

纳米Fe₄N广义层错能的分子动力学模拟

张新洲, 武鹤楠*, 高欣慰

辽宁科技大学理学院, 辽宁 鞍山

收稿日期: 2026年1月4日; 录用日期: 2026年1月27日; 发布日期: 2026年2月9日

摘要

纳米Fe₄N作为一种新型磁性材料, 具备优良的磁学性能与极强的抗氧化和耐磨特性, 机械性能和硬度良好, 是半导体电子自旋、光电传感器器件和纳米磁记录材料等的理想原料。目前对其制备过程中微观尺度上的形变和制备机理尚不清楚, 难以在实验室中大量制备。然而使用理论计算(第一性原理和密度泛函理论)受到模拟体系的限制, 难以真实地还原材料的物理性质。实验和理论计算都存在一定的局限性, 因此我们使用分子动力学方法计算了纳米Fe₄N不同面上的广义层错能曲线, 得到(001)面、(111)面及(110)面上沿各方向的稳定层错能和不稳定层错能; 通过两者的数值和比率可以分析Fe₄N的能垒和产生位错的种类, 为分析Fe₄N的微观形变机制打下基础。结果表明, 在(001)面沿[001]方向上容易产生部分位错, 沿[110]方向容易产生全位错; 在(111)面沿[110]和[112]方向上都能产生部分位错; 在(110)面[110]方向可以产生全位错。

关键词

纳米Fe₄N, 广义层错能, 分子动力学模拟

Molecular Dynamics Simulation of General Stacking Fault Energy of Nano Fe₄N

Xin Zhou Zhang, Henan Wu*, Xinwei Gao

School of Science, University of Science and Technology Liaoning, Anshan Liaoning

Received: January 4, 2026; accepted: January 27, 2026; published: February 9, 2026

Abstract

As a new type of magnetic material, nano Fe₄N has excellent magnetic properties, strong anti-oxidation and wear resistance, and good mechanical properties and hardness. It is an ideal raw material

*通讯作者。

文章引用: 张新洲, 武鹤楠, 高欣慰. 纳米 Fe₄N 广义层错能的分子动力学模拟[J]. 材料科学, 2026, 16(2): 120-127.
DOI: 10.12677/ms.2026.162030

for semiconductor electronic spin, photoelectric sensor device, and nano magnetic recording material. At present, due to the unclear deformation and preparation mechanism on the micro-scale in the preparation process of Fe_4N , it is difficult to prepare large scale Fe_4N in the laboratory. However, the use of theoretical calculations (first principles and density functional theory) is limited by the simulation system, and it is difficult to truly restore the physical properties of the material. Both experimental and theoretical calculations have certain limitations. Hence, molecular dynamics method has been used to calculate the generalized stacking fault energy curves on different faces of Fe_4N . The stable and unstable stacking fault energies along different directions on (001), (111), and (110) faces have been obtained. The values and ratios of these two types of energies can be used to analyze the energy barrier of Fe_4N and the type of dislocation generated to lay a foundation for the analysis of the microscopic deformation mechanism. Results show that on the (001) plane, partial dislocations are easily generated along the [001] direction, while full dislocations are easily generated along [110] direction. Partial dislocations can be generated on the (111) plane along [110] and [112] directions. Full dislocations can be generated on the (110) plane along $[\bar{1}10]$ direction.

Keywords

Nano Fe_4N , Stacking Fault Energy, Molecular Dynamics Simulation

Copyright © 2026 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

纳米 Fe_4N 具备优异的磁学性能,同时表现出良好的耐腐蚀性、抗氧化性和高耐磨性,是良好的纳米磁记录材料[1]-[4]。 Fe_4N 晶体结构属于空间群 $\text{Pm}\bar{3}\text{m}$,其中金属铁原子形成 FCC 基质,氮原子占据间隙体中心位置,如图 1 所示。顶角原子(M_I)在 2.69 Å 处有 12 个最近邻的金属原子,而面心原子(M_II)在 1.9 Å 处有两个最近的邻近氮原子。顶角原子和面心原子的这种差异令 Fe_4N 材料表现出磁性。

