

尺寸效应对非晶态 $\text{TM}_{100-x}\text{M}_x$ 合金结构的影响

王 绪 威 石 双 合
(北京航空航天大学应用数理系)

陈 金 昌 王 京 汉
(北京师范大学物理系) (云南大学物理系)

1988年8月11日收到

本文通过对非晶态合金结构的计算机模拟,研究非晶态 $\text{TM}_{100-x}\text{M}_x$ 合金在成分基本相同条件下, M原子与 TM 原子尺寸比的变化对合金结构的影响. 为此,分别模拟了 $\text{Fe}_{80}\text{P}_{20}$, $\text{Co}_{81}\text{P}_{19}$ 和 $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$ 等非晶态合金的结构,并从径向分布函数、拓扑短程序、结构的稳定性和电子迁移引起的原子尺寸变化等方面讨论了原子尺寸的变化对非晶态合金结构的影响.

一、引 言

在非晶态合金结构的研究中,人们首先通过X射线、中子衍射等进行实验研究,但由于目前实验技术的限制,所能得到信息有限. 人们又致力于结构的模型化工作,特别是利用计算机制作各种结构模型,与实验研究相互配合,以期得到尽可能多的有关结构的信息. 在各种非晶态合金中的 $\text{TM}_{100-x}\text{M}_x$ (TM 为过渡金属, M为类金属)型二元合金,由于其在理论研究和实际应用的重要性,在有关非晶态合金结构计算机模拟的大量工作中,人们主要集中对这类合金结构的研究. 在前人工作的基础上^[1-6],我们通过对非晶态 $\text{Ni}_{84}\text{B}_{16}$, $\text{Ni}_{81}\text{B}_{19}$, $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$ 和 $\text{Co}_{81}\text{P}_{19}$ 等合金结构的计算机模拟,讨论了结构中的化学短程序^[7]和边界条件对模型结构的影响,并提出了准动态边界条件^[8],讨论并定义了一个新的制作 $\text{TM}_{100-x}\text{M}_x$ 型合金模型的 R_i 判据^[9],讨论了在模型结构中势函数的局域和关联效应^[10]. 接着我们又通过对非晶态 Fe-P 合金结构的计算和模拟,讨论了 $\text{Fe}_{75}\text{P}_{25}$ 合金的短程序^[11]和 $\text{Fe}_{100-x}\text{P}_x$ 合金 ($x = 25, 20, 15$) 系列结构随成分的变化^[12]. 在这些工作中,我们发现,对于非晶态 $\text{TM}_{100-x}\text{M}_x$ 型合金,在保持其成分 x 不变条件下,改变过渡金属和类金属的种类,研究合金的M原子和 TM 原子尺寸(在硬球无规密堆模型意义上的等效原子尺寸)比的变化,即尺寸效应对合金结构的影响,是一个令人感兴趣的问题. 在 $\text{TM}_{100-x}\text{M}_x$ 型合金中, TM 原子和M原子的尺寸是决定合金结构中原子空间分布的重要因素之一,因此期望能通过对此类合金结构的计算机模拟,进一步得到有关原子尺寸比与描述原子空间分布的各部分径向分布函数相互关系的信息,还得到原子尺寸比与描述原子配置相对位置关系的拓扑短程序间相互关系的信息. 原子尺寸比是影响非晶态合金形

成和稳定性的因素之一,又在非晶态合金形成的合金化过程中,原子间电子迁移引起屏蔽电荷的重新分布,进而导致原子尺寸的变化等等。同样,也期望能通过此类合金结构的计算机模拟,对这些问题能得到一些具体信息。

为此,我们选择了成分基本相同的非晶态 $\text{Fe}_{80}\text{P}_{20}$, $\text{Co}_{81}\text{P}_{19}$ 和 $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$ 等几种合金作研究对象,分别对它们的结构进行了计算机模拟,讨论了尺寸效应对结构的影响,并着重对上述一些问题进行了分析,得到了一些初步结论。

二、模型的制作与松弛

1. 硬球无规密堆模型

在我们所制作的 $\text{Fe}_{80}\text{P}_{20}$, $\text{Co}_{81}\text{P}_{19}$ 和 $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$ 三种模型中,分别包含了 2305, 2306 和 2464 个原子。制作模型时,所用各 TM 原子和 M 原子尺寸如表 1 所示。表 1 中 D_{TM} , D_{M} 分别为各 TM 原子和 M 原子直径, r_c 为考虑化学短程序引入的 R_c 判据的阈值^[7,9]。同时,考虑到原子尺寸的变化,对不同模型的加球程序也做了适当调整。应当指出,如表 1 所示,在选取不同合金原子尺寸时,对同种 TM 原子或 M 原子选取了不同尺寸,且与处于晶态时也不同,这主要是考虑到合金化过程中,屏蔽电荷重新分布引起的原子尺寸的变化。

