

专题: 无序合金的序调控

铁基非晶合金微观结构与磁性的关联性

刘小榕 李康源 李茂枝[†]

(中国人民大学物理学院, 量子态构筑与测控教育部重点实验室, 北京 100872)

(2025 年 11 月 25 日收到; 2025 年 12 月 17 日收到修改稿)

铁基非晶合金因高饱和磁化强度、高磁导率、低矫顽力和低损耗等优异的软磁性能而持续受到广泛关注. 然而, 目前针对非晶合金磁性的理论研究仍不完善, 铁基非晶合金磁性能的结构本源尚未厘清, 常难以充分解释其磁性行为. 本文简要总结了近年来实验与计算研究中铁基非晶结构与软磁性能, 尤其是饱和磁化强度的关联机制等的研究进展. 已有的研究工作主要集中在不同元素如何影响铁基非晶合金的电子结构、磁矩、饱和磁化强度等, 缺乏对局域原子结构包括短程序、中程序结构影响磁矩等磁性能的微观机理的深入探索. 本文试图为进一步系统地探索铁基非晶合金软磁性能的微观机理厘清研究思路.

关键词: 铁基非晶合金, 软磁性, 结构起源, 非晶合金**DOI:** 10.7498/aps.75.20251598**CSTR:** 32037.14.aps.75.20251598

1 引言

在全球能源结构转型的迫切需求下, 现代电力系统、电子信息基础设施、电动交通及先进制造等关键领域正共同面临能效提升的核心挑战. 这一深刻的系统性变革, 对承担电磁能量转换与传输功能的软磁材料提出了更高性能要求: 必须在保持高磁通密度的同时, 实现高频下的极低损耗^[1-3]. 传统硅钢作为电力工业的支柱材料, 有效提高了电阻率并降低涡流损耗, 长期支撑着相关领域的进步. 然而, 硅钢在高频下的涡流损耗问题依然突出, 限制了其在部分高频应用中的性能表现^[3-5]. 另一方面, 铁氧体软磁材料虽然性能受频率影响较小, 能够有效抑制高频涡流损耗, 但其饱和磁通较低, 难以满足高功率密度设备的需求^[6]. 在这一背景下, 铁基非晶合金及其衍生纳米晶合金材料逐渐展现出显著优势. 铁基非晶合金因原子排列长程无序、短程有序, 无晶界、位错等缺陷, 且磁晶各向异性几近消失, 而表现出优异的磁性能^[7-10]. 因此, 它们在电力变压器、电机等电力传输与能量转换装置中逐步替代

传统硅钢, 推动相关器件向节能化、小型化、高效化及高稳定性的方向发展, 因而获得了日益广泛的应用^[11-14].

早期人们对铁磁性的理解是建立在晶体材料的基础上, 所以非晶合金由于原子结构的长程无序性曾被认为不具备宏观磁性. 但 Gubanov^[15] 在 1960 年的理论认为原子的短程有序性足以主导能带结构, 而铁磁性源于近邻原子的交换耦合作用. 该理论首次预言了铁基非晶合金具有铁磁性, 为后续探索非晶合金的磁性奠定了基础. 1967 年, Duwez 和 Lin^[4] 采用快速急冷技术, 制备出 $\text{Fe}_{80}\text{P}_{12.5}\text{C}_{7.5}$ 非晶合金条带. 其磁性测量结果 (磁化强度 $M_s = 0.68$ T, 矫顽力 $H_c = 240$ A/m) 首次在实验上证实了铁基非晶合金具有宏观磁性. 得益于铁基非晶独特的原子结构和优异的软磁性能, 不同组分的铁基非晶合金体系随后得到广泛探索^[16]. 以高 Fe 含量的铁-类金属非晶合金为例, 该体系材料表现出兼具高饱和磁化强度与低矫顽力的卓越软磁性能, 典型代表包括: $\text{Fe}_{70}\text{P}_{10}\text{B}_4\text{C}_4\text{Si}_3$ ($M_s = 1.53$ T, $H_c = 3.2$ A/m)^[17], $\text{Fe}_{80}\text{P}_{13}\text{C}_7$ ($M_s = 1.61$ T, $H_c = 3.2$ A/m)^[18]. 然而, 高 Fe 含量虽然能提升软磁性

[†] 通信作者. E-mail: maozhili@ruc.edu.cn

能, 但会降低合金的玻璃形成能力. 因此, 添加类金属元素 (如 B, Si, P) 对于平衡铁基非晶合金的软磁性能和玻璃形成能力具有关键作用^[19-21]. 另一方面, 通过添加金属元素来调控性能也是重要手段. 例如, 过渡金属如 Co, Ni 等被证明能够有效调控饱和磁化强度和矫顽力^[22]. 同时有研究报道, 在铁基非晶合金中添加 Cu 不仅能够显著提高玻璃形成能力, 还可以保持甚至增强其磁性能^[23,24]. 除了成分调控之外, 外部场 (如热场、磁场和超声场) 的引入也被证明是提升其软磁性能的有效途径^[25-30]. Yoshizawa 等^[31] 在 Fe-Si-B 合金中添加微量 Cu 和 Nb, 并通过晶化退火成功制备出一种具有优异软磁性能的非晶/纳米晶合金, 该合金以 FINEMET® 为商标实现商业化, 并推动了铁基非晶/纳米晶合金的研究热潮. 值得关注的是, 磁场退火作为一种有效调控手段已被广泛研究, 其能够诱导形成单轴磁各向异性, 从而优化铁基非晶/纳米晶合金的软磁性能, 以满足多样化的应用需求^[27-30]. 此外, 超声振动快速处理可高效激发非晶合金在原子尺度上的应力弛豫, 进而调控其能量状态^[17,32]. 该处理有助于形成高密度、强磁性的 Fe-M (Si, B) 团簇, 有效降低材料的磁各向异性, 最终获得卓越的软磁性能. 然而, 铁基非晶合金以及非晶/纳米晶合金的饱和磁感应强度普遍较低, 严重制约其实际应用. 过去几十年来, 研究人员一直致力于探索具有高饱和磁感应强度的新型铁基非晶合金及非晶/纳米晶合金, 但由于对其软磁性能的微观结构机理认识不清, 对铁基非晶的软磁性能的调控仍处于试错阶段. 本文旨在系统梳理铁基非晶合金微观结构与磁性能关联机制的研究现状, 并总结实验与计算研究所取得的最新进展, 为进一步深入系统地探索铁基非晶合金软磁性能的微观机理厘清研究思路.

2 实验方面的进展

研究和揭示磁微观结构与饱和磁化强度关联性的调控技术主要有两种途径: 一是调控化学成分, 包括元素种类及其比例; 二是施加热处理. 磁场热处理等其他外场处理手段虽然能够有效调控磁各向异性, 但会引入较强的非本征效应, 不在本文讨论范围. 本节将从成分调控和热处理对磁性能的影响两个方面, 综述近期与铁基非晶磁性结构起源相关的实验研究进展.

2.1 成分调控

获得高饱和磁化强度是铁基非晶软磁材料设计的核心目标之一. 由于铁原子本身具有较大的本征磁矩, 提高合金中的 Fe 含量被视为实现这一目标最直接的策略. 然而这一提升存在限度, 过高的 Fe 含量会导致室温 M_s 下降, 这一现象在多种铁基非晶合金体系中普遍存在^[33]. 为揭示这一现象的潜在机制, 近期有研究通过 X 射线衍射 (X-ray diffraction, XRD)、透射电子显微镜 (transmission electron microscopy, TEM)、磁性测量系统和差示扫描量热法 (differential scanning calorimetry, DSC) 等多种实验手段, 在宽温区 (5—350 K) 内探究了 Fe-B 二元非晶合金的原子磁矩、低温区磁化强度-温度行为、晶化方式与非晶堆垛形态之间的关联等, 发现其在 Fe 原子含量约为 82% 时发生非晶堆垛结构转变, 并伴随磁性能的非线性变化^[34]. 图 1(a) 清晰地揭示了合金微观结构随 Fe 含量增大的演化路径, 其在共晶成分附近发生了从“非晶 Fe_3B 基体+Fe 原子”到“非晶 Fe 基体+B 原子”的显著转变. 这一结构转变临界点与磁性能密切相关. 在富铁侧, Fe 含量越高, 居里温度 (T_c) 越低. 当 Fe 原子含量高于 82% 时, T_c 的衰减速率随 Fe 含量的增大而加快. 图 1(b) 中的自旋波参数 B 呈现出一致的变化规律, 即当非晶堆垛结构转变为以非晶铁为基础的结构时, 磁矩对温度的敏感性增大. 因此, 如图 1(c) 所示, 在高 Fe 原子含量区域 (>82%), 非晶样品在室温下的饱和磁化强度值出现明显下降. 此外, 居里温度在 Fe 原子含量约 75% 处出现峰值, 该成分点与亚稳态 Fe_3B 相高度接近, 如图 1(d) 所示, 这表明其短程有序结构继承了 Fe_3B 的晶体学特征, 这种结构遗传性被认为是非晶态形成的重要根源.