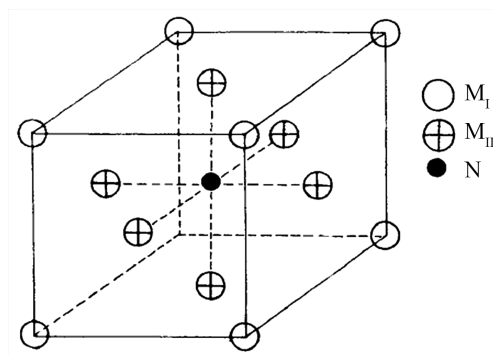


Figure 1. Crystal structure of Fe_4N [5]

图 1. Fe_4N 晶体结构图[5]

X. L. Wu [6]等人利用 Fe_3O_4 粉末通过同步还原氮化法制备纳米 Fe_4N ,氮化温度为 773 K 时,粉体的平均粒径为 80 nm,粒径虽然达到纳米级,但相对来说还是较大,不能充分表现其纳米特性。M. J. Yu [7]等人利用气体氮化法在 793 K 和 5 h 的氮化条件下将铁粉氮化成粒径为 30~40 nm 的 Fe_4N ,虽然粒径达到了纳米级,但是氮化温度高,时间用量也较大。实验上制备不到理想的 Fe_4N 粉末,这主要是因为研究

者对 Fe_4N 制备过程中的微观尺度上的形变机制和制备机理尚不清晰。研究者们开始在模拟计算方面研究 Fe_4N 的性质。A. Leineweber [8]等人运用密度泛函理论(DFT)计算类似 FCC 的 Fe_4N 和 Fe_4N 超结构,得出在温度大于 0 K 时,两者有难以克服的能量差异。Carlos Ariel Samuido Perez [9]等人通过 DFT 研究了 Fe_4N 的基态性质。Y. J. Shi [10]等研究了分别以 Fe_2 和 Fe_2N 为外表面的 $\text{Fe}_4\text{N}(001)$ 面的结构和磁性能,表面稳定性计算表明 $\text{Fe}_4\text{N}(001)$ 面更易以 Fe_2N 为外表面,这一结果对 Fe_4N 模型的建立有一定借鉴作用。史耀君和吴明辉[11] [12]分别对 Fe-N 系统进行了第一性原理模拟研究。由于模拟尺度的限制,第一性原理只能局限于对材料电子结构的研究,所能模拟的原子数有限,不能真实模拟材料的制备和形变过程,而分子动力学(MD)方法[13]可以模拟上千万个原子,适合模拟纳米材料的制备过程及各种性能并深入研究制备和形变过程的微观机制。

面心立方(FCC)合金的广义层错能(SFE)受到了极大的关注,因为形变机制与其 SFE 值密切相关[14]-[17]。MD 计算模拟已被用于预测 Fe-C [18]、Fe-Cr-Ni-(Mn, Co, Nb) [19]和 Fe-Cr-Ni-N [20]合金中的 SFE。Yamakov 等[21]提出了一个描述从位错驱动到界面介质塑性形变的机制图,该变形基于部分位错的分裂距离和广义层错能 γ_{sf} 。Van Swygenhoven 等人[22]揭示,稳定层错能量 γ_{sf} 本身并不能捕捉到晶界中部分位错形核的重要物理过程,正确解释纳米金属滑移的本质需要广义堆垛层错能;这是由 Vitek 首先提出的[23] [24],涉及稳定的堆垛层错能 γ_{sf} 和不稳定的堆垛层错能 γ_{usf} 。广义层错能曲线可能受到所施加应力的方向和方向的影响。在以前的研究中,Rice [25]指出,广义层错能曲线的不稳定与堆垛层错能 γ_{usf} 位错的能垒大小有关。实验中只能得到稳定层错能,而不稳定层错能无法通过实验测得。不稳定层错能表示错位形成所需要克服的最小能垒,因此可以使用 γ_{usf} 描述材料发生位错的难易程度[26]。

