arXiv:2601.08232v1 [cond-mat.mtrl-sci] 13 Jan 2026

局部二十面体短程有序对非晶钴铁纳米盘磁化动力学的影响

Matias Sepulveda–Macias[a]，Erick–Burgos Parra[a]

[a]物理系，理学院，智利大学，*Las Palmeras 3425*，*Ñuñoa*，圣地亚哥，智利

摘要

非晶合金软磁性能的微观起源，从根本上与局域拓扑无序和磁交换相互作用之间的相互作用有关。在本研究中，我们采用多尺度自旋-晶格动力学（SLD）方法，研究非晶钴$_x$铁$_{1-x}$纳米盘（$x = 35$，50，65）中的磁结构关联。通过将经典分子动力学与广义磁哈密顿量相结合，我们捕捉到晶格振动与自旋进动之间的动态反馈循环。基于Voronoi镶嵌的拓扑分析揭示了持续存在且依赖于元素种类的结构异质性：钴原子倾向于形成“固态”二十面体堆积，构成刚性的结构骨架；而铁原子则更容易处于“液态”的无序环境。我们证明，这种拓扑差异决定了宏观磁响应。钴驱动的结构刚度维持了稳健的交换网络，使饱和磁化强度达到最大；而富铁区域固有的局域无序会引发交换涨落，成为本征阻尼机制，从而延缓磁弛豫。这些发现从原子尺度解释了钴铁金属玻璃中铁磁有序的稳定性，并为通过化学计量控制调节非晶自旋电子器件的阻尼参数提供了途径。

1. 引言

非晶铁磁合金，尤其是基于钴铁（Co-Fe）体系的合金，在凝

聚态物理学和自旋电子学领域备受关注，这归功于其卓越的软磁性能，包括高饱和磁化强度、低矫顽力和高磁导率 [1, 2, 3]。与晶态材料不同，这些金属玻璃缺乏长程平移有序；然而，它们具有显著的短程至中程有序（SRO），从根本上决定了其机械稳定性和磁稳定性 [4, 5]。了解这种稳定性的原子尺度起源至关重要，因为局部结构非均匀性——通常表现为“固态”团簇与“液态”无序区域 [6,7]——会显著影响自旋波传播、磁各向异性和弛豫过程 [8, 9, 10]。

对这些无序体系中磁激发的理论描述，构成了复杂的多尺度挑战。传统的微磁学模拟通常将材料视为连续介质，从而平均掉非晶态所固有的原子尺度涨落[11]。另一方面，纯经典分子动力学（MD）能够捕捉结构演化，却忽略了磁自由度。要充分解析无序晶格与磁系统之间的相互作用，必须平等地处理原子位置和磁自旋 [12]。自旋-晶格动力学（SLD）框架通过同时求解晶格方程和 Landau-Lifshitz-Gilbert（LLG）方程来应对这一问题 [13, 14]。该框架通过 LAMMPS 中的 SPIN 软件包实现[15, 16], ，这种大规模并行的辛方法能够捕捉声子与磁振子之间的关键反馈回路，这对于具有显著磁结构耦合的体系至关重要 [15, 13]。

在本研究中，我们采用这种多尺度计算方法研究非晶 Co_xFe_{1-x} 纳米圆盘的磁动力学。尽管实验上要制备纯非晶钴铁合金通常需要添加类金属稳定剂（例如 CoFeB、CoFeSiB） [17], ，但本研究对纯二元金属玻璃进行建模，以便在不受非磁性杂质干扰的情况下，分离过渡金属拓扑结构对交换刚度和磁弛豫的内在影响。我们关注通过 Voronoi镶嵌 [18]表征的局部拓扑结构基元与不同化学计量比（$Co_{50}Fe_{50}$, 、$Co_{65}Fe_{35}$, 和 $Co_{35}Fe_{65}$）下宏观磁响应之间的关联。通过将局部原子环境映射到与距离相关的交换相互作用模型中，我们揭示了钴中心二十面体的结构“骨架”如何稳定铁磁有序，并为理解非晶磁性纳米结构的本征阻尼机制和饱和极限提供了新的见解。