表 1 模型原子直径和阈值

模 型	$D_{\text{TM}}(\text{\AA})$	$D_{\text{M}}(\text{\AA})$	$D_{\text{M}}/D_{\text{TM}}$	$r_c(\text{\AA})$
$\text{Fe}_{80}\text{P}_{20}$	2.61	2.14	0.820	3.78
$\text{Co}_{81}\text{P}_{19}$	2.55	2.09	0.819	3.423
$\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$	2.57	1.71	0.665	3.63

2. 松弛

在准动态边界条件下^[8],用共轭梯度法对模型进行了松弛,松弛时所用势函数,对 $\text{Co}_{81}\text{P}_{19}$ 和 $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$ 合金模型用的是 L-J 势,而对 $\text{Fe}_{80}\text{P}_{20}$ 合金模型,为避免由于 L-J 势较硬导致的最近邻原子分布峰过狭,改用 Morse 势。又三种合金模型松弛时所用位移分数相同,都是 $f = 0.005$ 。

三、计算结果

1. 体系能量

图 1 给出所研究三种非晶态合金模型能量随松弛次数变化率曲线。由图 1 可见,三种模型的能量都是随松弛次数增加而下降,最后达到稳定值。同时下降的趋势基本上是比较快的变化和较缓慢的变化交替进行,只是由于所取能量坐标对 $\text{Fe}_{80}\text{P}_{20}$ 和 $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$ 两种模型有些过大,因此在图 1 中它们能量的上述变化特点不十分明显。

2. 简约部分径向分布函数 $G_{ij}(r)$

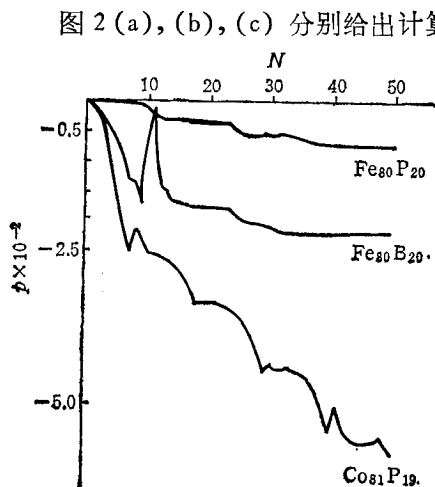


图1 三种非晶态合金模型能量随松弛次数变化率曲线

图2(a), (b), (c) 分别给出计算得到所研究三种合金模型经50次松弛后的简约部分径向分布函数 $G_{ij}(r)$, 为比较同时给出实验曲线。表2列出各简约部分径向分布函数的各峰值位置计算值和实验值。表3列出松弛前后各合金模型三种配位数的计算值和实验值。

由图2和表2, 表3可见, 计算所得三种合金模型各简约部分径向分布函数 $G_{ij}(r)$ 及有关峰值数据都与相应实验结果比较符合, 这表明各模型在结构上是分别接近于相应合金的。

3. 角分布函数

图3(a), (b), (c) 分别给出所研究的三种合金模型在松弛前后的最近邻角分布函数, 由于M-M为零配位, 因而无最近邻角分布。从比较松弛前后结果可以看出, 除 $\text{Fe}_{80}\text{P}_{20}$ 模型的Fe-P角分布函数外, 松弛后多数角分布函数的各峰有不同程度宽化, 这表明松弛在不同程度上使各模型变得更无序和更均匀。