本文通过分子动力学方法,用 LAMMPS 软件计算了纳米 Fe_4N 在(111)、(110)和(001)三个面在主要滑移方向上的广义层错能曲线,为进一步分析 Fe_4N 的变形机制和其在光电探测器和半导体自旋电子器件的应用打下基础。

2. 计算方法

2.1. 分子动力学方法

分子动力学模拟方法是在牛顿力学和统计力学的理论框架下,根据体系内分子之间的作用势,对所建立的牛顿力学方程积分,获得每个原子的坐标、速度、加速度、动量和作用力等物理量。通过对这些物理量采样求系综平均得到客观事物的物理量,比如系统压力、能量、压强等性质。

本研究使用的分子动力学程序为“LAMMPS”。该程序由美国 Sandia 国家实验室开发,以 GPL license 发布,即开放源代码且可以免费获取使用,这意味着使用者可以根据自己的需要自行修改源代码。

“LAMMPS”可以支持包括气态,液态或者固态相形态下、各种系综下、百万级的原子分子体系,并提供支持多种势函数。

对于分子动力学而言,其关键在于原子间作用势。原子之间的作用势决定了原子与周围原子之间的作用,系统各原子的状态信息才能按照牛顿运动方程求出,进而得到系统的微观结构以及宏观性质。因此,选定准确的原子间作用势是分子动力学模拟的必须条件,它决定了建立的体系与真实系统的相似性,直接决定模拟的正确还是错误。常用的原子间作用势有两体势、嵌入原子势和修正的嵌入原子势。本文对于 Fe_4N 的研究采用由 Byeong-Joo Lee 等人开发的修正嵌入原子势[27],其能符合 Fe_4N 体系中各种晶体性质以及第一性原理数据,能够很好的描述比如缺陷、面缺陷能等基本性质。

在分子动力学模拟中,需要合适的边界条件。通常有自由边界、固定边界、柔性边界和周期性边界几种边界条件。本研究中模拟采用的是周期性边界与自由表面边界相结合的边界条件。

2.2. 广义层错能

广义堆垛层错(Generalized Stacking Fault)是从能量的角度对系统进行研究,同时判定势函数是否适合于分子动力学模拟。其核心思想是把晶体沿某一平面分割为两部分,如图2所示;让其中一部分沿该平面相对移动,晶体在单位面积上的能量增额即为广义层错能(GSFE)。

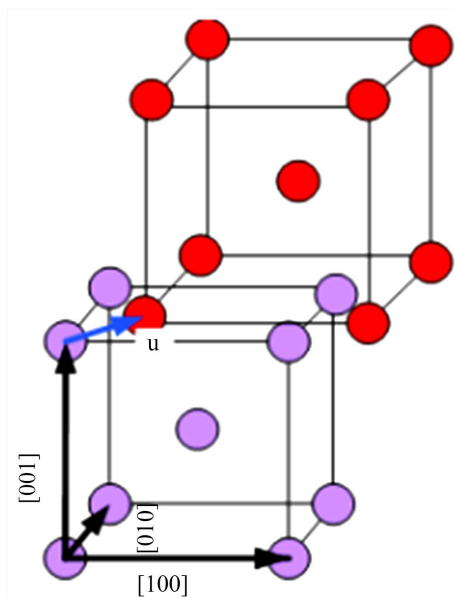


Figure 2. Schematic showing slip on (110) plane in BCC structure, where u is the slip vector
图2. 体心立方结构中沿(110)面滑移示意图, u 为滑移矢量