2. 计算建模

2.1. 理论框架

在本研究中，我们采用一种多尺度计算方法，将经典分子动力学（MD）与原子自旋动力学（SD）相结合。这些模拟使用 LAMMPS 软件包 [16]并结合由 Tranchida 开发的 SPIN 软件包等 [15]完成。系统动力学由耦合晶格和磁自由度的广义哈密顿量支配:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^{N} \frac{|p_i|^2}{2m_i} + \sum_{i,j,i\neq j}^{N} V(r_{ij}) + \mathcal{H}_{\text{mag}} \tag{1}$$

其中，前两项分别表示晶格的动能和原子间势能。最后一项 $\mathcal{H}_{\text{mag}}$ 表示总能量中的磁性贡献，定义如下:

$$\mathcal{H}_{\text{mag}} = -\sum_{i,j}^{N} J_{ij}(r_{ij})\ \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j - g\sum_{i=0}^{N} \mu_i\, \vec{s}_i \cdot \vec{B}_{\text{ext}} - \sum_{i=0}^{N} K_{\text{an}}(r_i)\,(\vec{s}_i \cdot \vec{n}_i)^2 \tag{2}$$

磁哈密顿量包含描述自旋间相互作用的海森堡项，其中 $\vec{s}_i$ 是原子 i 的归一化自旋矢量，而 $J_{ij}(r_{ij})$ 是随距离变化的交换耦合常数。第二项描述外加磁场 B_{ext}与自旋之间的塞曼相互作用，其中 g是朗德因子， μ_i 是原子磁矩。第三项描述磁晶各向异性，其中 K_{an} 和 $\vec{n}_i$ 分别定义各向异性强度和方向。

2.2. 样品制备与结构表征

如图 1(a) 所示，采用三种化学计量比对物理尺寸为 $23.6\times23.6\times1.96$ nm^3 , 的非晶 Co_xFe_{1-x}纳米圆盘进行建模：$Co_{50}Fe_{50}$，、$Co_{65}Fe_{35}$，和 $Co_{35}Fe_{65}$。初始构型源自 B2 型钴晶体结构，并通过随机铁取代来匹配目标百分比。为获得具有代表性的非晶态，采用了 Wang 等人提出的熔融淬火方案 [19]。首先，在 0 GPa 下将系统加热至 2500 K，时间步长为 $\Delta t = 1$ fs，随后以计算得到的 10^{10} K/s 冷却至 300 K。最后，在 NVT 系综中对样品进行 100 ps 的平衡处理。

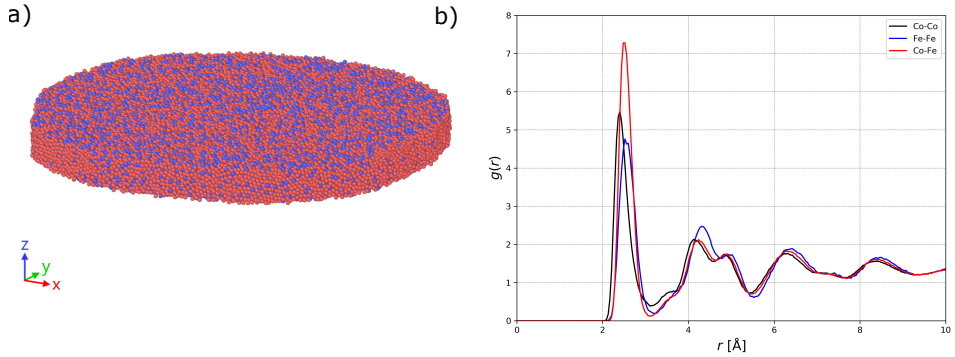

图 1：非晶 Co_xFe_{1-x} 纳米圆盘的结构表征。(a) 化学计量比为 $Co_{65}Fe_{35}$ 的圆盘的原子级三维表示。(b) 部分径向分布函数 $g(r)$，其中尖锐的第一峰及随后逐渐减弱的振荡证实了非晶相的稳定性。

原子间相互作用采用改进嵌入原子法（MEAM）势函数 [20] 建模。使用 OVITO 软件 [18] 进行结构分析和可视化。如图 1(b) 所示，通过部分径向分布函数（RDF） $g(r)$ 验证了非晶化。对于具有代表性的 $Co_{65}Fe_{35}$ 化学计量比，RDF 曲线在 ≈ 2.5 Å 处呈现显著的第一近邻峰，并出现分裂的第二峰，这与金属玻璃中的短程有序特征一致 [4]。10 Å 以外未出现长程周期性峰，证实纳米圆盘已成功非晶化。随后通过 Voronoi 多面体分类进一步评估局部配位情况。

