Y, Fe, Ti 单质的能量,列于表 3 中. 需要指出的是图 1 中所示的晶胞中包含了两个相同的原胞,

成具有 $\text{Th}_2\text{Ni}_{17}$ 结构的 Y_2Fe_{17} 系统在能量上更占优势, Ti 的加入降低了形成 ThMn_{12} 结构的能量,这就是加入替代元素 Ti 能导致系统保持稳定 ThMn_{12} 结构的原因.

3.3. 替代元素 Ti 的占位

ThMn_{12} 结构 R-Fe 化合物中的 Fe 原子有三个不等价的晶位,分别是 $8i$, $8j$, $8f$ 位,替代元素 Ti 随机的取代不同晶位上的 Fe 原子. 表 4 给出了 Ti 取代三个不同晶位上的 Fe 原子时,系统的能量.

表 4 Ti 原子取代不同晶位 Fe 原子时的晶体能量

Ti 的取代位置	系统能量 E/Ry
$8f(0.25, 0.25, 0.25)$	-36480.5644
$8j(0.22, 0.00, 0.50)$	-36480.5792
$8i(0.36, 0.00, 0.00)$	-36480.6226

从表 4 中的数据可知, Ti 取代系统中不同晶位上的 Fe 原子时,系统的能量顺序为 $E(8i) < E(8j) < E(8f)$, 主要原因是由于不同晶位的 Fe 原子间的相互作用不同. 这表明, Ti 在取代系统中的 Fe 原子时,会有一定的优先取代顺序,根据能量最低原则, Ti 一般会优先取代位于 $8i$ 位置上的 Fe 原子,这与 Wang 等人实验中观测到的结果一致^[19]. Sakuma 曾采用 LMTO-ASA 方法对 YFe_{11}Ti 系统进行过计算^[11], 能量顺序为 $E(8i) > E(8j) > E(8f)$, 与本文的计算结果刚好相反,其原因是由于 Sakuma 在计算中采用了 Barth 和 Hedin 于 1972 年导出^[20], 并由 Janak 于 1978 年参数化^[21] 的交换相关势形式,而本文的计算采用的是目前广泛使用的 Perdew 等人于 1996 年引入了 GGA 而导出的交换相关势形式^[22]. 一般认为,将密度泛函理论应用于实际计算时,交换相关势所采用的形式对计算的结果往往具有很重要的影响,可见本文所采用的交换相关势形式能够更好地描述 YFe_{11}Ti 的电子状态.

3.4. 系统的磁性

本文计算了纯 YFe_{12} 和替代原子 Ti 占据 $8i$ 位时

系统在各个晶位上原子的磁矩和晶体整体磁矩。Ti 取代 $8i$ 晶位上的 Fe 原子造成了系统对称性破缺, $8f$ 晶位的对称性保持不变, $8j$ 、 $8i$ 晶位分别分裂成三个不等价晶位。表 5 给出了各晶位上原子的磁矩和系统的整体磁矩。从表中的数据可以看出,系统磁性的主要贡献来源于系统中的 Fe 原子的磁矩。对比表 2 中的数据, YFe_{12} 与 $YFe_{11}Ti$ 的体积相差不是太大, Ti 的加入导致系统 Fe 原子的浓度降低。通过计算可知,单个 Fe 原子的磁矩为 $2.24\mu_B$,但对比 YFe_{12} 与 $YFe_{11}Ti$ 的各晶位的磁矩和晶体磁矩,可以看出 Ti 的加入导致系统的磁矩大大降低,降低的幅度远大于由于 Fe 原子浓度被稀释而降低的幅度。可见 Ti 的加入不仅稀释了 Fe 原子的浓度,而且还改变了 Fe 原子间的相互作用。其原因是由于 Ti 的加入使系统的电子云的分布发生了变化,降低了 Fe 原子间的交换相互作用。从表 5 我们还看到系统 $8i$ 、 $8j$ 、 $8f$ 晶位上的 Fe 原子的平均磁矩存在一定的差异。为此,