把单位最小周期所有滑移矢量所对应的层错能按滑移面矢量绘图,得到的图像反映了不同方向上滑移导致的能量变化,其被称为 γ -surface。广义层错能的计算公式如式(1)所示:

$$E_s = \frac{(E_F - E_O)}{A} \quad (1)$$

其中 E_s 表示系统处于滑动位置时系统的 GSFE, E_F 是系统处于滑动位置时系统的总能量, E_O 表示系统没有滑动或变形前系统的能量, A 代表滑动面面积的大小。目前,具体计算广义堆垛层错能有两种主要方法。第一种是 DFT 方法,它是基于密度泛函理论的第一性原理计算方法。另一种方法是 EAM,也就是嵌入式原子方法。EAM 计算方法对模型的选择具有高度依赖性。在计算中选择不同的计算模型将导致最终计算结果的很大偏差。然而,通过选择校正的原子势,可以使计算结果更准确。由于系统中的堆垛层错能量通常较小,难以观察到系统产生的堆垛微观结构,因此难以从实验的角度进行测量,实现结构与性能的相关性。因此,通过分子动力学计算方法获得堆垛层错能,最终得到广义堆垛层错能量曲线,可用于估算物料的变形机理,建立系统结构与性能之间的关系。

2.3. 模拟结果的可视化

对于构建的模型,需要一种直观而且易控制的显示手段来提高研究的正确性。目前已有很多优秀的面向层错能的显示软件和算法。本研究主要使用其中一种“OVITO”来显示构型。“LAMMPS”运行程序输出的各个原子的坐标信息文件,可以在“OVITO”中以动画的形式呈现,这样就可以直观地观察晶体滑移和弛豫的过程。图3为“OVITO”软件显示出的在(001)面沿[001]和[110]方向滑移时的图像。

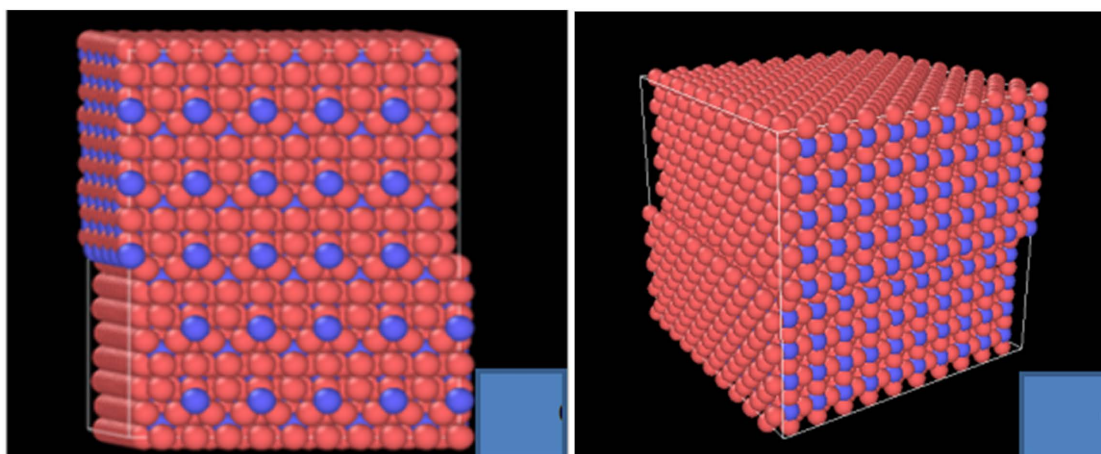


Figure 3. Image of slip along [001] and [110] directions on (001) plane showing by “OVITO”

图 3. “OVITO” 软件显示出的(001)面沿[001]和[110]方向滑移时的图像

3. 纳米 Fe_4N 广义层错能

本文用分子动力学方法模拟计算了 Fe_4N 三个主要的滑移面(001)、(110)和(111)在主要方向上的广义层错能。在计算(001)面的广义层错能采用的模拟晶胞的矢量分别为[100]、[010]及[001]，上下层分别包含 2200 和 2500 个原子，而滑移的主要方向为[001]和[110]。在计算(111)面的广义层错能采用的模拟晶胞的矢量分别为[112]、 $[\bar{1}10]$ 及 $[\bar{1}\bar{1}1]$ ，上下层分别包含 3000 和 3800 个原子，主要的滑移方向也有两个，分别为[110]和[112]。在计算(110)面的广义层错能采用的模拟晶胞的矢量分别为 $[00\bar{1}]$ 、 $[\bar{1}10]$ 及[110]，上下层分别包含 1900 和 1500 个原子，主要的滑移方向有三个分别为 $[00\bar{1}]$ 、 $[\bar{1}1\bar{1}]$ 及 $[\bar{1}10]$ 。