2.3. 磁性标定与自旋-晶格动力学

为构建磁拓扑，将 J_{ij} 定义为距离的函数，以考虑无序晶格：

$$J_{ij} = 4a\left(\frac{r_{ij}}{d}\right)^2\left(1 - b\left(\frac{r_{ij}}{d}\right)^2\right)e^{-(r_{ij}/d)^2} \tag{3}$$

其中，$\{a, b, d\}$ 是定义相互作用范围的常数。通过使用经典海森堡自旋的平均场近似（MFA）估算居里温度（T_C），对 J_{ij} 进行了全局缩放：

$$T_C^{MF} = \frac{2\overline{J_0}}{3k_B}, \quad \text{with} \quad \overline{J_0} = \langle \sum_j J_{ij} \rangle \tag{4}$$

调整交换常数，使其与非晶态 Co–Fe 合金的实验基准相一致，其中对于 $Co_{50}Fe_{50}$ [21]， T_C 被设定为 $\approx$ 800 K，并在富铁成分中取更低的值 [22]。应用了全局缩放因子 $f = T_{\text{目标}C} \quad /T_C^{\text{current}}$，以确保建模的铁磁态到顺磁态转变能够考虑固有的拓扑无序。

最后，在沿 z 轴施加恒定的 0.1 T 塞曼场的条件下，进行了 100 ps 的自旋-晶格动力学（SLD）模拟。这种双时间步长方法捕捉了结构振动与自旋进动之间的反馈循环。

3. 结果与讨论

3.1. 非晶 Co_xFe_{1-x} 中的局域结构非均匀性

通过详细的 Voronoi镶嵌分析，进一步阐明了非晶 Co_xFe_{1-x} 纳米盘的局域结构特征。图 2(a) 展示了 $Co_{50}Fe_{50}$ 化学计量比下，配位多面体在“类固态”“过渡态”和“类液态”环境中的分类。该物种依赖性分析揭示了显著的结构差异：钴原子主要呈现稳固的“类固态”构型（约 26%），而铁原子的局域无序程度更高，类固态比例显著偏低，仅为 16%。图 2(b) 进一步量化了这种非均匀性，展示了特定 Voronoi 指数 $\langle n_3,\ n_4,\ n_5,\ n_6\rangle$ 的分布。其中，$\langle 0,\ 1、10,\ 2\rangle$ 和 $\langle 0,\ 0、12,\ 0\rangle$ 多面体占据了显著比例，分别占局域结构的 40% 以上和近 30%。这些指数表明存在高配位的类二十面体堆积，这是使非晶基体免于结晶的主要结构基元。这些致密的类固体团簇十分普遍，尤其集中在钴位点周围，为维持强铁磁交换网络提供了必要的短程有序，同时也促成了无序纳米结构固有的软磁行为。

通过计算特定 Voronoi 指数的分布，进一步分析了 $Co_{35}Fe_{65}$ 化学计量比下的局部配位环境$\langle n_3,\ n_4,\ n_5,\ n_6\rangle$，如图 3(b) 所示。拓扑分析表明，非晶基体主要由类二十面体结构构成，其中 $\langle 0,\ 1,\ 10,\ 2\rangle$ 和 $\langle 0,\ 0,\ 12,\ 0\rangle$ 多面体最为常见，

