

Finemet 合金析出相 α -Fe(Si) 结构与磁性的第一性原理计算*

胡玉平 平凯斌 闫志杰[†] 杨 雯 官长伟

(太原科技大学材料科学与工程学院, 太原 030024)

(2010 年 11 月 8 日收到; 2010 年 12 月 29 日收到修改稿)

采用基于密度泛函理论的第一性原理计算方法研究 Finemet 合金中析出相 α -Fe(Si) 的晶体结构与磁性, 探讨影响立方结构 α -Fe(Si) 相磁性能各个因素. 从电子自旋角度出发, 分别计算分析了不同比例的 Si 置换 α -Fe 超晶格中不同位置的 Fe 原子后 α -Fe(Si) 体系的磁性能. 计算结果表明, 自旋态密度是影响磁性能的关键因素. 发现 Si 置换 α -Fe 超晶格顶角处 Fe 原子得到的体系比取代体心位置 Fe 原子的体系磁性要好. 由此可以得出结论, 在一定的含量范围内, 随着 Si 含量的增加, Si 出现在 α -Fe 超晶格中顶角位置的概率增大, α -Fe(Si) 相的软磁性能提高, 与实验结果相符. 本文的研究工作有助于理解 Finemet 合金的磁性机理.

关键词: Finemet 合金, 磁性能, 第一性原理, 态密度

PACS: 75.75.-c, 63.20.Dk, 75.75.Lf

1. 引言

1988 年, Yoshizawa 等人^[1]在 Fe-Si-B 合金的基础上添加了适量的 Cu 和 Nb, 并经过适当的退火处理后, 得到大量尺度在 10—15 nm 的 α -Fe(Si) 晶粒均匀分布于非晶基体之中的纳米晶/非晶双相结构的软磁合金 (Finemet 合金), 它的软磁性能远好于 Fe 基非晶合金. 因此, Finemet 合金一经问世, 就以它优异的软磁性能, 如高的饱和磁感应强度、低的磁滞损耗, 以及高磁导率在工业上得到应用^[2-6]. Finemet 合金的磁性机理不同于传统的晶体磁性材料, 在科学研究和工程应用上都备受关注.

Finemet 合金之所以具有优异的软磁性能与它的微观结构密不可分. 研究表明, Finemet 合金的软磁性能受纳米晶结构、晶粒尺度、 α -Fe(Si) 的成分等因素的影响^[7, 8]. 立方晶相的几何结构对磁性能有重要影响^[9], 所以研究 bcc 结构的 α -Fe(Si) 相的磁性及对 Finemet 合金磁性能的影响对于揭示 Finemet 合金磁性机理有重要的意义.

本文采用第一性原理计算不同含量的 Si 置换 α -Fe 超晶格中不同位置的 Fe 原子后得到的体系的结构和磁性能, 通过自旋态密度的变化探讨了不同含量的 Si 置换 α -Fe 超晶格中不同位置的 Fe 原子后 α -Fe(Si) 相的磁性能.

2. 模型及计算方法

体系能量的计算采用基于密度泛函理论 (density functional theory, DFT) 的赝势平面波法 (cambridge serial total energy package, CASTEP)^[10, 11], 使用广义梯度近似 (generalized gradient approximation, GGA) 处理交换关联势^[12].

本文以 bcc 结构的 α -Fe 为初始研究对象, 其空间群为 $I-m\bar{3}m$, 计算磁性参量时考虑自旋极化^[13]. 在自旋极化体系中, α 和 β 电子具有不同的空间波函数, 即占据不同的能态. 分别计算 α 电子的态密度 $N(E) \uparrow$ 和 β 电子的态密度 $N(E) \downarrow$, 它们的和给出了总态密度, 它们的差 $N(E) \uparrow - N(E) \downarrow$ 为自旋态密度 (SDOS). 材料的磁性自旋态密度有关.

* 国家自然科学基金 (批准号: 50804032)、山西省自然科学基金 (批准号: 2008011046)、山西省科技攻关计划 (批准号: 20080321036) 和太原市大学生创新创业基金资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: yanzhijie74@sohu.com

Bloch 提出,原子内的原子磁矩来源于未充满壳层的电子自旋,电子轨道运动处于基态,对磁性无贡献^[14]. 原子中内部的满壳层电子的角动量和磁矩都等于零,因而原子的电子状态主要取决于比较靠外的不满壳层.

使用 CASTEP 方法计算时,能量截断值均取为 300.0 eV, k 点取值 $4 \times 4 \times 4$. 计算采用的关联函数是广义梯度近似 (generalized gradient approximation, GGA) 中的 PBE (perdew burke ernzerhof) 交换关联函数^[15], 分别计算不同含量的 Si 置换 α -Fe 超晶格中不同位置的 Fe 原子后的自旋态密度和能带结构. 在计算过程中,采用了几何结构优化,所有超晶格的晶格常数均选为 $a = b = c = 5.7328 \text{ \AA}$.