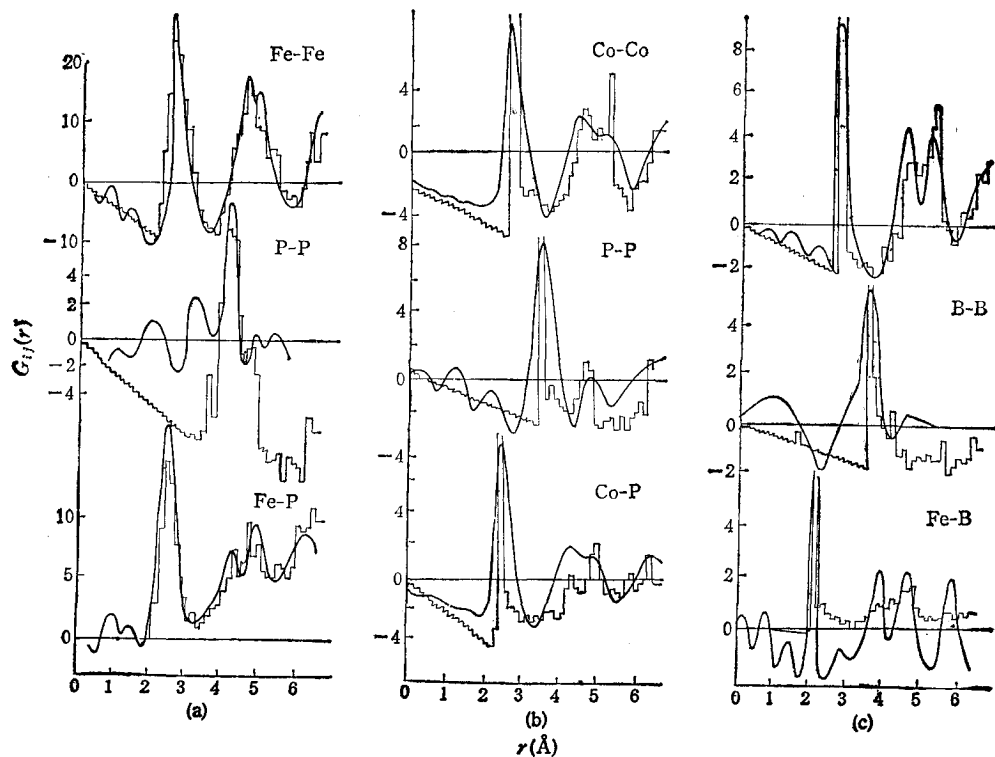
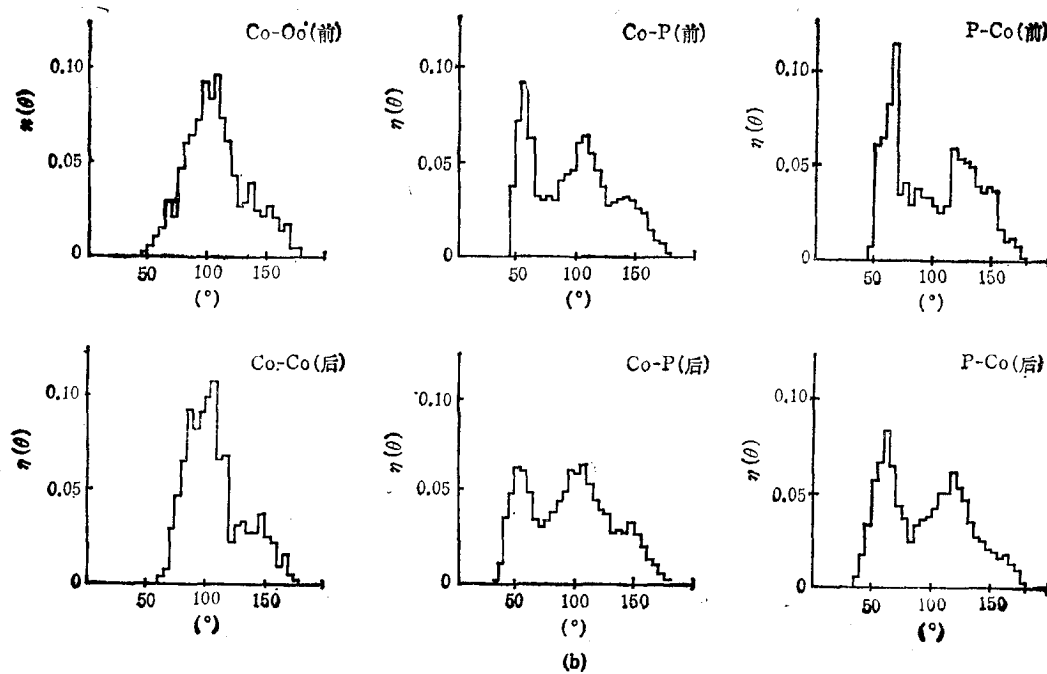