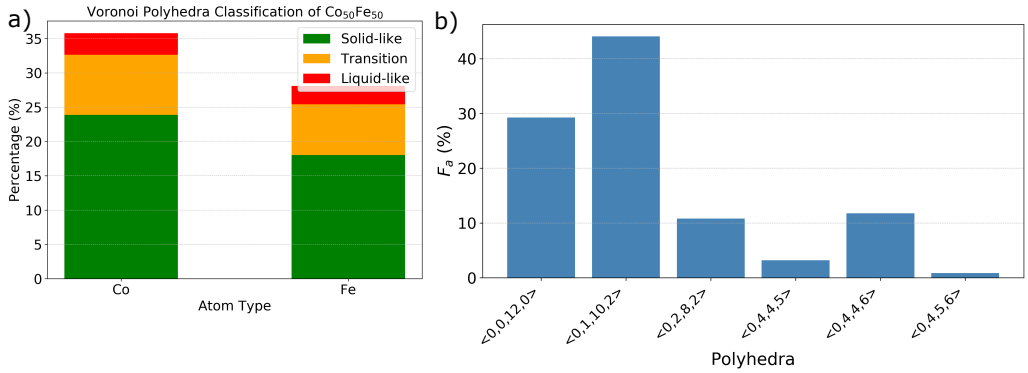

图2：$Co_{50}Fe_{50}$ 纳米圆盘局部原子环境的拓扑分析。(a) 按原子种类进行的Voronoi多面体分类，展示了“固态样”、“过渡态”和“液态样”配位环境的分布。(b) 特定Voronoi指数 $\langle n_3,\ n_4,\ n_5,\ n_6\rangle$的频率分布，突出显示了类二十面体堆积结构基元的占优地位，例如 $\langle 0,\ 1,\ 10,\ 2\rangle$ 和 $\langle 0,\ 0,\ 12,\ 0\rangle$。

分别约占总数的 48% 和 33%。这些高配位结构基元是钴铁合金中稳定非晶相的短程有序（SRO）的特征。此类指数的高频率，尤其是正二十面体 $\langle 0,\ 0,\ 12,\ 0\rangle$，证实了原子堆积致密，这与前文按物种分类所识别的“类固体”部分相对应。在这一富铁成分中，钴原子周围此类稳定结构基元仍占主导地位，从而提供了稳固的结构框架；尽管铁含量增加带来了更高的整体无序度，该框架仍能维持磁连接性。

通过Voronoi镶嵌对$Co_{65}Fe_{35}$ 纳米圆盘的局部原子环境进行了表征，以评估钴含量较高对非晶稳定性的影响。如分类结果（图4a）所示，钴原子呈现出明显的分布特征，其中“过渡态”多面体所占比例最高，超过27%；其次是“固态样”环境，约占局部配位环境的18%。相比之下，铁原子中有序结构的占比较低，这证实了该合金的结构骨架主要由钴相支撑。

这种拓扑排列通过 Voronoi 指数 $\langle n_3,\ n_4,\ n_5,\ n_6\rangle$ 的分布得到了进一步详述（图4b）。短程有序（SRO）

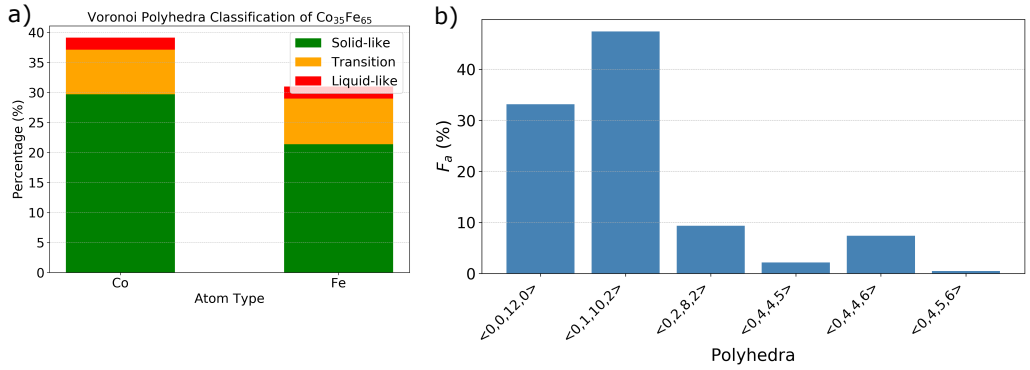

图3：富铁 $Co_{35}Fe_{65}$ 化学计量比的结构表征。(a) 按物种分类的 Voronoi 分类，显示与铁原子相比，钴原子周围的局部有序程度始终更高。(b) 配位多面体指数的分布，表明尽管铁浓度增加，仍有大量密堆积单元能够稳定非晶基体。