3. 结果与讨论

3.1. α -Fe 的性能

Fe 属于 3d 过渡金属,平均每个原子的饱和磁矩为 $2.2\mu_B$. 对于 bcc 结构的 Fe,其稳定态是铁磁

性,它的原子磁矩为 $2.3\mu_B$. 过渡金属的铁磁性是由部分填充的、具有明显 3d 特征的能带中的电子产生. 过渡金属的 d 电子形成了窄能带,自旋向上和自旋向下的电子分别位于两个次能带中. 需要指出的是,费米面附近电子的态密度的形状对过渡金属的磁性能有着重要影响. 由于两种自旋的电子能量不同,造成两个次能带的能级发生相对位移. 一个次能带的费米面上升,成为主能带. 另一个次能带的费米面下降,成为副能带. 图 1 为 α -Fe 的能带结构图、自旋极化态密度图、分态密度图和电子态密度分布图. 图 1(b) 表明,主副能带有很大的劈裂,这说明 α -Fe 显示出很好的铁磁性,与 Rahman 等人的结论一致^[16]. 从图 1(c) 可以看出,对上下自旋有贡献的主要是 3d 电子,即 3d 电子的自旋磁矩提供 α -Fe 体系的总磁矩. 从 α -Fe 的能带结构图 (图 1(a)) 可以看出,在费米面附近不存在能隙,为典型的金属型物质. 图 1(d) 是引入电子态密度以后的切面图,从图中可以看出,在每个 Fe 原子周围,电子排布是都一样,说明 α -Fe 晶格中电子均匀排布.

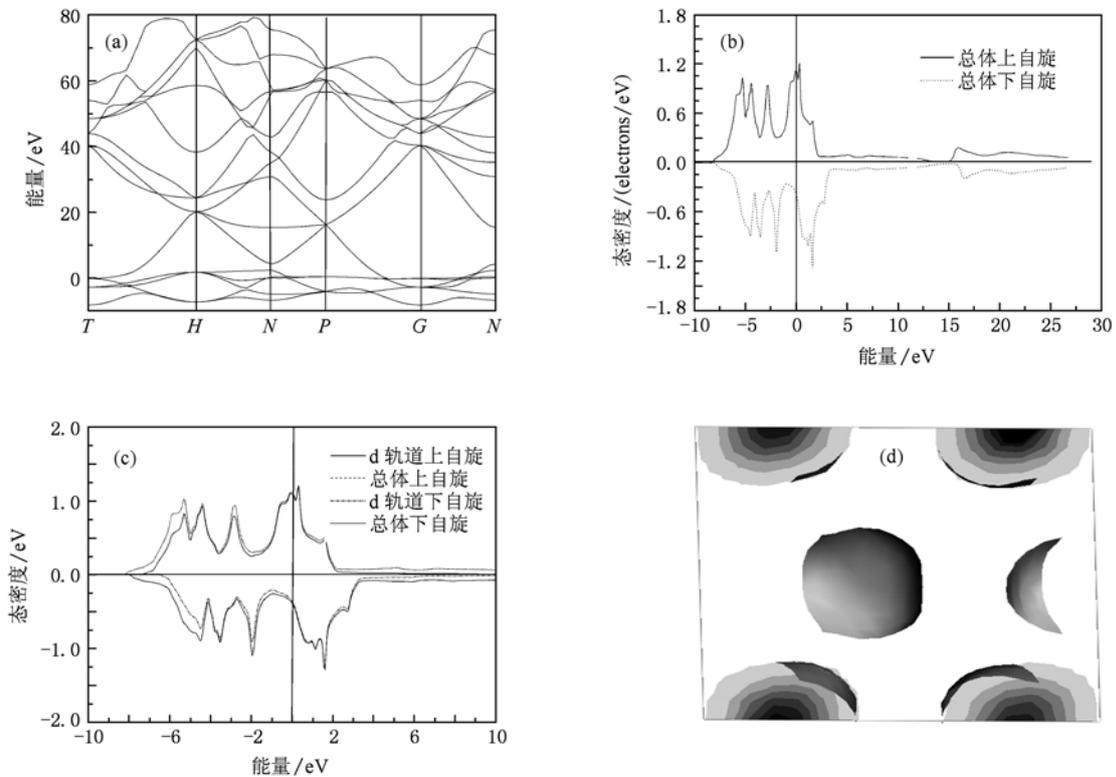


图 1 (a) α -Fe 能带结构图; (b) 自旋极化态密度图; (c) 分态密度图; (d) 电子态密度分布图

3.2. α -Fe (Si) 相的性能

3.2.1. Si 含量为 6.25% (原子百分比) 的 α -Fe(Si) 的结构与磁性

分别计算了 Si 置换 α -Fe 超晶格中体心与顶角位置的 Fe 原子后的能带结构与自旋态密度. 并给出了 Si 置换体心位置的 Fe 原子情况下的(1 1 1)面电荷分布情况,从电荷的分布得出成键情况.