除了调整 Fe 原子含量这一基本手段外, 更为有效的成分设计策略在于引入多种合金化元素来协同优化综合性能. 为了同步改善铁基非晶合金的软磁性能、玻璃形成能力和热稳定性, 研究者们通常会通过添加磁性原子、过渡元素、类金属以及稀土元素来实现. 这些元素的引入通过改变局域原子环境、调制化学短程有序以及影响晶化行为, 实现对微观结构的精细调控, 进而深刻影响其磁性能. 下面将介绍近期相关工作中, 不同类别原子的引入对非晶合金结构与磁性能的影响规律.

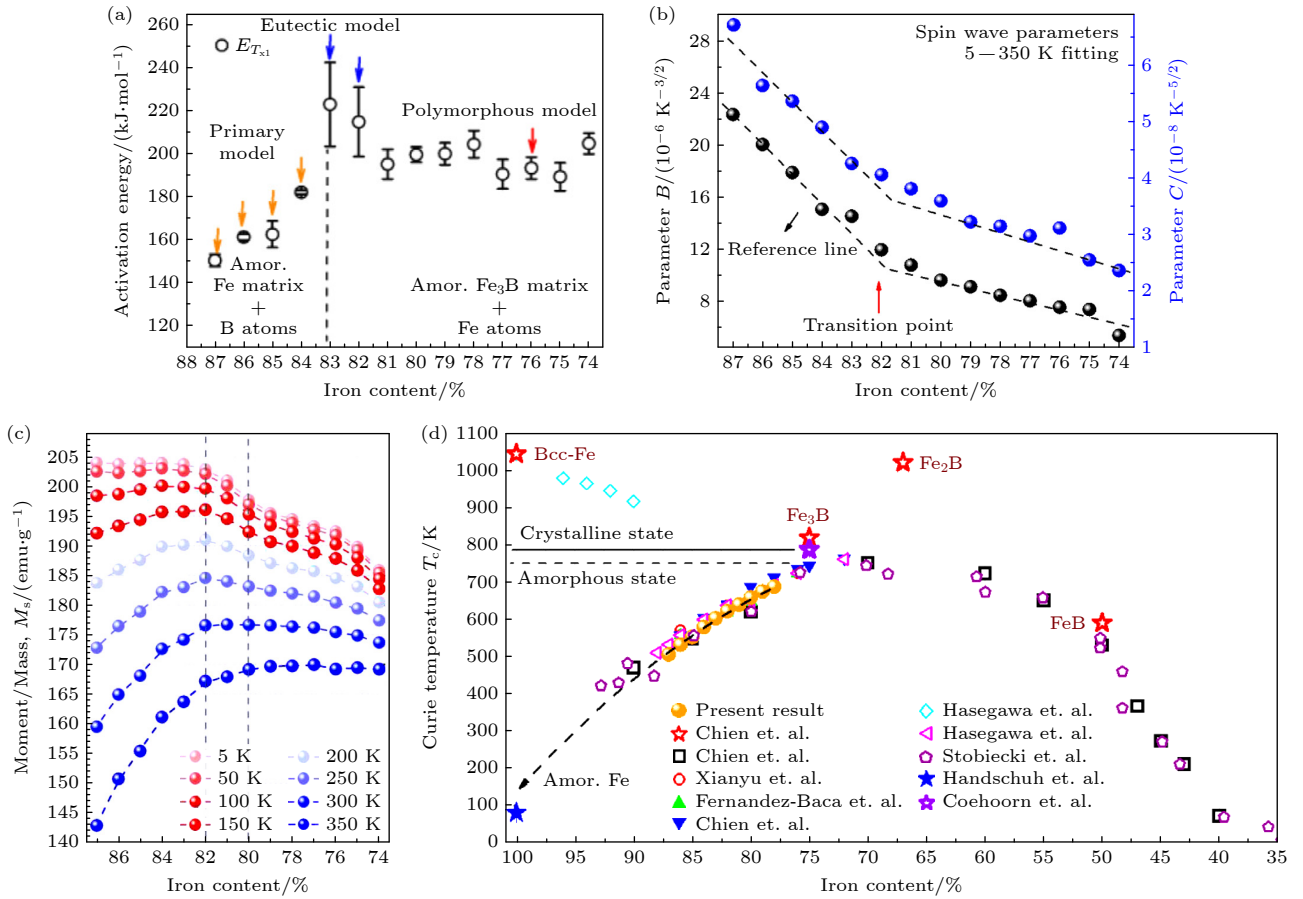


图 1 (a) 基于 Kissinger 方法计算 Fe-B 非晶合金首次结晶峰起始温度 (T_{x1}) 的激活能 (E_{x1}); (b) Fe-B 非晶合金中自旋波参数 B 与 C 随 Fe 含量的变化; (c) 饱和磁化强度 M_s 随 Fe 含量变化的规律; (d) 非晶 Fe_xB_{100-x} 带材、非晶薄膜以及亚稳态和稳定的结晶 Fe-B 化合物的居里温度 (T_c) 随 Fe 含量的变化行为^[34]

Fig. 1. (a) Activation energy (E_{x1}) of the onset temperature of the first crystallization peak (T_{x1}) based on the Kissinger method in Fe-B amorphous alloys; (b) evolution of the spin-wave parameters B and C with Fe content in Fe-B amorphous alloys; (c) dependence of the M_s on Fe content; (d) T_c of amorphous Fe_xB_{100-x} ribbons, amorphous films, and metastable and stable crystalline Fe-B compounds as a function of Fe content^[34].

2.1.1 Co, Ni 原子

Co 与 Ni 作为 Fe 在元素周期表中的邻近元素, 常被用于调控铁基非晶合金的软磁性能^[23]. 然而, 二者在宏观磁性能上表现出显著的差异性与复杂性: Co 的引入一方面可能通过形成 Fe-Co 原子对来提升体系的平均原子磁矩^[23,35], 另一方面又因其本征磁矩低于 Fe 而产生磁矩稀释效应^[23,36]; 而 Ni 的本征磁矩远低于 Fe, 其在多数情况下将导致饱和磁化强度的降低^[37]. 由于非晶合金结构具有长程无序而短程有序的特征, 其宏观磁响应的差异往往难以仅从合金元素本征磁矩的角度加以统一描述, 还可能涉及与局域原子结构相关的影响因素. Yang 等^[38] 采用小角 X 射线散射和原子力显微镜技术发现, 在 $Fe_{80-x}M_xSi_9B_{11}$ ($M = Co, Ni; x = 0, 2, 4$) 非晶合金中, Co 与 Ni 的微合金化对纳米

尺度结构非均匀性 (structural heterogeneity) 产生截然相反的调控作用: Ni 含量的增大显著增强了非晶合金的纳米级结构非均匀性; 而随着 Co 含量的增大, 该非均匀性逐渐减弱. 所有样品的结构非均匀性程度通过对散射曲线的 Guinier 定律分析以及对相位偏移数据的相关函数拟合定量表征. 结构非均匀性的这种演化通过力学行为的变化进一步得到了验证^[38]. 更重要的是, 室温穆斯堡尔谱和磁滞回线分析解释了磁性能与结构的内在联系. 平均超精细场 (B_{hfa})、饱和磁感应强度 (B_s) 增大, 第 2 条谱线相对于第 3 条谱线的强度比 (A_{23}) 以及矫顽力 (H_c) 被绘制为相关长度的函数, 如图 2 所示. 随着相关长度的减小, B_{hfa} 和 B_s 均呈现出增大的趋势, 这可以归因于铁磁交换相互作用的增强. Yang 等^[38] 采用流动单元模型对实验结果进行

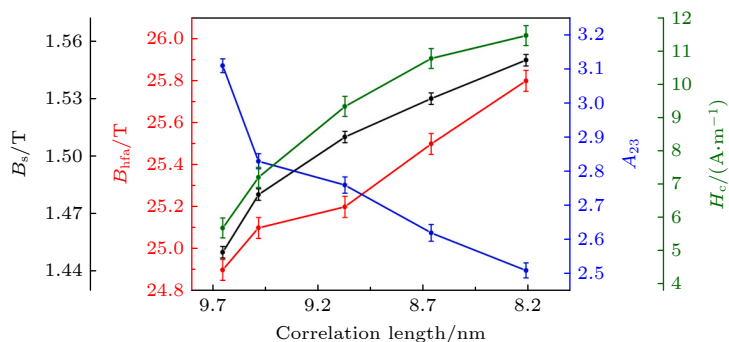


图 2 快淬 Fe-M-Si-B ($M = \text{Co}, \text{Ni}$) 非晶合金 B_s , B_{hfa} , A_{23} 和 H_c 随相关长度的变化^[38]

Fig. 2. The saturated magnetic flux density B_s , average hyperfine field B_{hfa} , intensity ratio A_{23} , and coercivity H_c as functions of the correlation length in melt-spun Fe-M-Si-B ($M = \text{Co}, \text{Ni}$) amorphous alloys^[38].