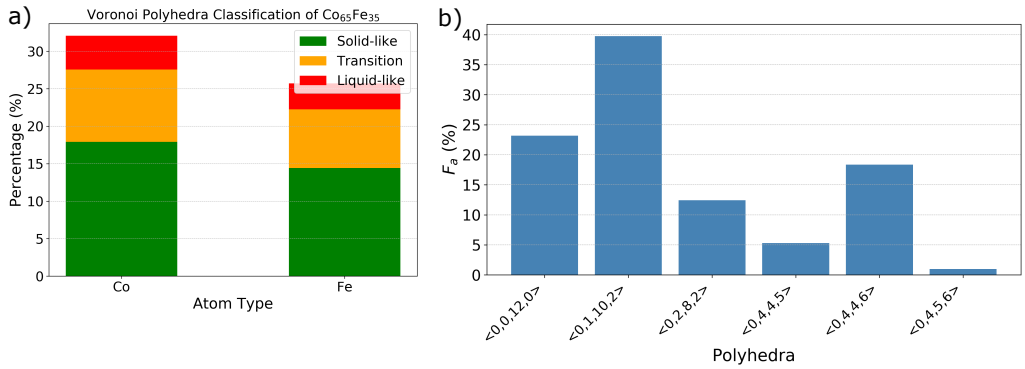

图4：$Co_{65}Fe_{35}$ 化学计量比的结构表征。(a) Voronoi 多面体分类，展示了过渡态和“类固体”环境的主导地位。(b) Voronoi 指数的频率分布，突出了能够稳定非晶相的二十面体堆积基元的普遍存在。

显著地以类二十面体结构基元为主，其中 $\langle 0, 1, 10, 2\rangle$ 多面体最为常见，约占总数的 40%。此外，正二十面体 $\langle 0, 0, 12, 0\rangle$ 约占配位壳层的 23%。这些致密高配位单元的高占比——尤其是 $\langle 0, 1, 10, 2\rangle$ 结构基元占主导——表明非晶基体稳定且堆积紧密，这对于后续研究磁交换和自旋动力学至关重要

在这种富钴化学计量比下。

对 $Co_{50}Fe_{50}$, $Co_{35}Fe_{65}$, 和 $Co_{65}Fe_{35}$化学计量比进行全面比较后发现，非晶钴铁体系中短程有序的形成呈现出一致的趋势。在所有研究的案例中，与铁原子相比，钴原子表现出更高程度的局部有序性；其中，$Co_{65}Fe_{35}$ 构型中钴物种的固态样比例与过渡态比例之和超过 45%。这证实了钴始终是主要的拓扑稳定剂，无论整体化学比例如何，都会促进致密原子团簇的形成。

对三个体系的 Voronoi 指数进行分析后发现，二十面体堆积在这些金属玻璃中具有普遍性。$\langle 0、1、10、2\rangle$ 和 $\langle 0、0、12、0\rangle$ 结构基元持续占据主导地位，尤其是在 $Co_{65}Fe_{35}$ 样品中出现频率最高，这表明随着钴含量增加，局部自由体积有所减少。这种拓扑一致性是合金磁性建模中的一项关键发现，因为它提供了可重复的原子尺度基准。稳定的结构基元确保了距离相关的交换相互作用参数（J_{ij}）能够有效捕捉所需的磁连接性，从而在所研究的整个成分范围内模拟准确的自旋-晶格动力学。

3.2. 局部拓扑对磁性标定的影响

观察到的不同元素间的拓扑对比直接影响钴铁纳米盘的磁响应。钴原子周围以实心多面体为主，因此这些区域的交换相互作用环境更加稳定、均匀（J_{ij}）。相比之下，铁原子周围更无序的邻域会导致磁耦合常数出现局部波动。

在 J_{ij} 校准过程中，我们明确考虑了这种结构-磁性相互作用。利用平衡态分子动力学样本的结构转储文件，我们对依赖距离的交换参数进行缩放，使系统的平均场居里温度（T_C^{MF}）与实验基准相符。对于 $Co_{50}Fe_{50}$ 化学计量比，我们调整参数，使 T_C 约为 1120 K；而在 $Co_{35}Fe_{65}$ 体系中，富铁环境的估算转变温度较低，这是因为无序的“类液态”多面体所占比例更高。这种多尺度结构排布确保校准后的交换作用格局准确反映非晶纳米结构中的本征阻尼和自旋波传播模式。