Si 置换体心原子的 α -Fe(Si) 超晶胞的原子排布如表 1 所示. 原来的 α -Fe 超晶格中,Fe 原子的位置分别为 0, 0.25, 0.5, 0.75 几组数的组合. α -Fe(Si) 的晶胞参数为 0.28575 nm, 小于 α -Fe 晶胞参数 0.28664 nm, 这是由 Si 原子替代 Fe 原子引起点阵收缩所致^[17]. Si 的原子半径为 1.17 Å 而 Fe 的原子半径为 1.26 Å, 由于原子半径不同, 导致晶格畸变. Fe—Fe 键的键长(2.50664 Å) 比 Fe—Si 键的键长(2.48233 Å) 要长, 因此 Fe—Fe 键之间的作用比 Fe—Si 键要弱^[18].

表 1 Si 处于体心位置的分数坐标

元素	原子数	原子分数		
		<i>U</i>	<i>V</i>	<i>W</i>
Si	1	0.508049	0.511128	0.486989
Fe	1	0.010208	0.010986	-0.016810
Fe	2	0.009414	0.008196	0.521578
Fe	3	-0.002083	0.491776	-0.000878
Fe	4	0.486303	0.003505	-0.006890
Fe	5	0.499212	-0.018169	0.507087
Fe	6	0.499121	0.496211	0.021231
Fe	7	0.255386	0.245345	0.259137
Fe	8	0.268348	0.272804	0.734199
Fe	9	0.242212	0.754784	0.247523
Fe	10	0.248090	0.727375	0.747348
Fe	11	0.749550	0.236383	0.252927
Fe	12	0.726393	0.258197	0.744328
Fe	13	0.762170	0.760989	0.246023
Fe	14	0.762170	0.760989	0.246023
Fe	15	0.749015	0.741498	0.757352

计算中涉及到的原子的价电子结构为 Si 3s²3p², Fe 3d⁶4s². 图 2 给出了 Si 置换体心位置的能带结构、总自旋极化态密度、分态密度与局域态密度, 其中分态密度包括 s, p 和 d 轨道态密度, 局域态密度包括 Si 和 Fe 的态密度, 能量为零的直线为费米面. 从图 2(b) 可以看出, Si 置换体心原子时,

总自旋极化态密度在费米面处上下相差约 5 eV, 比未置换时要小. 另外主副能带也有一定程度的劈裂, 不过与纯 α -Fe 结构相比, 体系的能带劈裂程度要小一些. 这些能带劈裂可以分为以下几部分: a_1 (-10 eV, -9 eV), a_2 (-7.5 eV, -6.5 eV), a_3 (-6.5 eV, -5.5 eV), a_4 (-5.5 eV, 1.5 eV). 对 a_1 有贡献的主要是 Si 的 2s 轨道电子自旋运动, a_2 和 a_3 源于 Si 的 3p 和 Fe 的 3d 轨道杂化, a_4 则源于 Fe 的 3d 电子自旋. 所以, Fe 原子 d 电子的自旋对总自旋的贡献可以达到 90% 以上. 因此, α -Fe(Si) 相的磁性主要来源于 Fe 原子的未壳层的 d 电子的自旋.

从能带图(图 2(a)) 可以看出, Si 置换中心位置的 Fe 原子后导带和价带在费米面附近完全重合, 这就是说置换后 α -Fe(Si) 相显示半金属结构, 这是由于非金属元素 Si 置换固溶于 α -Fe 所致. (图 3(b)) 是 Si 置换顶角位置的 Fe 原子后的能带图, 从图中可以看出此时 α -Fe(Si) 也显示半金属性, 并且能带分布于 Si 在体心时基本相同. 所以 Si 含量和置换位置的改变对能带结构影响甚微, 只要有 Si 置换, α -Fe(Si) 就显示半金属性, 与刘俊等人的结论一致^[19]. 图 2(h) 是(1 1 1)面电荷密度分布图像, 包括一个 Si 原子和四个 Fe 原子, 从图中可以看出 Fe 原子和 Si 原子之间以共价键方式连接, 并且 Si 原子是被迫极化在与 Fe 原子极化相反的方向, 与 Ching 等人的结果符合^[20].

表 2 是 Si 置换顶角原子时的原子坐标. 可以看出, 当 Si 原子置换顶角位置的 Fe 原子时, 晶格中个原子的位置保持不变. 这就说明, 顶角位置上的 Fe—Si 键作用力要比体心位置的 Fe—Si 键作用力弱, 引起的晶格畸变小.