3.1. (001)面广义层错能分析

计算得到纳米 Fe_4N (001)面沿[001]和[110]方向的广义层错能曲线如图 4 所示。由图可见，在(001)面沿[001]和[110]方向滑移时，两个方向上的曲线都有两个极大值和一个极小值。曲线的第一个极大值表示不稳定层错能 γ_{usf} ，而极小值表示稳定层错能 γ_{sf} ；其中实验只能得到 γ_{sf} ，而 γ_{usf} 无法通过实验测得。 γ_{usf} 表示错位形成所需要克服的最小能垒，因此可以用其描述材料发生位错的难易程度[25]。(001)面在[001]和[110]方向滑移时的 γ_{usf} 分别为 1992.219 mJ/m² 和 503.9439 mJ/m²。当滑移距离达到 $\frac{1}{2}$ [001]和 $\frac{4}{5}$ [110]时，对应曲线的极小值点，即稳定层错能点，分别为 478.3625 mJ/m² 和 1945.6343 mJ/m²。该点的值影响金属的位错分解以及合金的延展性等性质[28]。可以使用 γ_{sf}/γ_{usf} 描述全位错分解的难易程度，进而可以评价一个材料的脆韧性。当两者的比值远小于 1 时，那么在滑移的过程中容易产生部分位错，而当两者的比值趋近于 1 时，材料的变形机制倾向于全位错[29]。计算得到在[001]和[110]两方向的 γ_{sf}/γ_{usf} 值分别为 0.9766 和 0.9492，由此可以得到纳米 Fe_4N 沿(001)面在[001]和[110]方向上主要产生全位错。

3.2. (111)面广义层错能分析

计算得到纳米 Fe_4N (111)面沿[110]和[112]方向的广义层错能曲线如图 5 所示。在(111)面沿两个方向滑移的层错能曲线相差不大。在[110]方向滑移时的 γ_{usf} 为 1105.5084 mJ/cm²，在[112]方向滑移的 γ_{usf} 为 971.0833 mJ/m²。其势垒能量由[110]到[112]方向有所升高，证明在[112]方向上容易产生层错。在(001)面上沿[110]方向 γ_{sf} 为 870.2522 mJ/m²，而[112]方向为 802.3327 mJ/m²。两方向上 γ_{sf}/γ_{usf} 的比值分别为 0.7871 和 0.8262。可见材料在[110]和[112]方向上容易产生部分位错。

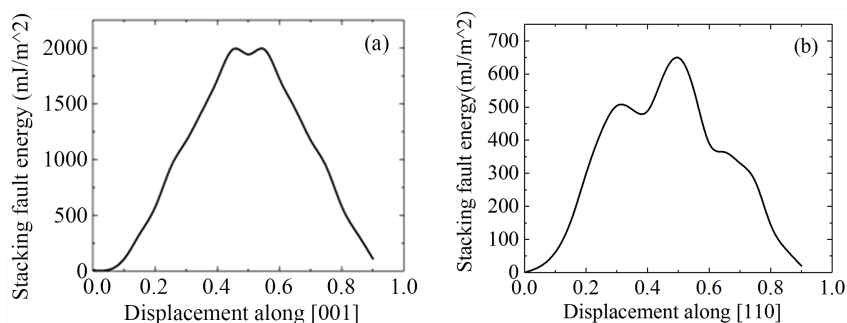


Figure 4. Generalized stacking fault energy on (001) plane; (a) shows the one along [001] direction and (b) shows the one along [110] direction