3.3. 磁化动力学与弛豫

图 5 展示了所研究的三种非晶 Co_xFe_{1-x} 纳米圆盘的纵向磁化强度 $M_z(t)$ 随时间的演化。在 0.1 T 外加磁场下，弛豫过程明显取决于化学计量比；磁化排列速率和饱和水平与样本的化学和结构无序程度密切相关。所有成分均呈现典型的类铁磁弛豫，但随着钴含量增加，动态响应显著不同。

$Co_{65}Fe_{35}$ 化学计量比表现出最高效的磁弛豫，其特征是初始斜率最陡，且饱和磁化强度最高，在最初的 500 ps 内达到 $M_z \approx 0.81$ 。这种优异表现与局部结构研究结果直接相关：研究发现，与铁原子相比，钴原子保持了更高程度的“固态样”配位，且致密二十面体构型的占比更高。这种稳固的结构骨架最大限度地减少了交换积分（J_{ij}）的波动，从而促进磁矩更加协同、快速地排列。相比之下，富铁的 $Co_{35}Fe_{65}$ 样品弛豫最慢，饱和平台最低（$M_z \approx 0.57$）。富铁环境占比增加，其特点是“液态样”结构和过渡多面体的比例更高，由此引入显著的拓扑无序，破坏交换相互作用连通性，并增强纳米圆盘内的磁阻尼。

等原子比的 $Co_{50}Fe_{50}$ 构型代表一种中间状态，在约 300 ps 时达到稳定的饱和水平 $M_z \approx 0.80$ 。有趣的是，尽管其饱和水平与 $Co_{65}Fe_{35}$ 样品相当，但初始弛豫速率略低，这反映了两种元素对全局交换场的均衡影响。这些结果证实， $Co-Fe$ 非晶合金的宏观磁弛豫从根本上受短程有序支配，其中钴提供的密堆积单元的稳定化对于维持高饱和度和快速动态响应至关重要。

二十面体短程有序（SRO）与 $Co_{65}Fe_{35}$ 中磁稳定性之间的相关性，与近期关于过渡金属非晶合金的研究发现一致。根据 Gómez-Polo 等人 [23]，的研究，非晶体系中的软磁性能由局部交换相互作用的分布决定。在我们的 Co-Fe 体系中，我们发现这些相互作用受到高配位单元的稳定，例如 $\langle 0, 1、10, 2\rangle$ ——

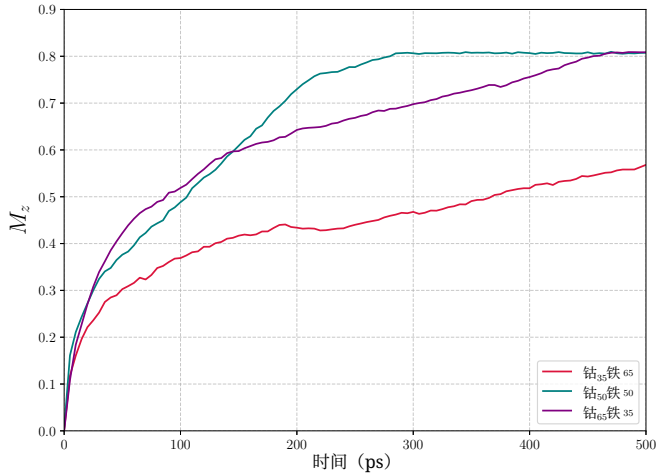

图5：$Co_{35}Fe_{65}$,、$Co_{50}Fe_{50}$，和$Co_{65}Fe_{35}$ 非晶纳米圆盘的纵向磁化弛豫 M_z 随时间的变化。曲线展示了化学成分对饱和磁化强度和弛豫动力学的影响。

这些单元正是我们研究中发现的特征。此外，与 $Co_{35}Fe_{65}$ 相比，$Co_{65}Fe_{35}$ 表现出更高的饱和度和更快的弛豫，这与 Son等人的报告一致。他们证明，倾向于形成致密原子网络的成分能够最大限度地降低磁阻尼，并优化磁化路径 [22]。这些结果证实，从无序的富铁环境转变为钴稳定的二十面体团簇，是决定这些纳米圆盘动态响应的主要指标。