图 3(b) 是 Si 置换顶角原子时的分波态密度图, 可以看出主副能带也有一定程度的劈裂, 但是劈裂程度比 Si 处于体心位置时要大, 磁性要好. 依据 Stoner 判据, α -Fe(Si) 体系的磁化强度为^[21]

$$M(T) = N\mu_B(\langle N(E)\uparrow \rangle - \langle N(E)\downarrow \rangle), \tag{1}$$

式中 T 为温度, N 为电子数, μ_B 为原子磁矩^[21]. 对于 Si 含量一定的 α -Fe(Si) 的系统, 磁性仅仅依赖于(1)式中的第二项. 由图 2(b) 和图 3 可以看出 Si 置换顶角 Fe 原子比置换体心 Fe 原子时的 $\langle N(E)\uparrow \rangle - \langle N(E)\downarrow \rangle$ 要大, 所以磁性要好.

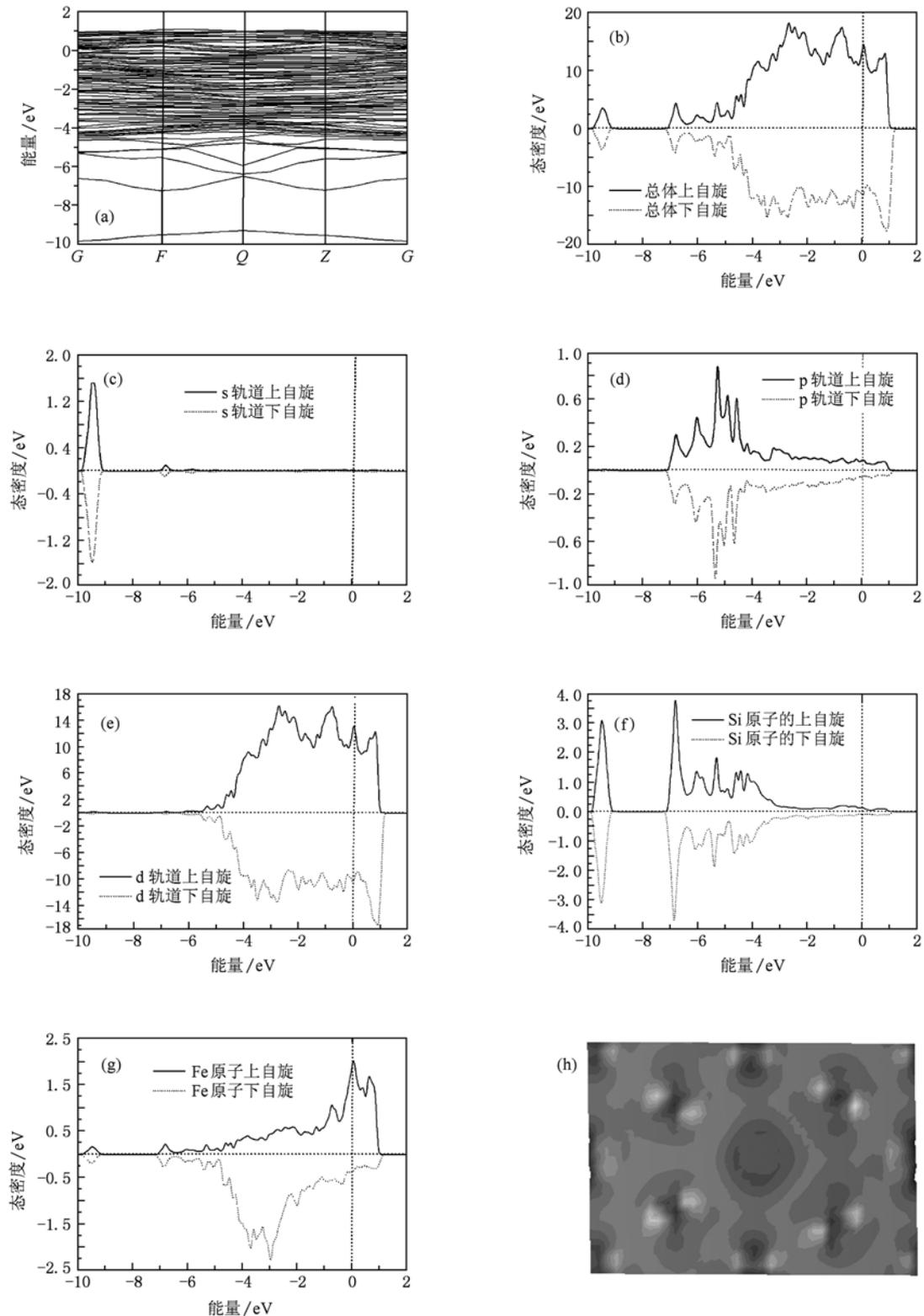


图2 Si 置换中心位置的 Fe 原子的能态密度图 (a)能带图;(b)总态密度;(c)总的s;(d)总的p;(e)总的d;(f)总的Si;(g)总的Fe;(h)(111)面电荷密度分布图像