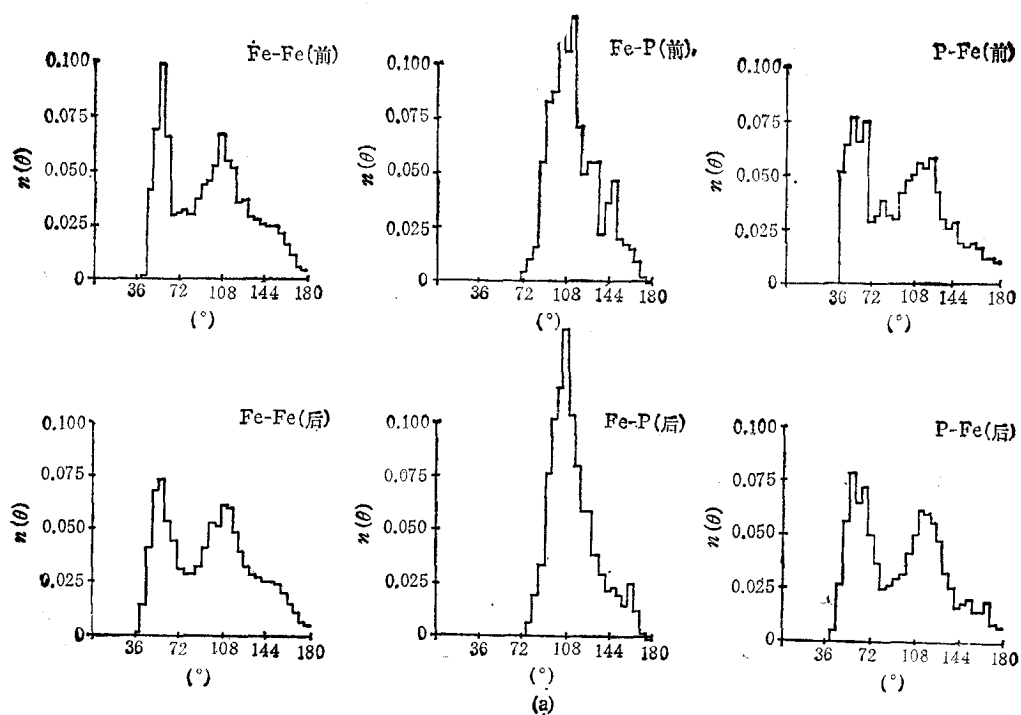
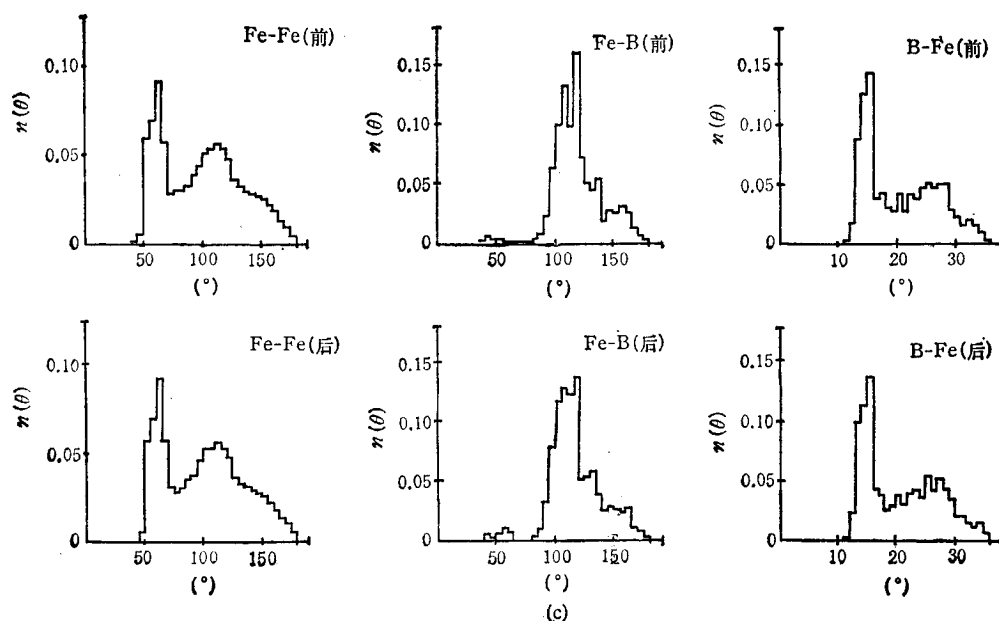