解释, 认为在成分变化引起相关长度减小的过程中, 非晶合金中具有较低堆积密度的流动单元逐渐湮灭并转变为致密堆积的弹性玻璃基体, 从而导致整体结构的致密化. 该结构致密化过程有利于增强局域铁磁交换相互作用, 提高饱和磁感应强度和平均超精细场. 与此同时, 随着结构演化, 磁矩取向逐渐偏离带材平面, 表现为 A_{23} 的降低, 并进一步导致磁各向异性和矫顽力的增大. 该工作揭示了纳米级结构非均匀性减弱与铁磁交换作用及磁各向异性的增强密切相关, 这为理解铁基非晶合金磁性能变化的结构起源提供了新的视角. 然而, 微观结构特征如何在原子尺度上调控磁交换作用和磁各向异性的具体物理机制仍有待进一步阐明.

从局域磁性的角度, 2024 年 Grey 等^[22] 通过磁学测量研究探究了用 Co 部分替代 Fe 对 $\text{Fe}_{78}\text{B}_{15}\text{Sn}_7$ 非晶合金微观结构, 特别是局部磁结构的影响. 穆斯堡尔谱学分析指出, 在 Fe-B-Sn 非晶合金中部分以 Co 取代 Fe 并不会显著改变 ^{57}Fe 的超精细相互作用, 但却明显影响了 ^{119}Sn 原子核周围的局域磁环境, 这说明 Co 的替代未显著改变 Fe 位置的化学短程序, 超精细场的微小变化可能源于拓扑短程序的微调, 而 Sn 原子感受到的局部磁场环境发生的剧烈变化可能是由于 Co 对 Sn 原子产生了强烈的转移场和极化效应, 显著改变了 Sn 周围的局部磁微结构. 外加磁场实验发现, 其磁矩倾向于偏离平面方向, 这意味着材料在纳米尺度上存在磁微观结构的不均匀性, 而这种不均匀性可能与局部原子团簇的排列有关^[22].

2.1.2 Cu 原子

已有研究指出, Cu 的加入能够调控 Fe-Fe 最近邻配位结构与原子间交换作用, 对 Fe 基非晶合

金的磁性能产生重要影响^[39,40]. 2016 年 Liu 等^[24] 通过系统的实验研究了 Cu 部分取代 Nb 对块体 $\text{Fe}_{72}\text{B}_{20}\text{Si}_4\text{Nb}_{4-x}\text{Cu}_x$ 合金磁性能的影响. 利用 XRD 验证了所有成分样品均呈现完全的非晶结构, 并通过 DSC、振动样品磁强计、 B - H 回线仪及阻抗分析仪分别表征了合金的热稳定性、饱和磁化强度、矫顽力及有效磁导率. 结果表明, 适量的 Cu 替代 Nb 能在维持合金优异非晶形成能力的同时, 显著提升饱和磁化强度和有效磁导率, 同时降低矫顽力. 这主要归因 Cu 原子半径较小, 取代 Nb 后缩短了 Fe-Fe 距离, 增强交换耦合作用, 从而提高合金总磁矩. 从微观结构方面, Liu 等^[24] 认为这种优异软磁性能也可以归因于材料具有高度的非晶化程度和结构均匀性, 内部没有晶粒和晶界, 以及磁畴壁钉扎点密度较低. 2023 年, Xu 等^[41] 利用 XRD、TEM、原子力显微镜技术、 B - H 回线测试及穆斯堡尔谱等多种实验手段, 对 $\text{Fe}_{84}\text{Zr}_6\text{B}_{10}$ 体系进行了系统的结构与性能分析, 发现 Cu 的加入减弱了材料的结构不均匀性. 具体表现为, 随着 Cu 含量的增大, 合金中的类液区域减小, 而类固区域增大, 磁交换增强, 饱和磁化强度升高, 矫顽力升高. 他们认为 Fe-Cu 原子对的正混合焓会增大准位错偶极子的密度, 准位错偶极子充当磁畴壁的钉扎点, 限制了磁畴壁的自由运动, 从而提高了矫顽力.

2.1.3 B, C, Si 原子

通常, 铁基非晶合金由原子含量为 75%—90% 的 Fe 和 10%—25% 的类金属元素组成, 并且必须引入 C, Si, B 和 P 中的一种或多种元素以维持其玻璃形成能力. 在这些类金属元素中, Si 的加入可显著提高 Fe-Si-B 非晶的居里温度, 从而改善其室温磁稳定性^[42]. Feng 等^[43] 的研究进一步表明, 随

随着 Si 含量的增大, 铁基非晶带材在室温下的饱和磁化强度升高, 同时矫顽力逐渐降低, 这一变化与其局部原子环境中最近邻配位结构的改变密切相关. 2023 年, Xu 等^[41] 研究表明, 在 $\text{Fe}_{84}\text{Zr}_6\text{B}_{10}$ 合金中 Si 的加入增大了合金体系的化学混合焓, 协同增强了结构非均匀性和 β 弛豫. 随着 Si 含量的增大, 局域液态区的增多削弱了原子间的相互作用, 并增大了类位错偶极子的数量, 从而导致饱和磁感应强度降低、矫顽力升高. 近年来, 非金属元素在高 Fe 原子含量 (83%—85%) 的合金体系的作用也受到了关注^[21]. 2021 年, Shi 等^[21] 系统探讨了 Fe 元素与非金属元素 (B, Si, P) 在 Fe 基非晶合金中的互补效应及其对磁性能的影响. 他们以多组 Fe- M ($M = \text{B}, \text{Si}, \text{P}$) 合金为研究对象, 通过调节 Fe 原子含量 (72%—83%) 与非金属组元的比例, 研究饱和磁化强度、矫顽力和有效磁导率的变化规律. 研究表明, 在富 Fe 成分范围内, 类金属元素对饱和磁感应强度的作用甚至显著强于 Fe 元素本身. 图 3(a)—(c) 中展示了不同类金属元素对 Fe_{83-85}

(B, C, Si)₁₄₋₁₆P₁ 合金 B_s 的作用. 综合 XRD, DSC 与磁性能测试的结果, Shi 等^[21] 指出 Fe 与非金属元素在合金中发挥了互补作用: 低 Fe 含量合金中 B_s 偏低主要源于磁矩不足, 而在高 Fe 含量合金中, B_s 则受限于磁交换作用减弱和居里温度下降. C 的掺入能够有效提升磁矩, 从而提高富 Fe 非晶合金的 B_s 下限 (图 3(d)); 而 Si 虽对磁矩不利, 但能增强磁交换作用和居里温度, 成为实现高 B_s 的关键. 由此可见, Fe, C 与 Si 在磁矩及磁交换作用上的本征效应具有高度一致性, 这也是富 Fe 铁基非晶合金中成分敏感性与互补效应的根源. 然而, 这些效应与微观结构的内在关联性仍不清楚.