图4 是 Si 置换不同位置的 Fe 原子后 α -Fe(Si) 体系的能量达到最稳定时所需要的计算迭代次数

表2 Si处在顶角位置的分数坐标

元素	原子数	原子分数		
		U	V	W
Si	1	0.750000	0.750000	0.750000
Fe	1	0.000000	0.000000	0.000000
Fe	2	0.000000	0.000000	0.500000
Fe	3	0.000000	0.500000	0.500000
Fe	4	0.500000	0.000000	0.000000
Fe	5	0.500000	0.000000	0.500000
Fe	6	0.500000	0.500000	0.000000
Fe	7	0.500000	0.500000	0.500000
Fe	8	0.250000	0.250000	0.250000
Fe	9	0.250000	0.250000	0.750000
Fe	10	0.250000	0.750000	0.250000
Fe	11	0.250000	0.750000	0.750000
Fe	12	0.750000	0.250000	0.250000
Fe	13	0.750000	0.250000	0.750000
Fe	14	0.750000	0.250000	0.750000
Fe	15	0.750000	0.750000	0.250000

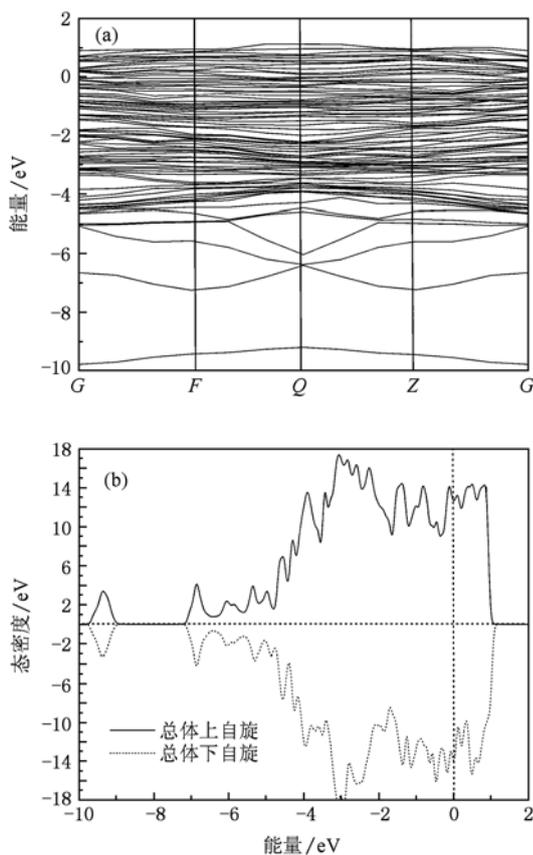


图3 (a) Si置换体心位置的Fe原子的能带图(a);(b)态密度图

与达到最稳定时的能量. Si在顶角时所需计算迭代

次数仅为164次,能量最低为-13105 eV(图1中给出的是指数形式),而Si在体心所需计算迭代次数为390次,能量最低也为-13115 eV. 这表明Si在顶角时体系达到稳定时所需要的时间要短得多,稳定状态对应的能量较低,稳定性更好^[22].