图2 非晶态 $\text{Fe}_{80}\text{P}_{20}$, $\text{Co}_{81}\text{P}_{19}$ 和 $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$ 合金模型的部分径向分布函数计算结果与实验结果的比较



图3 非晶态 $\text{Fe}_{80}\text{P}_{20}$, $\text{Co}_{81}\text{P}_{19}$ 和 $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$ 合金模型松弛前后的角分布函数表2 三种模型松弛后的 $G_{ij}(r)$ 各峰值位置 ($\text{\AA}$)

模型	条件	TM-TM					TM-M					$r_{1\text{TM-M}}/r_{1\text{TM-TM}}$	M-M	
		r_1	r_{21}	r_{22}	r_{21}/r_1	r_{22}/r_1	r_1	r_{21}	r_{22}	r_{21}/r_1	r_{22}/r_1		r_1	r_2
$\text{Fe}_{80}\text{P}_{20}$	实验值	2.61	4.20	5.04	1.61	1.93	2.37	3.47	4.51	1.46	1.90	0.931	—	3.47
	计算值	2.61	4.43	5.22	1.70	2.00	2.40	3.37	4.59	1.36	2.00	0.95	—	3.52
$\text{Co}_{81}\text{P}_{19}$	实验值	2.54	4.20	4.85	1.65	1.91	2.32	3.97	4.59	1.71	1.98	0.913	—	3.34
	计算值	2.54	4.20	4.85	1.65	1.91	2.32	4.08	4.70	1.76	2.02	0.913	—	3.34
$\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$	实验值	2.57	4.25	5.05	1.65	1.97	2.14	3.86	4.69	1.80	2.19	0.833	—	3.57
	计算值	2.63	4.25	5.05	1.62	1.92	2.14	3.86	4.56	1.80	2.13	0.814	—	3.57

表3 三种模型松弛前后近邻配位数计算值和实验值

模 型	条 件	TM-TM	TM-M	M-TM
$\text{Fe}_{80}\text{P}_{20}$	实验值	10.49	2.60	8.33
	松弛前	10.36	2.00	9.31
	松弛后	10.56	2.83	9.31
$\text{Co}_{81}\text{P}_{19}$	实验值	10.1	2.09	8.9
	松弛前	9.8	2.2	8.9
	松弛后	9.7	2.2	8.6
$\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$	实验值	12.4	2.2	8.6
	松弛前	12.0	2.2	8.4
	松弛后	11.1	2.9	8.6

4. 模型的均匀性

为检查各模型在松弛前后的均匀性, 计算了各模型中 TM 和 M 两种原子的均匀度^[7], 结果如表 4 所示. 由表 4 可见, 在松弛前的三种模型中, $\text{Fe}_{80}\text{P}_{20}$ 中的 Fe 原子的空间分布最均匀, 但松弛后有所偏聚, P 原子也有变化. 又单由这三种模型中各原子均匀度比较, 很难得出有关原子尺寸比对模型均匀性有何影响的结论.

表 4 各模型的均匀性

模 型	原 子	松弛前的均匀度 η_i	松弛后的均匀度 η_i
$\text{Fe}_{80}\text{P}_{20}$	Fe	0.0297	0.0581
	P	0.1177	0.1225
$\text{Co}_{81}\text{P}_{19}$	Co	0.0396	0.0353
	P	0.0876	0.0980
$\text{Fe}_{88}\text{B}_{12}$	Fe	0.0489	0.0380
	B	0.1020	0.0890

四、讨 论

1. 原子尺寸比为 1—0.820—0.665 的 $\text{TM}_{80}\text{M}_{20}$ 合金结构模型的简约部分径向分布函数的比较

描述非晶态系统结构主要特征的径向分布函数, 表示的是系统中原子位置的径向分布几率, 其各峰值对应于原子的各占据几率较大的位置. 由于原子的尺寸等因素, 使得系统中原子空间分布位置存在一定间距和关联^[10]. 这样原子的各占据几率较大的位置并非各自独立, 同时其中必有主要的, 反映着原子空间分布的关联特征. 这些特征主要是各部分径向分布函数最高峰位置, 它们给出了各种原子空间分布的特征关联长度. 一般, 只要原子尺寸一经确定, 这些特征关联长度也就确定, 在致密化的要求下, 关联效应将导致原子的其他空间位置分布. 特别地, 对于 $\text{TM}_{100-x}\text{M}_x$ 型合金, 只要给定了 TM 和

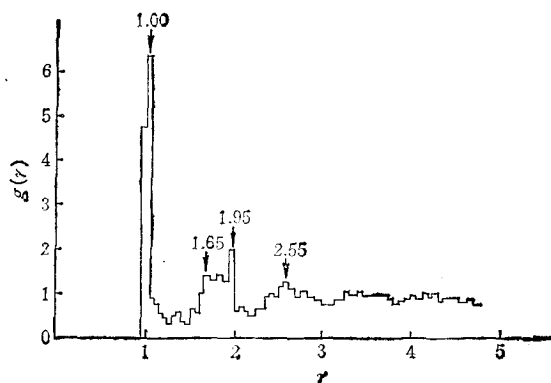


图 4 等径球模型的径向分布函数

M 这两种原子尺寸, TM-TM 原子和 TM-M 原子的特征关联长度也就确定, 就容易得到正确的部分径向分布函数 $G_{\text{TM-TM}}(r)$ 和 $G_{\text{TM-M}}(r)$. 进而可以想到, 对由不同 TM 和 M 原子组成的合金, 其 TM 和 M 原子尺寸比的不同, 是导致其部分径向分布函数不同的一个重要因素.