2.1.4 Gd 原子

在铁基非晶合金中加入重稀土元素, 如钆 (Gd) 和镝 (Dy), 导致居里温度的降低. 虽然这一效应看似不利, 但实际上能够增大磁熵变和制冷能力, 从而使其成为低成本磁制冷材料的候选者^[44]. 更为重要的是, 稀土元素的引入对软磁性能同样表现出

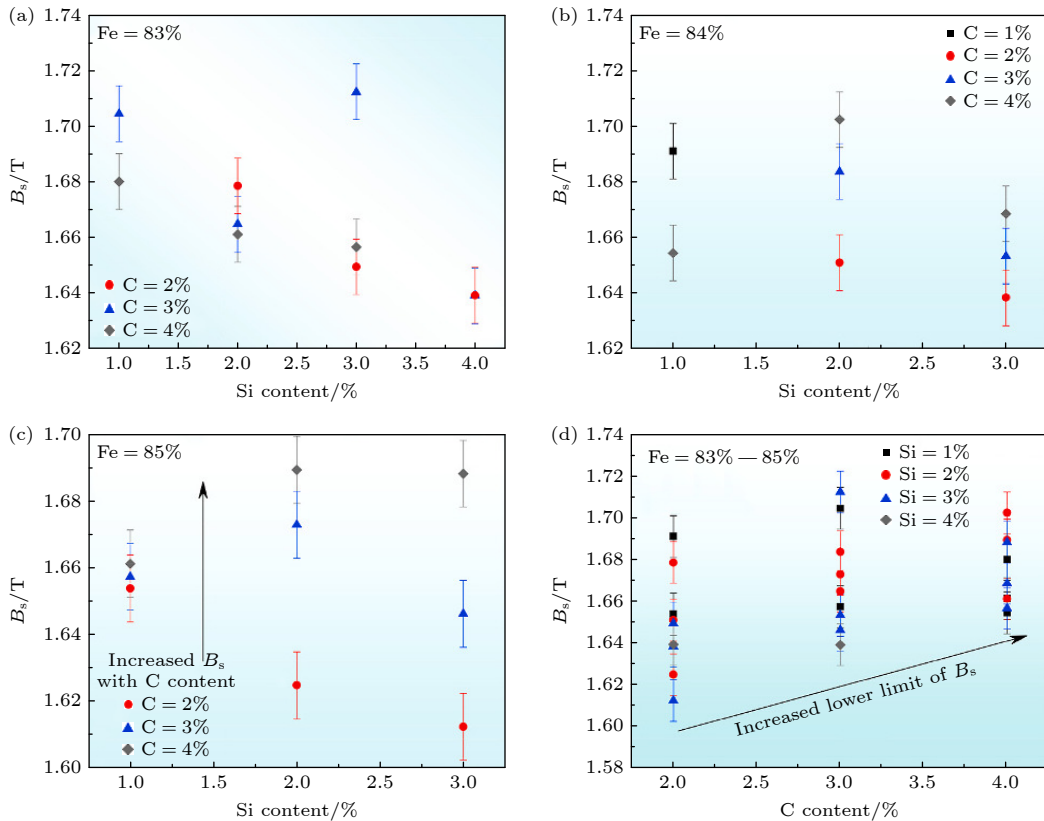


图 3 $\text{Fe}_{83-85}(\text{B}, \text{C}, \text{Si})_{14-16}\text{P}_1$ 非晶合金中 B_s 与类金属/Fe 原子含量的关系 (a) 83%; (b) 84%; (c) 85%. (d) C 含量对 $\text{Fe}_{83-85}(\text{B}, \text{C}, \text{Si})_{14-16}\text{P}_1$ 非晶合金 B_s 的整体影响^[21]

Fig. 3. Correlations between B_s and metalloids/Fe content in $\text{Fe}_{83-85}(\text{B}, \text{C}, \text{Si})_{14-16}\text{P}_1$ amorphous alloys: (a) 83% Fe content; (b) 84% Fe content; (c) 85% Fe content. (d) Overall effect of contents of C on the B_s of $\text{Fe}_{83-85}(\text{B}, \text{C}, \text{Si})_{14-16}\text{P}_1$ amorphous alloys^[21].

积极调控作用. 2024 年, Mi 等^[45]通过多种表征技术, 揭示了 Gd 元素在提升 Fe-B-Nb 非晶合金综合性能方面. 测量结果显示 Gd 的添加显著降低了饱和磁化强度, 矫顽力和剩磁降低, 软磁性能得到改善. 他们认为添加 Gd 可以有效抑制合金的局域各向异性, 降低类位错偶极子缺陷的密度, 并降低对磁畴壁运动的钉扎效应, 从而有效降低非晶合金的矫顽力、剩磁和磁滞损耗. 研究表明, 仅引入原子含量为 2% 的 Gd 即可使非晶合金的矫顽力降低 8%, 展现出稀土微合金化在设定特性磁性能方面的重要潜力.

2.2 热处理

热处理工艺是研究非晶合金结构-性能关系的基础方法之一, 可通过调控原子结构的有序程度实现性能优化. 根据温度区间和能量驱动形式的不同, 热处理可诱发从局部弛豫到中程有序化的多层次结构演化. 传统研究主要关注成分调控以及短程序 (short-range order, SRO) 尺度的演化. 短程序是指非晶物质在几个原子范围内呈现出与晶态近似的局域配位结构, 并包含配位数、键长、键角等局域结构信息, 可以看作非晶物质的结构单元. 然而, 短程序尺度所反映的主要是局域磁性的变化, 仍不足以全面揭示非晶体系中磁性能的整体演化机制. 在更大的结构层级上, 非晶材料中存在由短程序以特定方式堆积而形成的中程序结构 (medium-range order, MRO). 中程序被视为连接短程序与整体长程无序之间的关键结构层次. 最新研究表明, 中程序的演化在铁基非晶合金的磁性调控中同样起着重要作用.

铁基非晶合金在过冷液体区的中程序结构重排行为近年来受到广泛关注^[46,47], 其研究对于理解非晶体系的中程序与磁性能耦合机制具有重要意义. 2020 年, Zhu 等^[47]通过原位同步辐射衍射及磁力显微镜等实验手段, 研究了 $(\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5})_{72}\text{Si}_4\text{B}_{20}\text{Nb}_4$ 和 $(\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5})_{76}\text{Si}_4\text{B}_{16}\text{Nb}_4$ 合金在加热过程中的结构与磁性能演化. 通过原位同步辐射衍射研究发现, $(\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5})_{76}\text{Si}_4\text{B}_{16}\text{Nb}_4$ 的衍射强度随温度升高持续增大, 其趋势与其他已报道的非晶合金类似. 然而, Zhu 等^[47]研究发现, 该非晶合金在起始晶化温度以下的过冷液体区内出现明显的中程结构重排, 表现为衍射强度的异常平台, 而短程序结构保持稳定. 在这一结构重排过程中, 局部应力场的产

生诱导了磁各向异性的产生, 导致矫顽力的显著增大. 通过磁力显微镜图像进一步佐证, 在发生异常结构变化的温度下退火样品后, 磁性相衬度增强. Zhu 等推测 $(\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5})_{72}\text{Si}_4\text{B}_{20}\text{Nb}_4$ 合金在过冷液相区可能存在一个液-液相变或另一个隐藏的非晶相形成. 2024 年, Ge 等^[48]利用原位同步辐射高能 X 射线衍射和小角中子散射技术, 研究了 Fe-Dy-B-Nb 块体非晶合金体系中原子结构与磁性纳米结构域的演化, 并探讨了其与液-液相变的关系. 通过 DSC 分析, $(\text{Fe}_{0.71}\text{Dy}_{0.05}\text{B}_{0.24})_{96}\text{Nb}_4$ 非晶合金在过冷液区表现出一个位于约 914 K 的异常放热峰, 并将该温度确定为液-液相变温度. 原位同步辐射高能 X 射线衍射结果显示, 在该异常放热峰温度附近有局部有序区域的形成, 这一转变对应于中程序结构的形成, 其特征为原子团簇的连接方式由面共享向边共享转变, 并与磁结构和磁性能的演化紧密相关, 如图 4 所示. 进一步地, 具有拓扑有序的纳米畴 (magnetic nanodomains) 被发现与液-液相变协同出现, 并在小角中子散射图谱中表现为六方对称的散射图案. 液-液相变可以诱导纳米结构域更具局部有序性, 从而由于 Fe-Fe 键长缩短与结构有序度增强而产生更强的交换相互作用, 这导致饱和磁化强度的提高. 由此可见, 液-液相变并非仅改变热稳定性, 还能调控中程结构的有序度, 影响磁畴的变化. 液-液相变不仅是发生在过冷液区的一种热效应, 更体现为原子层次的结构重排过程. 其提供了一种在非晶态条件下实现结构-磁性能调控的有效途径.