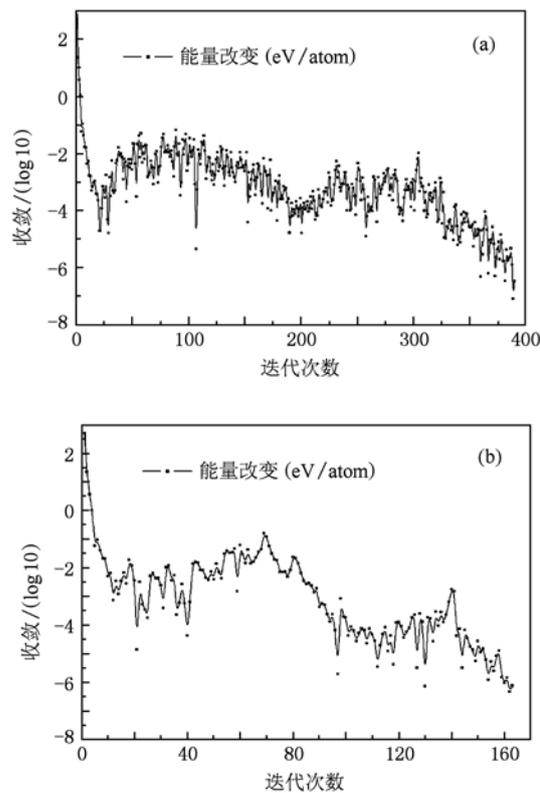


图4 (a) Si在体心的计算迭代次数;(b)在顶角时的迭代次数

3.2.2. Si含量为12.50%(原子百分比)的 α -Fe的结构与磁性

分别计算了Si置换四种(第一种Si一个在体心,一个在顶角;第二种在同一面上相邻位置;第三

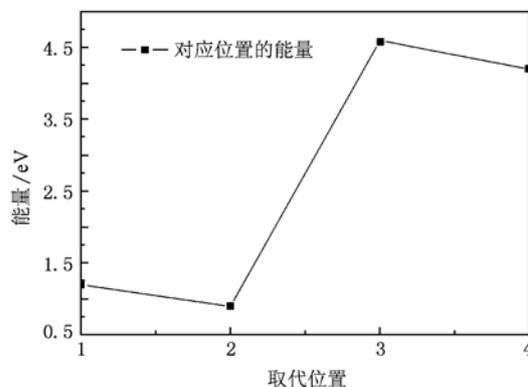


图5 Si取代量为12.5%时的费米面附近的态密度

种在同一面不相邻位置;第四种不再同一面上)不同位置的 Fe 原子情况,原子坐标都不变,只有 Si 的位置在变化. 图 5 给出了这几种情况下的自旋态密度值与置换位置的关系,可以看出这几种情况下自旋态密度 $N(E) \uparrow - N(E) \downarrow$ 在费米面附近相差都很大,说明体系的磁化强度(1)式也并不相同,所以说 Si 的置换位置对 α -Fe(Si) 体系磁性的影响是不能忽视的.

3.2.3. Si 含量为 18.75% (原子百分比) 的 α -Fe 的结构与磁性

计算了 Si 在六种不同位置时的能带结构和态密度,图 6 给出了这几种(第一种 Si 一个在体内心,另外两个在同一面相邻位置;第二种一个在体心,另两个在同一面不相邻位置;第三种一个 Si 在体心,另外两个不再同一面上;第四种一个 Si 在上底面,另两个在下地面;第五种三个 Si 都在同一面)取代位置下的能态劈裂值. 可以看出, Si 都在顶角时的能态劈裂值最大,表明此时体系磁性最好.

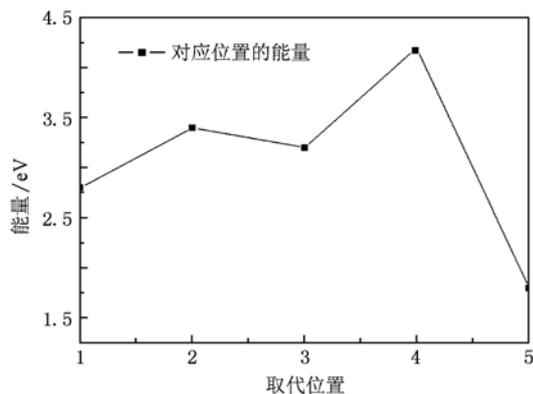


图 6 Si 取代量为 18.75% 时的费米面附近的能态密度

3.2.4. Si 含量为 25.00% (原子百分比) 的 α -Fe 的结构与磁性

计算了 Si 处于五种不同位置的能带结构与态密度图. 图 7 给出了这五种(第一种一个 Si 在体心,另外三个在同一面;第二种一个 Si 在体心,另外三个两个在一个面,另外一个在和这两个相对的面上;第三种四个 Si 都在同一面上;第四种两个 Si 在同一面相邻外置,另外两个在相对面的不相邻外置;第五种两个相邻的 Si 在同一面,另外两个在相对面的相邻外置)情况下的自旋态密度值与置换位置的关系,可以看出,第四种取代情况下(Si 都在顶角处)的自旋态密度值在费米面出有最大值,说明 Si 都在顶角处得到的 α -Fe(Si) 体系的

磁性能较好.

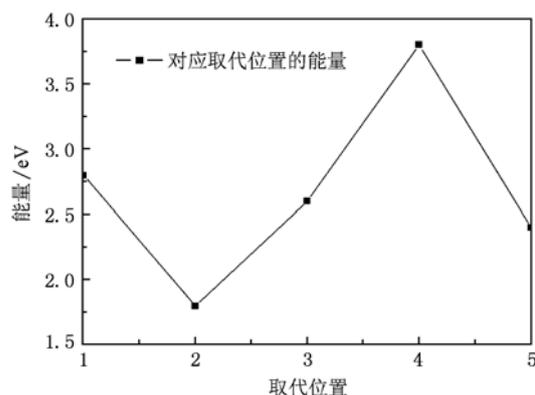


图 7 Si 取代量为 25.0% 时的费米面附近的能态密度

随着 Si 在 α -Fe 中含量的增加,引起的晶格畸变也随之变化. 图 8 是平均晶格常数(相同 Si 含量的不同置换位置时的平均值)随 Si 量变化的示意图,可以看出随着 Si 取代 Fe 原子数量的增加,晶格常数减小,晶格畸变量增加,宏观磁性能将得到改善,与 Herzer 的实验结果一致^[23].