4. 结论

在本研究中，我们采用分子动力学与原子自旋动力学相结合的方法，研究了非晶态 Co_xFe_{1-x} 纳米圆盘的结构和磁学性质。结果表明，通过Voronoi镶嵌表征的局部原子排列，在决定这些金属玻璃的宏观磁响应方面发挥着根本作用。在所研究的所有化学计量比中，我们都发现了持续存在的结构异质性：与铁原子相比，钴原子始终促进更高程度的短程有序。具体而言，$Co_{65}Fe_{35}$ 和 $Co_{50}Fe_{50}$ 构型呈现出由二十面体堆积基元主导的稳固“固态”多面体和“过渡态”多面体框架

例如 $\langle 0$、1、10、$2\rangle$ 和 $\langle 0$、0、12、$0\rangle$ 指标。

动态模拟表明，这种结构稳定性与磁弛豫过程存在内在联系。$Co_{65}Fe_{35}$ 化学计量比具有最高比例的密堆积单元，表现出最有效的磁对齐和最高的饱和磁化强度（$M_z \approx 0.81$）。相比之下，$Co_{35}Fe_{65}$ 样品中铁含量的增加导致无序的“类液体”环境更加普遍，从而增强了磁阻尼，并导致显著较低的饱和平台（$M_z \approx 0.57$）。这些发现表明，钴充当了拓扑稳定剂，维持了快速自旋对齐所必需的交换相互作用连通性（J_{ij}）。本研究为非晶磁性纳米材料的设计提供了重要见解，凸显出精确控制局部配位环境对于优化未来磁振子和自旋电子器件的性能至关重要。

参考文献

[1] M. E. McHenry、M. A. Willard 和 D. E. Laughlin，《用于软磁体应用的非晶和纳米晶材料》，*Progress inMaterials Science*，第 44 卷，第 4 期，第 291–433 页，1999 年。 [在线]。可访问：https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S007964259900002X

[2]F. Luborsky，《第 6 章：非晶铁磁体》，载于《Handbook of Ferromagnetic Materials》系列。Elsevier，1980 年，第 1 卷，第 451–529 页。[在线]。链接：https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S157493040580121X[3] B. Yang、Y. Wu、X. Li 和 R. Yu，《化学合成具有优异磁性能的高稳定性非晶铁钴纳米合金》，*Nanomaterials*，第 8 卷，第 3 期，2018 年。 [在线]。链接：https://www.mdpi.com/2079-4991/8/3/154[4]H. W. Sheng、W. K. Luo、F. M. Alamgir、J. M. Bai 和 E. Ma，《金属玻璃中的原子堆积及短程至中程有序》，*Nature*，第 439 卷，第 7075 期，第 419–425 页，2006 年 1 月。 [在线]。链接：https://doi.org/10.1038/nature04421[5]D. B. Miracle，《金属玻璃的结构模型》，*Na-ture Materials*，第 3 卷，第 697–702 页，2004 年。[在线]。链接：https://www.nature.com/articles/nmat1219

[6]T. Egami 和 Y. Waseda，《原子尺寸效应对金属玻璃形成能力的影响》，《非晶固体杂志》，第 64 卷，第 1 期，第 113–134 页，1984 年。[在线]。链接：https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0022309384902102

[7] Y. Cheng 和 E. Ma，《金属玻璃中的原子级结构与结构—性能关系》，《材料科学进展》，第 56 卷，第 4 期，第 379–473 页，2011 年。[在线]。网址：https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0079642510000691

[8] A. Tsvelick 和 P. Wiegmann，《磁性合金理论中的精确结果》，《物理学进展》，第 32 卷，第 4 期，第 453–713 页，1983 年。 [在线]。网址：https://doi.org/10.1080/00018738300101581

[9]S. Bhatti、R. Sbiaa、A. Hirohata、H. Ohno、S. Fukami 和 S. Piramanayagam，《基于自旋电子学的随机存取存储器：综述》，《今日材料》，第 20 卷，第 9 期，第 530–548 页，2017 年。 [在线]。网址：https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1369702117304285

[10]S. Kaul，《具有淬火无序的铁磁体中的静态临界现象》，《磁学与磁性材料杂志》，第 53 卷，第 1 期，第 5–53 页，1985 年。[在线]。可访问：https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0304885385901283