表 5 $YFe_{11}Ti$ 的原子磁矩 (μ_B/atom) 和晶体磁矩 ($\mu_B/\text{f.u.}$)

各晶位原子	YFe_{12}	$YFe_{11}Ti$	
		本文	LMTO 方法 ^[10,11]
Y(2a)	-0.27	-0.24	-0.46
Fe(8f)	2.07	1.80	1.70
Fe(8j - I)	2.41	2.13	2.23
Fe(8j - II)		2.21	2.28
Fe(8j - III)		1.97	2.19
Fe(8i - I)	2.61	2.36	2.55
Fe(8i - II)		2.14	2.20
Ti(8i - III)		-0.56	-0.83
晶体磁矩	计算值	27.08	21.73
	实验值		$20.6\mu_B$ ^[17]

我们分析了处于这些晶位原子的配位数和平均近邻原子距离。表 6 中列出了各晶位原子的配位数和平均近邻原子距离。分析可知, $8i$ 位原子的配位数比 $8f$ 和 $8j$ 位的大, $8f$ 和 $8j$ 位的配位数虽然相同,但是 $8j$ 位的平均近邻原子距离比 $8f$ 位的大,从而可以在表 5 中观察到 $\mu(8i) > \mu(8j) > \mu(8f)$, 这与 Hu 等得到的结论相同^[15]。由此可见,原子的磁矩与不同晶位的配位数和 Fe-Fe 间的平均近邻原子间距有着密切的关系。可以定性认为, Fe 原子的配位数越大,磁矩越大,在配位数相同时,平均近邻原子距离越大,磁矩越大。

表 6 各晶位原子的配位数和对应晶位的平均原子距离 (nm) (括号中的数值)

	2a	8i	8j	8f
8i	1(0.4857)	3(0.3199)	4(0.3703)	4(0.3612)
8j	3(0.3894)	4(0.3703)	3(0.3928)	4(0.3714)
8f	3(0.3898)	4(0.3612)	4(0.3714)	3(0.3576)

根据海森伯铁磁理论,系统磁性主要来源于电子间的交换作用。对于 Y-Fe-Ti 系统,存在 Y-Fe, Fe-Fe, Fe-Ti, Y-Ti 原子间的电子交换作用。为了深入地分析各晶位原子的电子间的交换作用,图 2 给出了各晶位原子的电子自旋态密度,其中(a)(b)(c)给出了 $8i$ 、 $8f$ 、 $8j$ 晶位 Fe 原子的电子自旋向上和向下的态密度,由于自旋向上和向下的电子态密度在同一能量点时,差异较大,占据这些晶位的原子的电子处于自旋未配的状态居多,这些电子间的交换作用是系统磁性的主要来源,因此对系统磁性贡献最大的是 Fe-Fe 原子间的交换作用,表 5 中的数据也反映了这一点。图 2 中的(d)和(e)给出了 Y 与 Ti 原子的电子态密度,由于它们自旋向上和向下的电子态