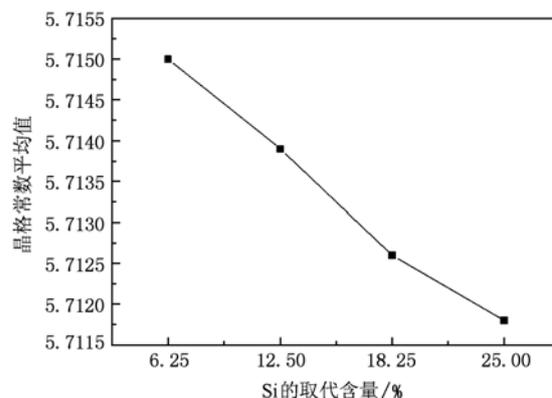


图 8 平均晶格常数随 Si 含量变化

3.3. α -Fe(Si) 相对 Finemet 合金性能的影响

对于 Finemet 合金的磁性机理,纪松等人在 Herzer 无规各向异性模型的基础上考虑了非晶相的作用,给出了双相无规各向异性模型^[24]

$$\langle K \rangle = (A_c V_c + A_a V_a)^{-3} \left(\frac{K_c D^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{3} V_c} + \frac{K_a \delta^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{V_a}} \right)^4, \quad (2)$$

$$H_c = P_c \frac{\langle K \rangle}{J_s}, \quad (3)$$

式中, $\langle K \rangle$ 为 Finemet 合金的有效各向异性, D 为晶相的晶粒直径, δ 为非晶相的结构相关系数, $A_c, A_a,$

V_c 和 V_a 分别为晶相、非晶相的交换劲度系数和体积分数, K_c, K_a 分别为晶相和非晶相的各向异性能, J_s 为饱和磁化强度, P_c 为常数. 由此可以看出, Finemet 纳米晶软磁合金的矫顽力要综合纳米晶相和非晶相的作用, 取决于合金总的磁晶各向异性即有效各向异性. 只有当双相的 A_c, A_a, V_c 和 V_a 综合作用使得 $\langle K \rangle$ 最小, 合金的 H_c 才会达到最小值. Herzer 的实验结果表明, 随着 α -Fe(Si) 相中 Si 含量的增加, 晶体相的体积分数 (V_c) 增加, 晶相各向异性能 (K_c) 减小^[23], 这有利于 Finemet 合金的 $\langle K \rangle$ 减小. 第一性原理计算表明, Si 按照一定的比例取代 α -Fe 超晶格中不同位置的 Fe 原子后 α -Fe(Si) 相的磁性能有很大的差异. 计算结果表明, 当 Si 的含量一定时, 置换顶角位置的 Fe 原子比取代体心位置的 Fe 原子得到 α -Fe(Si) 相的磁矩要大; 并且 Si 处在顶角位置的系统更容易达到稳定态. 随着 Si 含量的增加, Si 取代顶角位置 Fe 原子的概率增加, α -Fe(Si) 系统的稳定性与磁性得到改善, 即 K_c 减小. 由此可知, α -Fe(Si) 相中 Si 固溶度的提高有利于 Finemet 体系的有效各向异性 $\langle K \rangle$ 的降低, 从而降低合金的矫顽力, 提高 Finemet 合金的综合磁性能.

4. 结 论

1. 计算了 Si 置换 Fe 以后的 α -Fe(Si) 超晶格的能带结构, 发现不论取代位置与取代含量如何变化, 能带结构图在费米面附近导带和价带已近完全重合, 说明 α -Fe(Si) 体系都显示半金属性, 有良好的导电能力.

2. 计算结果表明 Si 含量一定的情况下, Si 取代顶角位置的 Fe 原子的 α -Fe(Si) 体系达到稳定时的最低能量较低并且达到稳定所需要的时间也更短, 说明 Si 取代顶角位置的 Fe 原子在热力学上更为有利. 另外发现, Si 含量一定时, Si 在顶角位置的 α -Fe(Si) 体系比在中心位置时的磁性要好.

3. Si 对 α -Fe(Si) 相的磁性能的影响一方面是通过取代 α -Fe 晶格中不同位置的 Fe 原子从而影响 α -Fe(Si) 相的磁矩. 随着 Si 含量的增加, Si 出现在 α -Fe(Si) 体系顶角的概率增大, 同时 α -Fe(Si) 相的体积分数增加, 降低了 Finemet 合金的有效各向异性 $\langle K \rangle$, 提高了 Finemet 合金的综合磁性能. 另一方面, 随 Si 含量的增加, 晶格常数减小, 晶格畸变量增加, 宏观磁性能得到改善.