[11]R. F. L. Evans、W. J. Fan、P. Chureemart、T. A. Ostler、M. O. A. Ellis 和 R. W. Chantrell，《磁性纳米材料的原子自旋模型模拟》，《物理学杂志：凝聚态》，第 26 卷，第 10 期，第 103202 页，2014 年 2 月。 [在线]。可访问：https://doi.org/10.1088/0953-8984/26/10/103202

[12]P. W. Ma 和 S. L. Dudarev，《朗之万自旋动力学》，《物理评论*B*》，第 83 卷，第 134418 页，2011 年 4 月。[在线]。可访问：https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.83.134418[13] ——，《朗之万自旋动力学中的纵向磁涨落》，《物理评论*B*》，第 86 卷，第 054416 页，2012 年 8 月。 [在线]。可访问：https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.86.054416[14]D. Beaujouan、P. Thibaudeau 和 C. Barreteau，《钴纳米线的各向异性磁性分子动力学》，物理评论

物理评论*B*，第 86 卷，第 174409 页，2012年11月。[在线]。可访问：https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.86.174409

[15]J. Tranchida、S. Plimpton、P. Thibaudeau 和 A. Thomp- son，“用于耦合磁自旋动力学与分子动力学的大规模并行辛算法”，《计算物理学杂志》，第 372 卷，页码 406–425，2018 年。[在线]。链接：https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999118304200

[16] A. P. Thompson、H. M. Aktulga、R. Berger、D. S. Bolintineanu、W. M. Brown、P. S. Crozier、P. J. in 't Veld、A. Kohlmeyer、S. G. Moore、T. D. Nguyen、R. Shan、M. J. Stevens、J. Tranchida、C. Trott 和 S. J. Plimpton，“LAMMPS——一种灵活的仿真工具，用于在原子、介观和连续介质尺度上开展基于粒子的材料建模”，计算物理通讯，第 271 卷，页码 108171，2022 年。[17] M. Oogane、T. Wakitani、S. Yakata、R. Yilgin、Y. Ando、A. Sakuma 和 T. Miyazaki，“铁磁性薄膜中的磁阻尼”，日本应用物理学杂志，第 45 卷，5R 期，页码 3889，2006 年 5 月。 [在线]。获取链接：https://doi.org/10.1143/JJAP.45.3889[18] A. Stukowski，“使用 OVITO（开放式可视化工具）对原子模拟数据进行可视化与分析”，材料科学与工程中的建模与仿真，第 18 卷，第 1 期，页码 015012，2009 年 12 月。[在线]。获取链接：https://doi.org/10.1088/0965-0393/18/1/015012[19]C. Wang 和 C. Wong，“通过分子动力学模拟研究 $Zr_xCu_{90-x}Al_{10}$ 金属玻璃的结构性质”，合金与化合物杂志，第 510 卷，第 1 期，页码 107–113，2012 年。[在线]。获取链接：https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925838811017816

[20]H. Sharifi 和 C. D. Wick，“为由铜、钛、镍、铬、钴、铝、铁和锰构成的复杂成分合金开发原子间势”，计算材料科学，第 248 卷，页码 113595，2025 年。 [在线]。获取链接：https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0927025624008164

[21] M. A. Willard、D. E. Laughlin、M. E. McHenry、D. Thoma、K. Sickafus、J. O. Cross 和 V. G. Harris，“$(铁_{0.5}钴_{0.5})_{88}锆_7硼_4铜_1$ 纳米晶合金的结构与磁性”，应用杂志

物理学，第 84 卷，第 12 期，页码 6773–6777，1998 年 12 月。 [在线]。获取链接：https://doi.org/10.1063/1.369007[22]H. Son、J. Park、H. Lee 和 H. Choi-Yim，“Fe/Co 比对非晶态 Fe-Co-B-Si-Nb 退火效应的影响”，《金属》，第 13 卷，第 4 期，2023 年。 [在线]。获取链接：https://www.mdpi.com/2075-4701/13/4/715[23]C. Gómez-Polo、M. Vázquez 和 A. Hernando，“非晶铁磁体中交换场的分布”，《物理评论 *B*》，第 53 卷，第 6 期，页码 3392–3400，1996 年。[在线]。获取链接：https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.53.3392