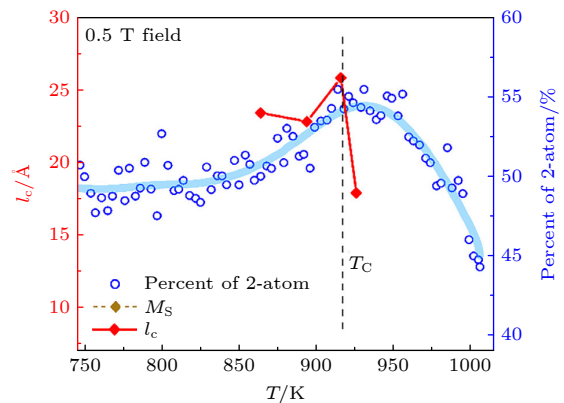


图 4 $(\text{Fe}_{0.71}\text{Dy}_{0.05}\text{B}_{0.24})_{96}\text{Nb}_4$ 合金在加热过程中, 两原子团簇连接性、饱和磁化强度和磁相关长度 l_c 随温度变化的演化^[48]
Fig. 4. Evolution of 2-atom cluster connectivity, saturation magnetization and magnetic correlation length l_c as a function of temperature upon heating $(\text{Fe}_{0.71}\text{Dy}_{0.05}\text{B}_{0.24})_{96}\text{Nb}_4$ alloy^[48].

研究还发现,不同温度下团簇的连接方式(如顶点共享、棱共享、面共享)的变化对饱和磁化强度也有着显著影响^[49,50].2019年,Bai等^[50]在Fe-B二元非晶纳米颗粒中提出了“团簇连接-磁性能”关系,发现两原子共享与四原子共享是主要连接模式.为此,研究者引入偏差度 δ_i ,用于定量表征团簇连接方式相对于这两种标准模式的偏离程度 δ_i :

$$\delta_1 = \frac{r_{p1}/r_1 - 1.57}{1.57} \times 100\%, \quad (1)$$

$$\delta_2 = \frac{r_{p1}/r_1 - 1.90}{1.90} \times 100\%, \quad (2)$$

其中, r_{p1} , r_{p2} 和 r_1 为高斯分解参数.1.57被认为是Fe基非晶合金中团簇四原子共享连接的标准值,而1.90则对应于双原子共享连接.当 δ_i 偏离这些标准值超过3% ($|\delta_i| > 3\%$)时,饱和磁感应强度(B_s)会显著降低(见图5(a)).这表明 δ_i 与磁性能密切相关,且在不同退火温度下 δ_i 的变化正是导致 B_s 差异的主要原因.通过偏离度参数 δ_i 定量刻画了连接畸变与饱和磁感应强度的对应关系.该工作揭示了结构偏离对磁性能的抑制效应.随后,Bai等^[49]以Fe₇₈Si₉B₁₃非晶带材为研究对象,系统探讨了原子团簇连接方式对软磁性能的影响机理.研究通过DSC、XRD及反蒙特卡罗模拟等多种手段,对不同退火温度下样品的结构演化进行精细表征.研究

结果显示,Si的引入使得第二配位壳层的B-B配位被部分Si-B配位所取代.随退火温度升高,Fe-B配位数增加,表明Fe与B之间的相互作用得到强化.通过对分布函数 $g(r)$ 第2峰的高斯分解,作者揭示了主要的团簇连接方式为三原子共享与单原子共享结构,并发现三原子共享连接的增强与饱和磁感应强度的提升密切相关(见图5(b),(c)).这种结构有序化导致Fe—Fe键长缩短、交换作用增强,从而实现了磁性能的改善.该工作从微观结构层面揭示了Fe基非晶合金磁性的结构起源,提出了“团簇连接模式-磁性能协同效应”的新思路,为非晶合金磁性的结构调控提供了重要启示.

原子结构在短程序和中程序层面的演化共同决定了适当退火温度下的软磁性^[51].Tong等^[51]通过对Fe₇₆Si₉B₁₀P₅非晶带材的系统退火实验,结合同步辐射X射线散射、高分辨透射电镜以及第一性原理分子动力学模拟,揭示了Fe基非晶合金磁软化行为的微观结构起源.研究发现,退火温度的调控不仅影响Fe-类金属团簇的配位密度与化学环境,还会诱导中程有序中团簇间的连接与均匀化演化,从而实现磁性能的优化.当退火温度接近玻璃转变温度时(约0.96 T_g),体系内部形成分离但密集配位的Fe-类金属团簇,使局域铁磁交换作用增强;同时,而在中程尺度上,强、弱铁磁区域趋于均

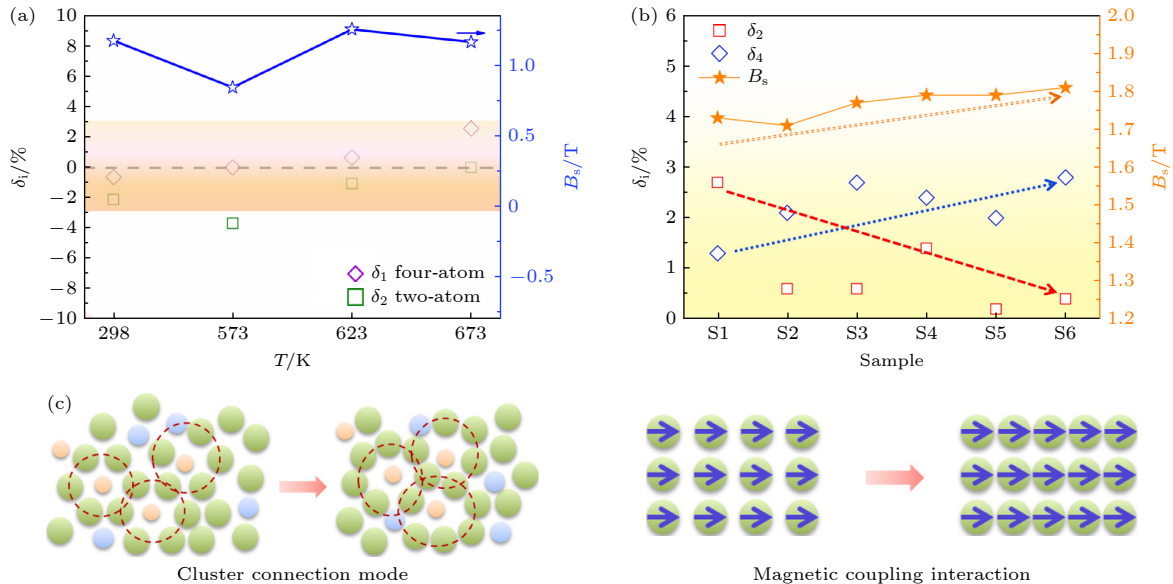


图5 (a) Fe-B非晶纳米颗粒在室温(298 K)和不同退火温度下饱和磁感应强度 B_s 和偏差度 δ_i 的变化趋势^[50]; (b) 簇连接与 M_s 变化趋势; (c) 簇连接模式和磁耦合相互作用的示意图^[49]

Fig. 5. (a) Variation trends of saturation flux density B_s and deviation degree δ_i of Fe-B amorphous nanoparticles at room temperature (298 K) and different annealing temperature^[50]; (b) variation trend of the cluster connections and the M_s ; (c) the schematic diagram of the cluster connection mode and the magnetic coupling interaction^[49].

匀耦合,显著削弱了磁交换的不均匀性与磁各向异性,从而实现了矫顽力的大幅降低(由约 25 A/m 降至 2 A/m). 该工作进一步提出“三类非晶态结构模型 (Glass I—III)”,演化示意如图 6 所示:低温下的“Glass I”主要通过团簇自适应收缩与膨胀实现部分弛豫;中间态“Glass II”表现为中程有序结构的调制;而高温退火形成的“Glass III”则在短程序与中程序层面实现协同均匀化,产生“均匀强-弱铁磁耦合区”,对应最佳磁软化状态. 该研究在微观层面建立了非晶态原子结构演化与磁性能之间的定量关联,提出了通过协同调控短程序与中程序结构实现磁软化的新机制,为热处理下非晶合金磁性性能优化提供了理论依据和实验范式.

另一方面, Lin 等^[52]针对 Fe 基非晶合金在亚玻璃化转变温度下的结构弛豫过程提出了一个多尺度结构协同演化的新框架,将原子尺度的局域几何变化与纳米尺度的空间异质性联系起来. 他们综合利用同步辐射 X 射线衍射、反蒙特卡罗模拟及原子力显微成像等多尺度实验手段,系统研究了退火弛豫过程中的结构演化特征. 研究表明,随着弛豫的进行,非晶合金原子尺度的局部结构趋于有

序,具有较高局域五重对称性的团簇比例显著增大,团簇连接方式由顶点或棱连接向面连接转变,从而降低原子尺度的结构非均匀性;与此同时,纳米尺度的“类液区”数量减少、形状由不规则椭圆趋向圆形,反映出自由体积分布的均匀化. Lin 等^[52]进一步提出了基于渗流理论的多尺度协同演化模型,当原子层面的具有较高局域五重对称性的团簇达到渗流阈值后,纳米尺度的液态区会向固态区转化,形成更均匀、致密的结构网络. 这种结构均质化削弱了应力诱导的磁各向异性,使磁畴壁运动更加顺畅,从而产生宏观的磁软化效应. 该研究从结构非均匀性的多尺度耦合视角揭示了 Fe 基非晶合金磁性演化的微观机制,为理解非晶合金中结构性性能关系提供了新的理论框架. 然而,该研究对渗流过程的阈值及其几何参数未做定量建模,主要将渗流概念作为解释不同尺度结构演化的物理框架.