- [1] Yoshizawa Y, Oguma S, Yamauchi K 1988 *J. Appl. Phys.* **64** 6044
- [2] Tate B J, Parmar B S, Todd I, Davies H A, Gibbs M R J, Major R V 1998 *J. Appl. Phys.* **83** 6335
- [3] Frost M, Todd I, Davies H A, Gibbs M R J, Major R V 1999 *J. Magn. Magn. Mater.* **203** 85
- [4] Todd I, Tate B J, Davies H A, Gibbs M R J, Kendall D, Major R V 2000 *J. Magn. Magn. Mater.* **215** 272
- [5] Yoshizawa Y, Yamauchi K 1991 *Mater. Sci. Eng. A* **133** 176
- [6] Saito K, Park H S, Shindo D, Yoshizawa Y 2006 *Magn. Magn. Mater.* **305** 304309
- [7] Yoshizawa Y 1999 *Mater. Sci. Forum* **307** 51 62
- [8] Herzer G. J 1992 *Magn. Magn. Mater.* **112** 258
- [9] Hu F X, Shen B G, Chen J C, Guo H Q 1991 *Acta Phys. Sin.* **40** 2006 (in Chinese) [胡凤霞、沈宝根、陈金昌、郭慧群 1991 物理学报 **40** 2006]
- [10] Kohn-Sham potentials in density function theory
- [11] CASTEP is described at http://www.accelrys.com/mstudio/ms_modelingcastep.html
- [12] Herper H C, Hoffmann E, Entel 1999 *Phys. Rev. B* **60** 3839 Mater
- [13] Lee P H, Xiao Z R, Chen K L, Chen Y, Kao S W, Chin T S 2009 *Physica B* **404** 1989
- [14] Bloch F Z 1929 *Phys.* **57** 545
- [15] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [16] Gul Rahman, In Gee Kim, Arthur J Freeman 2010 *J. Magn. Magn. Mater.*
- [17] Xue Y J, Li J H, Cheng Z X, Chen N, Du H L 2004 *Nuclear Scientific and Technological* **38** 100 (in Chinese) [薛艳杰、李峻宏、成之绪、陈娜、杜红林 2004 原子能科学, **38** 100]
- [18] Guo Y, Liu Ch P, Zhang D J, Deng C H 2006 *Structural Chemistry* (Publishing House of ShanDong University) p253 (in Chinese) [郭用、刘传朴、张东菊、邓从豪 2006 结构化学 (山东大学出版社) 第 253 页]
- [19] Liu J, Liu Y, Chen X M, Dong H N 2009 *Acta Phys. Sin.* **25** 107 (in Chinese) [刘俊、刘宇、陈希明、董会宁 2009 物理化学学报 **25** 107]
- [20] Ching W Y, Xu Y N 1990 *Phys. Rev. B* **42** 4460
- [21] Stoner E C 1936 *Proc. Roy. Soc.* **A154** 656
- [22] Zhang S, Pang H, Fang Y, Li F S 2010 *Chin. Phys. B* **19** 127102
- [23] Herzer G, Mater 1994 *Sci. Eng. A* **181** 876

First-principles calculations of structure and magnetic properties of α -Fe(Si) phase precipitated in the Finemet alloy^{*}

Hu Yu-Ping Ping Kai-Bin Yan Zhi-Jie[†] Yang Wen Gong Chang-Wei

(School of Materials Science and Engineering, Taiyuan University of Science and Technology, Taiyuan 030024, China)

(Received 8 November 2010; revised manuscript received 29 December 2010)

Abstract

The structure and the magnetic properties of α -Fe(Si) phase precipitated in the Finemet alloy, and some factors influencing the magnetic properties of α -Fe(Si) phase are investigated by first-principles calculation based on the density functional theory. From the angle of electron spin, the magnetic properties of α -Fe(Si) phases with different solubilities of Si located at the different sites of the α -Fe superlattice are investigated. The calculation results show that the spin-state density is a critical factor influencing the magnetic properties. It is found that α -Fe(Si) phase with Si at the vertex sites shows better magnetic properties than those with Si at the core sites. It is concluded that with the solubility of Si in the α -Fe(Si) phase increasing, the probability of Si occurring at the vertex sites increases, which results in better magnetic properties. The calculation results accord with the previous experimental results. The present work is helpful for understanding the magnetism of the Finemet alloy.

Keywords: finemet alloy, magnetic properties, first-principles, density of states

PACS: 75.75.-c, 63.20.Dk, 75.75.Lf

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 50804032), the Natural Science Foundation of Shanxi Province of China (Grant No. 2008011046), and the Key Technologies R & D Program of Shanxi Province, China (Grant No. 20080321036).

[†] Corresponding author. E-mail: yanzhijie74@sohu.com