图 4. (001)面广义层错能曲线, (a)为沿[001]方向的广义层错能曲线, (b)为沿[110]方向的广义层错能曲线

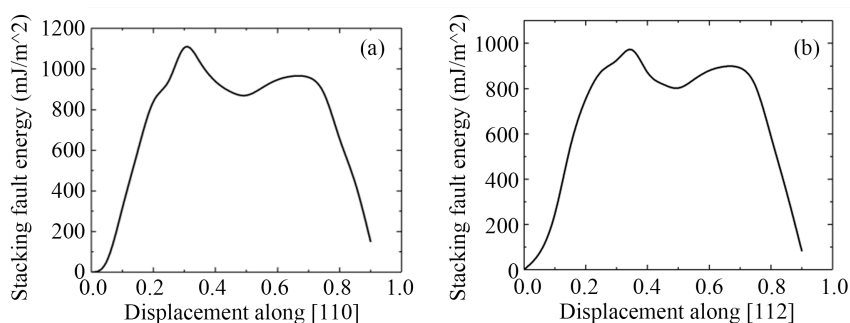


Figure 5. Generalized stacking fault energy on (111) plane; (a) shows the one along [110] direction and (b) shows the one along [112] direction

图 5. (111)面广义层错能曲线, (a)为沿[110]方向的广义层错能曲线, (b)为沿[112]方向的广义层错能曲线

3.3. (110)面广义层错能分析

计算得到纳米 Fe_4N (110)面沿 $[00\bar{1}]$ 、 $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ 及 $[\bar{1}10]$ 三个方向的广义层错能曲线如图 6 所示。在 $[00\bar{1}]$ 方向上滑移时不存在极小值点, 即不存在稳定层错能点, 在该方向上不能产生位错。 $[\bar{1}10]$ 上 γ_{usf} 为 602.3208 mJ/m^2 , γ_{sf} 为 563.074 mJ/m^2 , γ_{sf}/γ_{usf} 的比值为 0.935, 因此在 $[\bar{1}10]$ 方向可以产生全位错。但是在 $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ 方向上有两个极小值, 即存在两个稳定层错能点, 第一个 γ_{sf} 为 2034.5082 mJ/m^2 , 另一个为 2030.7509 mJ/m^2 。

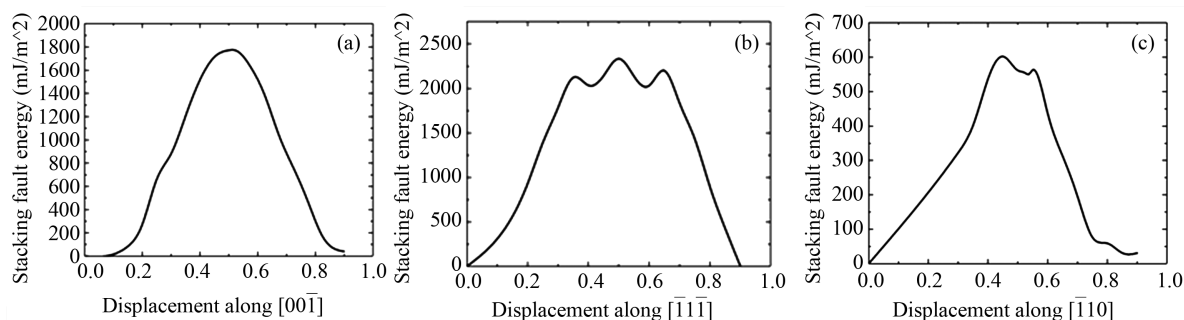


Figure 6. Generalized stacking fault energy on (110) plane; (a) shows the one along $[00\bar{1}]$ direction, (b) shows the one along $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ direction and (c) shows the one along $[\bar{1}10]$ direction

图 6. (110)面广义层错能曲线, (a) 为沿 $[00\bar{1}]$ 方向的广义层错能曲线, (b) 为沿 $[\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$ 方向的广义层错能曲线, (c) 为沿 $[\bar{1}10]$ 方向上的广义层错能曲线

4. 结论

本文使用分子动力学方法, 通过 *lammmps* 软件计算了纳米 Fe_4N 在(001)、(111)和(110)三个平面沿主要方向上广义层错能, 并绘制了广义层错能曲线, 从而得到了其在主要方向上产生层错的难易程度以及类型, 得到了以下结论:

- 1、在(001)面沿[001]方向上容易产生部分位错, 但是需要克服的势垒比较大; 沿[110]方向容易产生全位错, 克服的势垒较小。
- 2、在(111)面沿[110]和[112]方向上都能产生部分位错。
- 3、在(110)沿 $[00\bar{1}]$ 方向不存在稳定层错能点; 在 $[\bar{1}1\bar{1}]$ 方向上在一个滑移周期内可以产生两次位错, 但是产生位错所需要克服的势垒较高; 在 $[\bar{1}10]$ 方向可以产生全位错。

本研究可以为进一步分析纳米 Fe_4N 的变形机制及其在磁记录介质、自旋电子器件和新型光电传感器的应用打下基础。

致 谢

本研究由辽宁科技大学 2025 年大学生创新创业项目资助(项目编号: X202510146426)。

参考文献

- [1] 张龙定, 王群, 唐章宏. 片状 Fe_4N 磁粉复合材料的传导噪声抑制特性研究[J]. 安全与电磁兼容, 2016(06): 55-58, 62.
- [2] 汪敢. Fe_4N 合金磁粉的制备及应用[J]. 磁记录材料, 1984(3): 17-20.
- [3] 瞿志学, 王群, 孙忠巍, 等. 扁平化 Fe_4N 粉体的制备及其电磁性能研究[J]. 稀有金属材料与工程, 2013, 42(增刊 1): 126-129.
- [4] 王丽丽, 闫岩, 安涛, 等. Fe_3N 纳米晶薄膜退火过程的结构演变及其磁性[J]. 吉林大学学报(理学版), 2013, 51(6): 1148-1150.
- [5] Murthy, N.S.S., Paranjpe, S.K., Marsongkohadi, Sumaamidjaja, K. and Murthy, M.R.L.N. (1985) Neutron Diffraction Studies of Transition Metal Nitrides. *Pramana*, **24**, 311-316. <https://doi.org/10.1007/bf02894836>
- [6] Wu, X.L., Zhong, W., Jiang, H.Y., Tang, N.J., Zou, W.Q. and Du, Y.W. (2004) Magnetic Properties and Thermal Stability of γ - Fe_4N Nanoparticles Prepared by a Combined Method of Reduction and Nitriding. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, **281**, 77-81. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2004.03.043>
- [7] Yu, M., Xu, Y., Mao, Q., Li, F. and Wang, C. (2016) Electromagnetic and Absorption Properties of Nano-Sized and Micro-Sized Fe_4N Particles. *Journal of Alloys and Compounds*, **656**, 362-367. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2015.10.005>
- [8] Leineweber, A., Hickel, T., Azimi-Manavi, B. and Maisel, S.B. (2017) Crystal Structures of Fe_4C vs. Fe_4N Analysed by DFT Calculations: FCC-Based Interstitial Superstructures Explored. *Acta Materialia*, **140**, 433-442. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2017.08.059>
- [9] dos Santos, A.V. and Samudio Pérez, C.A. (2016) Ab Initio Investigation of the Substitution Effects of 2p Elements on the Electronic Structure of γ - Fe_4X (X = B, C, N, and O) in the Ground State. *Journal of Materials Research*, **31**, 202-212. <https://doi.org/10.1557/jmr.2015.394>
- [10] Shi, Y.J., Du, Y.L. and Chen, G. (2012) Ab Initio Study of Structural and Magnetic Properties of Cubic Fe_4N (001) Surface. *Solid State Communications*, **152**, 1581-1584. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2012.05.017>
- [11] 史耀君. 铁氮化合物的第一性原理研究[D]: [博士学位论文]. 南京: 南京理工大学, 2012.
- [12] 吴明辉. Fe-N 系统的第一性原理模拟研究[D]: [博士学位论文]. 上海: 上海交通大学, 2015.
- [13] Frenkeland, D., Smit, B. 分子模拟: 从算法到应用[M]. 北京: 化学工业出版社, 2002.
- [14] Schramm, R.E. and Reed, R.P. (1975) Stacking Fault Energies of Seven Commercial Austenitic Stainless Steels. *Metalurgical Transactions A*, **6**, 1345-1351. <https://doi.org/10.1007/bf02641927>
- [15] Lee, T., Shin, E., Oh, C., Ha, H. and Kim, S. (2010) Correlation between Stacking Fault Energy and Deformation Microstructure in High-Interstitial-Alloyed Austenitic Steels. *Acta Materialia*, **58**, 3173-3186. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2010.01.056>