3 计算模拟方面的进展

尽管实验方法在推动理解铁基非晶合金的磁性结构机理方面取得了重要进展,但在阐明非晶材

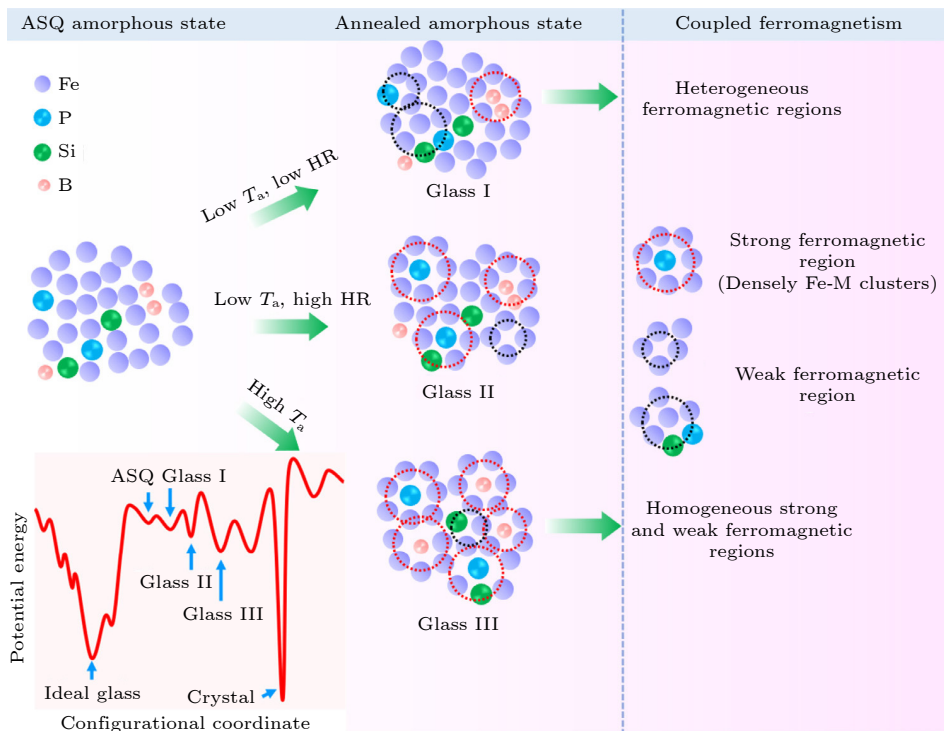


图 6 Fe₇₀Si₉B₁₀P₅ 合金在不同等温退火过程中原子演化的示意图,玻璃 I, II, III 代表在不同退火条件下退火过程中演化出的 3 种非晶态,图中的势能超平面示意了不同玻璃类型的变化趋势^[51]

Fig. 6. Schematic diagram illustrating the atomic evolution of Fe₇₀Si₉B₁₀P₅ alloy during different isothermal annealing processes, Glass I, II, and III represent three amorphous states evolved under different annealing conditions, the potential energy hypersurface in the figure shows the variation trends of the different glass types^[51].

料特有的复杂原子结构与软磁性能的内在关联机理时仍面临挑战. 此外, 不同的样品制备工艺和测试方法的差异, 可能导致不同研究团队之间的实验数据存在不一致性^[53]. 随着对铁基非晶合金材料研究的不断深入, 计算模拟为探索非晶材料的微观结构和磁性能提供了一种更加全面且灵活的手段. 将计算模拟与实验研究相结合, 能够对其潜在的磁性机理形成更为全面和深入的理解. 本节将着重介绍计算模拟研究在揭示铁基非晶合金磁性结构与结构关联方面的研究进展.

最初, 计算研究主要集中在较为简单的 Fe-B 体系, 对该体系的研究为理解磁性的基本微观机制提供了重要见解^[54-57]. 相关计算结果发现, 费米能级附近的电子态主要由 Fe 原子的 3d 带与 B 原子的 2p 带之间的强杂化所主导. 随着 B 原子含量的增大, 磁矩的下降可归因于稀释效应, 即 Fe-Fe 间的强 d-d 交换逐渐被磁性较弱的 Fe-B 间 p-d 相互作用替代, 削弱了 Fe-3d 自旋极化, 导致磁矩下降. 同时, 对晶态 FeB, Fe₂B 和 Fe₃B 的计算结果显示, 其电子态特征与非晶态相似^[58], 说明晶态与非晶态 Fe-B 体系在电子结构层面存在一定的一致性. Tian 等^[59]通过第一性原理分子动力学 (*ab initio* molecular dynamics, AIMD) 对 Fe_{100-x}B_x 非晶合金的局域原子结构、电子结构和磁性进行了探索. B 原子的局域环境主要由类三帽三角棱柱 (tricapped trigonal prisms, TTP) 多面体构成, 而 Fe 原子的局域多面体则与二十面体、类体心立方结构单元以及 Frank-Kasper 多面体相关, 这取决于 Fe-B 合金的组成, 如图 7(a), (b) 所示. 晶态 Fe₃B 化合物的基本单元是以 B 原子为中心的 TTP 多面体, 而在非晶 Fe₇₅B₂₅ 合金中同样存在大量以 B 原子为中心的类 TTP 多面体^[59], 揭示了非晶态和晶态 Fe-B 合金中局域结构的相似性. 计算得到的磁矩随成分变化并不呈线性关系: 在较低 B 含量区域, 随着 Fe 含量的增加, 磁矩的减小源于铁磁与反铁磁交换作用之间的竞争; 而在较高 B 含量区域, 磁性减弱则可归因于稀释效应. 值得注意的是, Fe-B 体系的磁性本质上由 Fe-3d 态主导, 非金属元素主要通过 p-d 杂化对 Fe-3d 自旋极化产生间接影响, 这一图像同样也在 Fe-P-B 中观察到^[60]. Zhu 等^[60]利用 AIMD 模拟得出, Fe₈₀P₉B₁₁ 非晶合金的磁化主要来源于 Fe 的 3d 态, 而类金属元素 P 和 B 仅有微弱贡献. 部分态密度分析进一步表明,

P, B 的 p 态与 Fe-3d 态存在杂化, P, B 原子上出现幅度较小且与 Fe 相反的负磁矩, 如图 7(c) 所示. 进一步结果还显示, 在该体系中 Fe 的磁矩与其电荷量近似呈线性变化, 如图 7(d) 所示. 由此可见, 局域电荷转移和 p-d 杂化在调控 Fe-3d 自旋极化及宏观磁性中起着关键作用. 然而, 局域团簇及团簇连接如何影响磁矩仍不清楚.

非磁性元素, 如 B, P, Si 等可以通过与 Fe 的成键和 p-d 杂化发生电荷转移, 从而调节局域磁矩; 同时它们还可以改变局域配位结构和 Fe-Fe 间距, 进而影响铁磁交换作用和宏观磁化强度^[61]. 早期的模拟研究表明, 在 Fe₇₆Si₉B₁₀P₅ 非晶合金中, Si 对磁化贡献较小, 而 B 和 P 通过吸收 Fe 原子电子来增强 Fe 的磁矩^[62]. 因此, 用 B 或 P 替代 Si, 并保持 Fe 含量不变, 有望提升合金的饱和磁感应强度. AIMD 结果显示^[63], 用 B 完全取代 Si 后, Fe₇₆B₁₉P₅ 非晶合金的饱和磁感应强度为 1.71 T, 比原始合金高 8%. 这一增强主要归因于 B 含量增大引起的电荷转移增强, 从而提高了铁原子的磁矩和整体的磁性表现. 若将 B 或 P 替换为电负性更强的元素, 磁化强度有可能得到进一步提升. 事实上, 进一步的研究表明, B 元素在铁基非晶合金中不仅通过电荷转移直接调节 Fe 的局域磁矩, 还通过结构效应影响 Fe-Fe 相互作用. 例如, Lu^[61]通过第一性原理分子动力学模拟探讨了少量 B 元素的添加对 Fe₈₀P_{12-x}C₈B_x ($x = 0, 1, 2, 3, 4$) 非晶合金的几何结构、电子结构和磁性特性的影响. 尽管 B 原子的平均电荷分布变化不大, 但其分布范围随含量增大总体呈扩大趋势 (见表 1). 进一步分析表明, 类金属元素 P, C 和 B 共同参与了吸收 Fe 原子失去的电子, 显示出明显的电子转移现象. 值得注意的是, B 的加入并未显著改变 Fe 原子周围局域原子团簇的分布, 但使 Fe 原子磁矩分布更加集中 (见图 8(a)), 较大磁矩的铁原子数量增多, 增加了 Fe 原子之间的聚集 (见图 8(b)), 使得 Fe 原子间的相互作用得到了增强. 这一结构变化可归因于 B 原子较小的原子半径, 使其能够扩散到原子之间的空隙中, 从而提高了 Fe 基非晶合金的密度. 密度的提升和 Fe 原子间聚集效应的增强共同作用, 最终导致了非晶合金饱和磁化强度的显著增大.