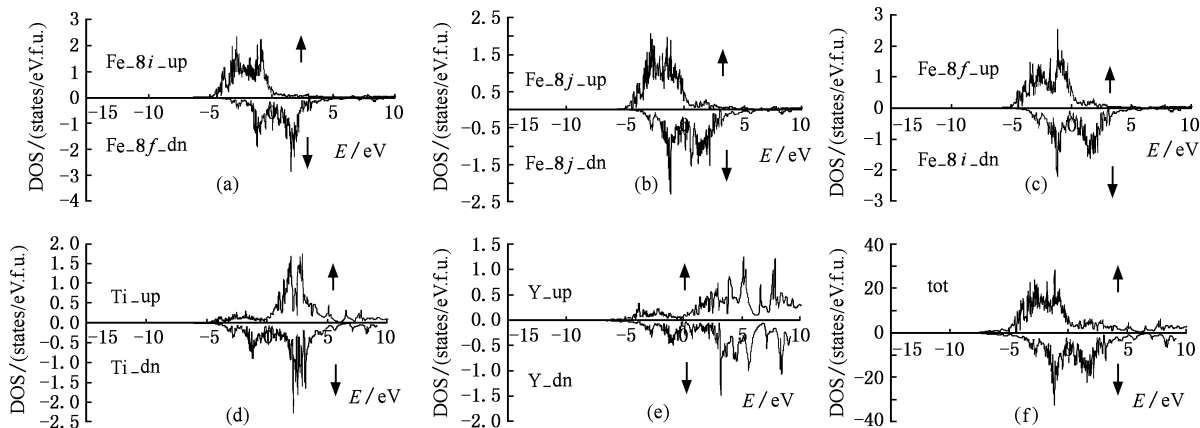


图 2 各晶位原子及晶体自旋向上(↑)和向下(↓)的电子态密度

密度在能量上分布比较对称,电子大部分处于自旋配对状态,对系统的磁性贡献不大,通常认为 Y 和 Ti 是没有磁性的.图 2 中的 (f) 给出了晶体整体的自旋态密度图像,从中可以看出,自旋向上的电子态密度在费米能级以下有较大的峰出现,而自旋向下电子的态密度在费米能级的两边均有较大的峰出现,这表明在基态时,自旋极化作用使价带电子处于自旋平行状态,此时系统的能量更占优势,有利于该类化合物电子结构的稳定.

4. 结 论

基于密度泛函理论(DFT),采用线性缀加平面波展式结合改进的局域轨道方法(APW + lo),计算了具有 ThMn_{12} 结构的 Y-Fe-Ti 系统的能量.结果表明,对于 Y-Fe 混合系统,形成具有 $\text{Th}_2\text{Ni}_{17}$ 结构的

Y_2Fe_{17} 和 Fe 的混合物比形成具有 ThMn_{12} 结构的 YFe_{12} 在能量上更占优势,这是 YFe_{12} 不能稳定存在的原因.当加入替代元素 Ti 后,形成具有 ThMn_{12} 结构的 YFe_{11}Ti 比形成 Y_2Fe_{17} 和 Fe 的混合物,在能量上更占优势,这是 Ti 能导致 ThMn_{12} 结构稳定的根本原因.另外,本文还分析了替代原子 Ti 的优先取代占位方式.结果表明,Ti 占据 8i 晶位时,系统的能量最低,这与前人在实验中所观察到的 Ti 的占位一致.最后还计算了系统的晶体磁矩和各晶位原子的磁矩,分析了系统磁矩的主要来源和各晶位原子的磁矩的大小关系.系统的磁矩与实验数据符合,各晶位原子磁矩的相对变化与 Sakuma 采用 LMTO-ASA 方法计算得到的结果一致,各晶位原子磁矩的大小与其配位数和平均近邻原子距离有关.利用计算得到的电子态密度可以进一步计算晶体的磁矩与温度的关系,作者拟另文讨论.