- [16] 张哲峰, 李国强, 蔡拓, 等. 层错能对面心立方金属变形机制与力学性能的影响[J]. 金属学报, 2023, 59(4): 467-477.
- [17] 陈建军, 丁雨田, 马元俊, 等. 分子动力学模拟不同层错能单晶 Ni 及其合金拉伸变形行为[J]. 稀有金属材料与工程, 2023, 52(9): 3186-3197.
- [18] Abbasi, A., Dick, A., Hickel, T. and Neugebauer, J. (2011) First-Principles Investigation of the Effect of Carbon on the Stacking Fault Energy of Fe-C Alloys. *Acta Materialia*, **59**, 3041-3048. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2011.01.044>
- [19] Lu, S., Hu, Q., Johansson, B. and Vitos, L. (2011) Stacking Fault Energies of Mn, Co and Nb Alloyed Austenitic Stainless Steels. *Acta Materialia*, **59**, 5728-5734. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2011.05.049>
- [20] Liu, J., Han, P., Dong, M., Fan, G., Qiao, G. and Yang, J. (2012) Influence of Ni and N on Generalized Stacking-Fault Energies in Fe-Cr-Ni Alloy: A First Principle Study. *Physica B: Condensed Matter*, **407**, 891-895. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2011.12.111>
- [21] Yamakov, V., Wolf, D., Phillpot, S.R., Mukherjee, A.K. and Gleiter, H. (2003) Deformation-Mechanism Map for Nanocrystalline Metals by Molecular-Dynamics Simulation. *Nature Materials*, **3**, 43-47. <https://doi.org/10.1038/nmat1035>
- [22] Van Swygenhoven, H., Derlet, P.M. and Frøseth, A.G. (2004) Stacking Fault Energies and Slip in Nanocrystalline Metals. *Nature Materials*, **3**, 399-403. <https://doi.org/10.1038/nmat1136>
- [23] Vitek, V. (1966) Thermally Activated Motion of Screw Dislocations in B.C.C. Metals. *Physica Status Solidi (b)*, **18**, 687-701. <https://doi.org/10.1002/pssb.19660180221>
- [24] Vitek, V. (1968) Intrinsic Stacking Faults in Body-Centred Cubic Crystals. *Philosophical Magazine*, **18**, 773-786. <https://doi.org/10.1080/14786436808227500>
- [25] Rice, J.R. (1992) Dislocation Nucleation from a Crack Tip: An Analysis Based on the Peierls Concept. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **40**, 239-271. [https://doi.org/10.1016/s0022-5096\(05\)80012-2](https://doi.org/10.1016/s0022-5096(05)80012-2)
- [26] Datta, A., Waghmare, U.V. and Ramamurty, U. (2008) Structure and Stacking Faults in Layered Mg-Zn-Y Alloys: A First-Principles Study. *Acta Materialia*, **56**, 2531-2539. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2008.01.046>
- [27] Lee, B., Lee, T. and Kim, S. (2006) A Modified Embedded-Atom Method Interatomic Potential for the Fe-N System: A Comparative Study with the Fe-C System. *Acta Materialia*, **54**, 4597-4607. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2006.06.003>
- [28] Vitos, L., Nilsson, J. and Johansson, B. (2006) Alloying Effects on the Stacking Fault Energy in Austenitic Stainless Steels from First-Principles Theory. *Acta Materialia*, **54**, 3821-3826. <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2006.04.013>
- [29] Muzyk, M., Pakiel, Z. and Kurzydowski, K.J. (2012) Generalized Stacking Fault Energy in Magnesium Alloys: Density Functional Theory Calculations. *Scripta Materialia*, **66**, 219-222. <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2011.10.038>