铁基非晶合金的铁磁性不仅与 Fe 原子的电子结构有关, 也受 Fe 原子周围的环境影响. 研究发现, 在 Fe-P-C-B 非晶合金中加入少量适当的 Si 会

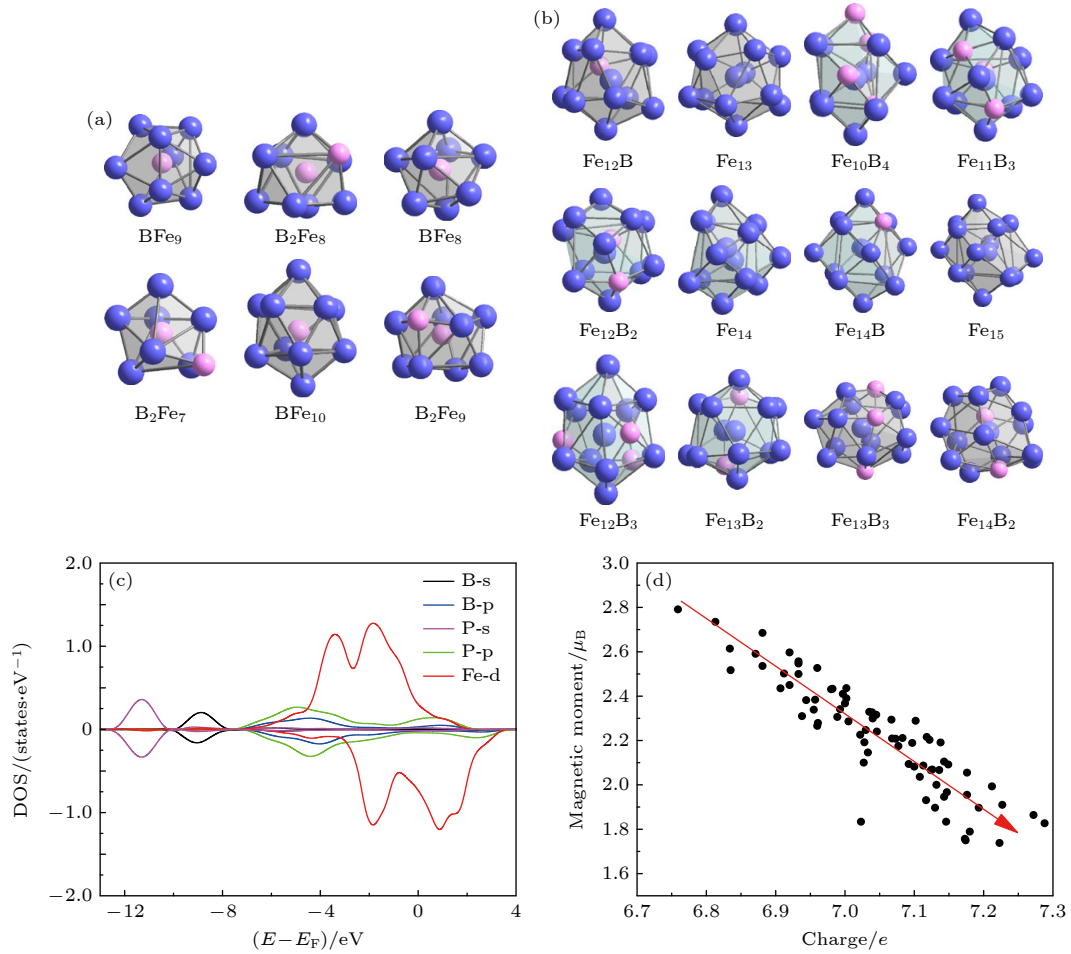


图 7 非晶 $\text{Fe}_{100-x}\text{B}_x$ 中代表性原子结构 B 中心团簇 (a) 和 Fe 中心团簇 (b), 较大的蓝色球表示 Fe 原子, 较小的粉红色球表示 B 原子^[59]; (c) $\text{Fe}_{80}\text{P}_9\text{B}_{11}$ 非晶合金中 Fe, P 和 B 原子的分态密度^[60]; (d) Fe 原子的磁矩随电荷量的变化关系^[60]

Fig. 7. Atomic structures of representative B-centered clusters (a) and Fe-centered clusters (b) extracted from amorphous $\text{Fe}_{100-x}\text{B}_x$ alloys, larger blue spheres represent Fe atoms, and smaller pink spheres represent B atoms^[59]; (c) partial density of states of Fe, P, and B atoms in the $\text{Fe}_{80}\text{P}_9\text{B}_{11}$ amorphous alloy^[60]; (d) relationship between the Fe magnetic moment and the corresponding charge quantity^[60].

表 1 $\text{Fe}_{80}\text{P}_{12-x}\text{C}_8\text{B}_x$ ($x = 0, 1, 2, 3, 4$) 非晶合金的电荷分布^[61]
Table 1. Charge distribution of $\text{Fe}_{80}\text{P}_{12-x}\text{C}_8\text{B}_x$ ($x = 0, 1, 2, 3, 4$) amorphous alloys^[61].

		Fe	P	C	B
B ₀	Average	7.80	5.64	5.02	
	Distribution	7.49—8.09	5.55—5.72	4.94—5.05	
	Range	0.60	0.17	0.11	
B ₁	Average	7.80	5.65	5.02	3.50
	Distribution	7.51—8.05	5.57—5.75	4.96—5.08	3.48—3.52
	Range	0.54	0.18	0.12	0.04
B ₂	Average	7.80	5.64	5.03	3.50
	Distribution	7.57—8.10	5.53—5.72	4.98—5.08	4.45—3.57
	Range	0.53	0.19	0.10	0.12
B ₃	Average	7.81	5.63	5.08	3.42
	Distribution	7.58—8.09	5.48—5.70	4.98—5.37	2.89—3.59
	Range	0.51	0.22	0.39	0.70
B ₄	Average	7.81	5.64	5.05	3.46
	Distribution	7.50—8.08	5.54—5.72	4.99—5.18	3.16—3.61
	Range	0.58	0.18	0.19	0.45

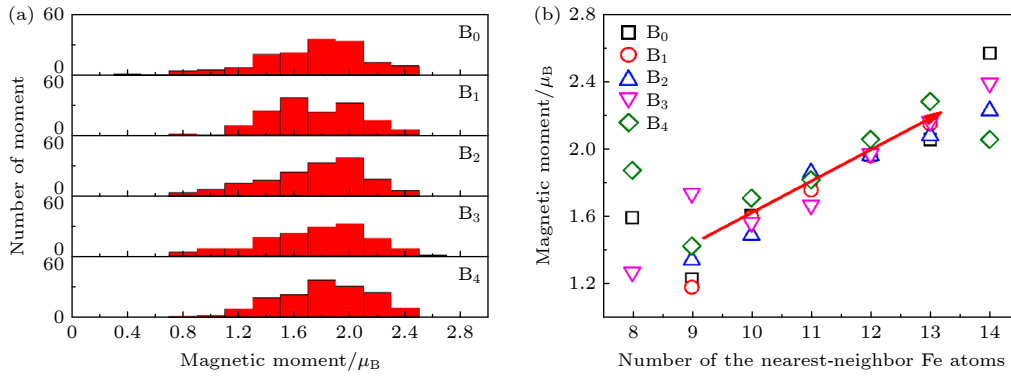


图 8 (a) $\text{Fe}_{80}\text{P}_{12-x}\text{C}_8\text{B}_x$ ($x = 0, 1, 2, 3, 4$) 非晶合金中 Fe 原子的磁矩分布; (b) $\text{Fe}_{80}\text{P}_{12-x}\text{C}_8\text{B}_x$ ($x = 0, 1, 2, 3, 4$) 非晶合金中 Fe 原子最近邻数目与 Fe 原子磁矩之间的关系^[61]

Fig. 8. (a) Magnetic moment distribution of Fe atoms in $\text{Fe}_{80}\text{P}_{12-x}\text{C}_8\text{B}_x$ ($x = 0, 1, 2, 3, 4$); (b) relationship between number in the nearest-neighbor of Fe atoms and magnetic moment of Fe atoms in $\text{Fe}_{80}\text{P}_{12-x}\text{C}_8\text{B}_x$ ($x = 0, 1, 2, 3, 4$) amorphous alloys^[61].