为便于对三种合金模型的径向分布函数进行比较,如图 4 所示,我们还计算了等径球模型的径向分布函数,即把等径球模型作为 $\text{TM}_{30}\text{M}_{20}$ 合金当 TM 与 M 原子尺寸比为 1 的极端情况。由图 4 可见,以第一峰位置 r_1 为单位时,分裂的第二峰的两个亚峰分别位于 $r_{21} = 1.70$ 和 $r_{22} = 1.95$ 处等。又由图 2 中各 TM-TM 径向分布函数曲线和表 2 中相应的峰值位置数据可见,对于不同原子尺寸的各种合金,其 TM-TM 径向分布函数的各峰位置,当以各自的第一峰为单位时,各峰位置与等径球模型的结果很相近。这表明不同原子尺寸的非晶态 $\text{TM}_{30}\text{M}_{20}$ 合金的 TM-TM 径向分布函数各峰相对位置基本相同,不随原子尺寸比改变。这表明在这几种非晶态合金结构中,占合金主要部分的 TM 原子基本上具有相同的堆积方式。

又直接比较表 2 中几种不同模型的 TM-M 径向分布函数峰值位置等数据,可以看到,随着原子尺寸比的减少,它们的 $r_{1\text{TM-M}}/r_{1\text{TM-TM}}$ 理所当然相应地减少,由 $0.95 \rightarrow 0.913 \rightarrow 0.814$ 。特别是它们的 r_{21}/r_1 和 r_{22}/r_1 却相应地有所增加。即在 TM-M 径向分布函数的各峰值相对位置上表现了随着原子尺寸比的减少,径向分布函数的变化。

2. 原子尺寸比与拓扑短程序

在非晶态 $\text{TM}_{100-x}\text{M}_x$ 型合金中存在着分子结构单元,它是一些以 M 原子为中心, TM 原子为顶点的不同形式的多面体。同时,这种分子结构单元也就是描述合金结构中原子配置相对位置关系的拓扑短程序的具体形式。在各种因素中,对合金结构拓扑短程序形式影响最大的是原子尺寸,即 M 原子与 TM 原子直径比。同时,这一直径比又与 M-TM 原子最大配位数直接对应。我们计算了在各种原子尺寸比范围, M 原子周围的 TM 原子最大配位数及它们所对应的原子尺寸比取下限值时多面体的面数,具体如表 5 所示。由表 5 看到对应于 M-TM 原子尺寸比的不同取值范围,相应的 M-TM 最近邻配位数和多面体的面数。总的说,对应于原子尺寸比减少,配位数和多面体数也递减。对于我们所模拟的三种模型,其中 $\text{Fe}_{80}\text{P}_{20}$ 模型的 P 原子与 Fe 原子直径比 0.820 处于 0.85—0.74 间,其 P-Fe 原子最近邻配位数为 9,相应的分子结构单元为 13 面体或 14 面体。在文献 [12] 中已得出,松弛前 $\text{Fe}_{80}\text{P}_{20}$ 模型的分子结构单元是以 9 配位 13 面体为主,同时多面体有着相当的畸变。松弛后,虽然由于松弛导致 13 面体有所扭曲,但其基本特点仍有所保持。同样,对 Co_{91}P_9 模型,其 P 原子和 Co 原子直径比 0.819 也处于 0.85—0.74 间隔,相应 P-Co 原子最近邻配位数也为 9,相应的分子结构单元也为 13 面体或 14 面体。

表 5 非晶态 TM-M 合金原子尺寸比和 M-TM 配位数

D_M/D_{TM}	配 位 数	多面体面数
1—0.99	12	20
0.99—0.90	11	18
0.90—0.85	10	16
0.85—0.74	9	14, 13
0.74—0.65	8	12, 10
0.65—0.60	7	10
0.60—0.42	6	8