- [1] Han X F, Yang F M, Zhu J J *et al* 1997 *J. Appl. Phys.* **81** 3248
- [2] Boer F R D, Zhao Z G, Buschow K H J *et al* 1996 *J. Magn. Mater.* **157/158** 504
- [3] Yin X Y, Tang N, Shen Y P, Yang D, Wang J L, Yang F M, Wu G H 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** S87 (in Chinese) [尹晓英、唐宁、沈宇平、阳东、王建立、杨伏明、吴光恒 1999 物理学报 **48** S87]
- [4] Wang W Q, Wang J L, Tang N, Bao F Q, Wu G H, Yang F M, Jin H M 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 1534 (in Chinese) [王文全、王建立、唐宁、包富泉、吴光恒、杨伏明、金汉明 2001 物理学报 **50** 1534]
- [5] Wang J L, Yang F M, Tang N, Han X F, Yang D 1998 *Acta Phys. Sin.* **47** 990 (in Chinese) [王建立、杨伏明、唐宁、韩秀峰、阳东 1998 物理学报 **47** 990]
- [6] Wang W Q, Yan Y, Wang X F, Su F, Wang X Q, Jin H M 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 1 (in Chinese) [王文全、闫羽、王学风、苏峰、王向群、金汉民 2003 物理学报 **52** 1]
- [7] Sun G A, Chen B, Du H L 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 9 (in Chinese) [孙光爱、陈波、杜红林 2005 物理学报 **54** 9]
- [8] Su G, Yan Y, Xu S W, Du X B, Jin H M, Wang X Q 2005 *Chin. Phys.* **14** 10
- [9] Qi S R, Huang X D, Zhang Y, Huang X T, Gan Z W, Xiang R 1996 *Acta Phys. Sin.* **45** 8 (in Chinese) [祁守仁、黄晓东、张岩、黄新堂、甘仲惟、向荣 1996 物理学报 **45** 8]
- [10] Sakuma A 1992 *J. Phys. Soc., Japan.* **61** 11 4119
- [11] Sakuma A 1993 *J. Appl. Phys.* **73** 10
- [12] Sjöstedt, Nordstrom L, Singh D J 2000 *Solid State Commun.* **114** 15
- [13] Madsen G K H, Blaha P, Karlheinz Schwarz *et al* 2001 *Phys. Rev. B* **64** 19 5134
- [14] Blaha P, Schwarz K, Madsen G. K H, Kvasnicka D, Luitz J 2001 WIEN2k, An Augmented Plane Wave + Local Orbital Program for Calculating Crystal Properties (Techn University Wien, Austria: Institut für Physikalische and Theoretische Chemie) ISBN 3-9501031-1-2
- [15] Hu B P, Li H S, Coey J M D 1989 *Hyperfine Interaction.* **45** 233
- [16] Hu B P, Li H S, Coey J M D 1990 *J. Appl. Phys.* **67** 9 1
- [17] Bao F Q, Wang J L, Tang N, Wang W Q, Wu G H, Yang F M 2001 *Acta Meta Sin.* **14** 3 171 (in Chinese) [包富泉、王建立、唐宁、王文全、吴光恒、杨伏明 2001 金属学报 **14** 3 171]
- [18] Li Y P, Xiong C S, Zhang H F, Qi S R, Huang X T 1994 *J. Univ. Sci. Tech. China.* **24** 2 (in Chinese) [李永平、熊曹水、张海峰、祁守仁、黄新堂 1994 中国科学技术大学学报 **24** 2]
- [19] Wang J L, Lbarra M R, Marquina C, Garcia-Landa B, Tegus Q, Xiao Q F, Brück E, Yang F M, Wu G H 2002 *J. Appl. Phys.* **91** 10
- [20] Barth U V, Hedin L 1972 *J. Phys.* **C 5** 1629
- [21] Janak J F 1978 *Solid State Commun.* **25** 53
- [22] Perdew J P, Burke S, Ernzerhof, 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865

Theoretical study of stabilization effect of the substituted atom and magnetism of intermetallic compounds YFe_{11}Ti *

Gao Guo-Qiang^{1,2)} Chen Bo¹⁾ Huang Zheng^{2)†} Zhang Xiu-Lan²⁾ Sun Guang-Ai¹⁾
Huang Hua-Shan²⁾ Yu Cong²⁾

1) *Institute of Nuclear Physics and Chemistry, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China*

2) *School of Science, Southwest Jiaotong University, Chengdu 610031, China*

(Received 14 January 2006 ; revised manuscript received 21 April 2006)

Abstract

Based on the density functional theory (DFT), using full-potential linearized augmented plane wave and improved local orbital (APW + lo) method , the structure and magnetism of the rare-earth permanent magnetic materials YFe_{11}Ti are analyzed and calculated. The formation energy of YFe_{12} , Y_2Fe_{17} and YFe_{11}Ti are calculated , The stabilization effect and the possible positions of the substituted atom Ti are discussed. The magnetic moments for the system and respective atoms are obtained. The calculated result is consistent with the experiment. The contributions of the density of states of the electrons to the magnetism are discussed.

Keywords : ThMn_{12} , density functional theory(DFT) , formation energy , magnetic moment

PACC : 7128 , 7520H , 7530M

* Project supported by the Science and Technology Foundation of China Academy of Engineering Physics(Grant No.20040863).

† Corresponding author. E-mail zhhuang@home.swjtu.edu.cn