经过与 $\text{Fe}_{80}\text{P}_{20}$ 模型同样的讨论可得出, 松弛前 $\text{Co}_{81}\text{P}_{19}$ 模型的分子结构单元是以 9 配位 14 面体为主, 并也有着相当畸变。同样, 松弛后多面体受到扭曲, 但基本特点有所保持。最后, 对于 $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$ 模型, 其 B 原子与 Fe 原子直径比 0.655 处于 0.74—0.65 间隔, 相应其 B-Fe 原子最近邻配位数为 8, 分子结构单元为 10 面体或 12 面体。同样通过计算所得 B-Fe 角分布函数与理想 8 配位 10 面体和 12 面体角分布函数的对比, 可得出 $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$ 模型的分子结构单元以 12 面体为主。

3. 原子尺寸比与非晶态合金的形成和稳定性

组成合金的原子尺寸比, 即尺寸效应是影响非晶态合金的形成和稳定性的几个因素之一^[13]。一般, 组成合金的原子直径差大于 10% 是有利于非晶态合金的形成和稳定。当然, 也存在组成合金的原子直径差小于 10% 的非晶态合金, 这主要由于尺寸差效应只是影响非晶态合金形成和稳定性的因素之一, 而非唯一因素。一般实验表明, 大的原子尺寸差显著地增加了非晶态形成能力和它的稳定性。同时, 有的非晶态合金结构的计算机模拟工作也表明, 具有不同直径的硬球混合系统模型比大小均匀的硬球系统模型具有较低的自由能, 而且以较小直径的硬球填入原先无序堆积的硬球形成的间隙中, 可以导致更紧密的堆积。又对非晶态合金形成过程应用自由体积模型分析可知, 由直径不同原子构成的一个比较紧密的无序堆积, 将导致自由体积的减少、流动性的减少和扩散系数的减少, 即不均匀的原子尺寸在动力学上阻碍了晶体的生长, 增强了非晶态的稳定性。

对于我们所研究三种非晶态 $\text{TM}_{80}\text{M}_{20}$ 合金的原子尺寸比和合金稳定性关系的讨论, 为尽可能减少其他因素影响, 只限于对 $\text{Fe}_{80}\text{P}_{20}$ 和 $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$ 两种模型进行比较。如图 1 所示, 虽然对于这两种不同合金, 制作模型时我们采用了相近的原子总数, 松弛时采用了相同的边界条件和位移分数 f , 只是所用势函数有所不同, 可经过 50 次松弛后, $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$ 模型能量下降所达到的稳定值要比 $\text{Fe}_{80}\text{P}_{20}$ 模型将近低 2 倍。这表明在我们的结果中, 原子尺寸比的减少(从 0.820→0.665)将显著地提高非晶态合金模型的稳定性。又关于松弛时所取不同势函数的影响问题, 即对 $\text{Fe}_{80}\text{P}_{20}$ 模型松弛时用 Morse 势, 而对 $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$ 模型松弛时用 L-J 势的问题。在我们以前有关势函数工作的结果^[10]中表明, 对于同种非晶态合金模型, 在其他条件完全相同情况下, 一般当用 Morse 势对模型松弛时, 模型能量所达到的稳定值比采用 L-J 势对模型松弛时低得多。这至少表明, 我们所得有关 $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$ 模型松弛后能量所达稳定值比 $\text{Fe}_{80}\text{P}_{20}$ 模型低得多这一结果, 不是由于对 $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$ 松弛时用了 L-J 势, 而是由于原子尺寸比变化的结果。

4. 电子迁移与原子尺寸变化

在非晶态合金形成的合金化过程中, 由于电子迁移引起原子屏蔽电荷重新分布, 并进而导致原子尺寸的变化。为考察和比较我们所模拟三种非晶态合金结构中原子尺寸的变化, 在表 6 中, 对有关的几种 TM 原子和 M 原子的直径进行了比较, 其中有关合金中原子直径数据是我们计算结果, 而有关纯金属和纯类金属原子直径数据取自有关文献[14]。由表 6 中所列各数据比较可得几点有关电子迁移导致原子尺寸变化的具体结果: 1) 形成合金后, TM 原子直径比纯金属时有所增加, 而 M 原子直径比纯类金属时有所减少, M 原子

表 6 TM 和M原子直径的比较

合 金	TM 原子直径(Å)		M原子直径(Å)		
	合 金	纯 金 属	合 金	纯类金属	共价直径
Fe ₈₀ P ₂₀	2.61	2.54	2.19	2.56	2.12
Co ₈₁ P ₁₉	2.55	2.50	2.10	2.56	2.12
Fe ₈₀ B ₂₀	2.57	2.54	1.65	1.96	1.76

向 TM 原子进行了电子迁移。2) 在不同合金中, 由于M原子迁移给 TM 原子的电子数不同, 因此 TM 原子直径的增加和M原子直径的减少不同。各种M原子可迁移的电子数由其价电子数定。3) 由形成合金后的M原子直径值与原子共价直径值较接近, 而与处于原子状态时直径值相差较大, 可以得知, 在非晶态 TM₈₀B₂₀ 合金中, TM 原子与M原子的结合具有共价键形式。

以上结果表明, 虽然在我们所制作的计算机模型中是先把原子作为硬球, 然后利用势函数松弛, 并没有考虑原子的电荷分布和转移, 但是由于制作模型选择原子尺寸时已考虑了合金化过程中电子迁移引起的原子尺寸的变化, 因此就能得到以上一些正确结果。

五、结 论

1. 在非晶态 TM₈₀M₂₀ 型合金中, M原子与 TM 原子尺寸比的变化对 TM-TM 径向分布函数无明显影响, 而引起 TM-M 径向分布函数确定的变化。

2. 对应于M原子与 TM 原子尺寸比不同取值范围, 相应的 M-TM 原子配位数和分子结构单元的面数作变化。并确定在 Fe₈₀P₂₀ 模型中, 分子结构单元以畸变的 9 配位 13 面体为主, 而在 Co₈₁P₁₉ 和 Fe₈₀B₂₀ 模型中, 分别以畸变的 9 配位 14 面体和 8 配位 12 面体为主。

3. 比较 Fe₈₀B₂₀ 和 Fe₈₀P₂₀ 模型在松弛 50 次后能量稳定值表明, 原子尺寸比是影响非晶态合金结构稳定性的因素之一。

本工作系航空工业部科学基金资助的课题。

- [1] D. S. Boudreaux and J. M. Gregor, *J. Appl. Phys.* **48**(1977), 152; 5057.
- [2] D. S. Boudreaux, *Phys. Rev.*, **B18**(1978), 4039.
- [3] D. S. Boudreaux, *Phys. Rev.*, **B23**(1981), 1506.
- [4] P. H. Gaskell, *J. Non-Cryst. Solids*, **32**(1979), 207.
- [5] T. Fujiwara and Y. Ishii, *J. Phys. F*, **10**(1980), 1901.
- [6] T. Fujiwara *et al.*, *J. Phys. F*, **11**(1981), 1327.
- [7] 王京汉、李德修、陈金昌, 物理学报, **35**(1986), 482.
- [8] 陈金昌、王京汉、李德修、程先安、王绪威、陈秉玉, 物理学报, **35**(1986), 969.
- [9] 王京汉、程先安、王绪威、陈秉玉、李德修、陈金昌, 物理学报, **35**(1986), 1383.
- [10] 王京汉、陈金昌、詹文山、赵见高、沈保根、王绪威、李德修, 物理学报, **36**(1987), 172.
- [11] 石双合、陈金昌、王绪威, 物理学报, **37**(1988), 1849.
- [12] 王绪威、陈金昌、石双合, 物理学报, **37**(1988), 1775.
- [13] 郭贻诚、王震西等, 非晶态物理学, 科学出版社, (1984), 106页.
- [14] 黄胜涛等, 非晶态材料的结构和结构分析, 科学出版社, (1987), 307 页.

THE INFLUENCE OF THE ATOMIC SIZE RATIO ON THE STRUCTURE OF THE AMORPHOUS ALLOY $\text{TM}_{100-x}\text{M}_x$

WANG XU-WEI SHI SHUANG-HE

(Department of Applied Mathematics and Physics, Beijing University of Aeronautics and Astronautics)

CHEN JIN-CHANG

(Department of Physics, Beijing Teacher's College)

WANG JING-HAN

(Department of Physics, Yunnan University, Kunming)

ABSTRACT

In this paper, by the computer simulation of the structure of amorphous alloy, the influence of the size ratio of M atoms to TM atoms on the structure of amorphous alloy $\text{TM}_{100-x}\text{M}_x$ is studied with almost the same composition. For this purpose, the structures of amorphous alloy $\text{Fe}_{80}\text{P}_{20}$, $\text{Co}_{81}\text{P}_{19}$ and $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$ are simulated, and the influence of the change of the atomic size ratio on the structures of amorphous alloy is analyzed based on the partial reduced distribution function, topologic short-range order, stabilization of structure and the change of atomic size by the electron transfer etc.