影响原子磁矩和 Fe 原子周围的环境, 有效提高居里温度和饱和磁化强度^[64]. AIMD 模拟结果表明, 与未添加 Si 相比, $\text{Fe}_{85}\text{P}_9\text{C}_2\text{B}_2\text{Si}_2$ 中 Fe, B 和 C 原子的磁矩增大, 而 P 原子的磁矩有轻微减小. 合金的原子磁矩增大的部分超过了减小的部分, 这解释了 Si 元素引起的总磁矩的增大. 此外, Fe 原子周围的环境也发生了变化. 随着加入 Si, 具有高配位数 (12, 13, 14) 的最近邻 Fe 原子的含量增大, 而低配位数 (10, 11) 的含量减小. 根据 Fe 磁矩随配位数变化的关系, 随着以 Fe 为中心的团簇的配位数增大, 原子磁矩也随之增大. 因此可推断, 高配位数所占比例的提高意味着参与铁磁耦合的最近邻 Fe 原子更多, 这可能是饱和磁化强度增加的原因. 类似地, Wang 等^[65] 通过 AIMD 研究了 $\text{Fe}_{80}\text{P}_{11}\text{C}_9$ 非晶合金中具有最大或最小磁矩的 Fe 原子所处的局域原子团簇环境. 结果表明, Fe 原子的磁矩受到其对应局域原子团簇类型的显著影响. 例如, $\text{Fe}_{17}\langle 0, 2, 8, 4 \rangle$ 多面体的中心 Fe 原子磁矩最大, 达到 $2.71\mu_{\text{B}}$; 而在 $\text{Fe}_{10}\text{P}_4\langle 0, 0, 12, 0 \rangle$ 多面体中, 中心 Fe 原子的磁矩最小, 仅为 $0.70\mu_{\text{B}}$. 相比之下, 原子团簇 $\text{Fe}_{12}\text{P}_2\langle 0, 1, 10, 2 \rangle$ 的中心 Fe 原子的平均磁矩为 $2.09\mu_{\text{B}}$, 与所有 Fe 原子的平均磁矩非常接近. 因此, Wang 等^[65] 提出可以通过调节团簇的组分来提高 Fe 基非晶合金的整体磁化强度.

在以 Fe 原子为中心分析其局域环境与磁矩关联的基础上, 进一步的研究表明, 溶质-溶质回避效应同样是影响 Fe 基非晶合金磁性的重要结构因素. Jiang 等^[66] 结合 AIMD 计算与实验测量, 系统探讨了 $\text{Fe}_{80+x}\text{Si}_{5-x}\text{B}_{15}$ ($x = 0-4$) 非晶合金的原子结构、玻璃形成能力及软磁性能之间的关联. AIMD

模拟结果表明, $\text{Fe}_{82}\text{Si}_3\text{B}_{15}$ 合金表现出最强的溶质-溶质回避效应, 最长的 Fe—Fe 键, 较高的 Fe—Fe 对的部分配位数 (见表 2), 以及在所有研究合金中更稳定的原子团簇. 溶质-溶质回避效应指溶质原子 (如 Si, B) 之间强烈的互相回避倾向, 这导致了它们高度分散在 Fe 溶剂中, 从而使得非晶结构非常稳定. 这些局部结构特征对其优异的磁性能至关重要, 包括高的饱和磁感应强度 ($B_s = 1.69 \text{ T}$) 和低的矫顽力 ($H_c = 6.5 \text{ A/m}$). 研究表明, 溶质间的回避可增强结构均匀性并维持非晶态, 同时促进 Fe-Fe 配位, 从而在 $\text{Fe}_{82}\text{Si}_3\text{B}_{15}$ 成分上实现饱和磁化强度与玻璃形成能力的最佳平衡. $\text{Fe}_{82}\text{Si}_3\text{B}_{15}$ 合金在饱和磁化强度和玻璃形成能力之间实现了最佳平衡, 这一预测也得到了实验结果的验证^[66].

表 2 $\text{Fe}_{80+x}\text{Si}_{5-x}\text{B}_{15}$ ($x = 0-4$) 合金中以 Fe 为中心的总配位数和部分配位数^[66]

Table 2. Fe-centered total and partial coordination numbers in the $\text{Fe}_{80+x}\text{Si}_{5-x}\text{B}_{15}$ ($x = 0-4$) alloys^[66].

Alloys	Fe-Fe	Fe-Si	Fe-B	Total CN
$\text{Fe}_{80}\text{Si}_5\text{B}_{15}$	12.10	0.81	1.68	14.59
$\text{Fe}_{81}\text{Si}_4\text{B}_{15}$	12.32	0.65	1.70	14.67
$\text{Fe}_{82}\text{Si}_3\text{B}_{15}$	12.45	0.45	1.80	14.70
$\text{Fe}_{83}\text{Si}_2\text{B}_{15}$	12.40	0.32	1.82	14.55
$\text{Fe}_{84}\text{Si}_1\text{B}_{15}$	12.80	0.14	1.70	14.64

在 Fe 基非晶合金的研究中, 锗 (Ge) 作为一种与 C 和 Si 同族的类金属元素, 其对合金磁性性能的影响也受到了广泛关注^[67,68]. 与磷 (P) 相比, Ge 具有更低价电子. 通常, 类金属元素的价电子数增大会导致铁基非晶合金饱和磁化强度的降低^[69]. 然而, 已有研究表明, Ge 能够提高居里温度, 从而改善高

温下的磁性表现 [68,70,71]. 为探究 Ge 掺杂对 Fe-P-C 非晶体系磁性的影响, 2024 年 Park 等 [67] 结合 AIMD 模拟与实验, 研究了 Ge 掺杂对 Fe-P-C 非晶合金结构与磁性能的影响, 揭示了电子结构变化与磁性能提升之间的关系. 实验结果显示在 Ge 原子含量小于 4% 时, 合金为非晶态, 而在 Ge 原子含量超过 5% 时, 合金出现晶化趋势. 通过振动样品磁强计与高温振动样品磁强计实验测得, 随着 Ge 浓度的增大, 300 K 下的饱和磁极化强度 ($\mu_0 M_S$) 从 1.46 T ($x = 0$) 增至 1.63 T ($x = 4$), 且居里温度也随之升高 (见图 9). 计算结果显示, 随 Ge 含量增大, 多数自旋态增强、少数自旋态减弱, 自旋分裂加大, 说明 Fe-Fe 交换作用显著增强. 平均 Fe-Fe 键长随 Ge 含量略有增大, 而 Ge 的加入减少了体系中的 sp 电子数, 对总磁矩产生一定负贡献, 但总体磁矩仍随 Ge 含量升高而增大. Fe 的平均磁矩和总磁矩的增长趋势与实验中 $\mu_0 M_S$ 和居里温度升高的结果类似, 表明适量 Ge 掺杂可提高合金的整体磁性能. 由此可见, 适量 Ge 掺杂可以通过电子结构调控影响 Fe-Fe 交换作用改善磁性能, 但过量 Ge 会诱发晶化, 降低结构稳定性并不利于软磁性能.

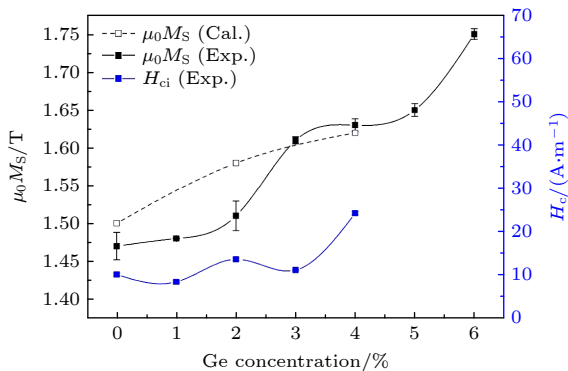


图 9 $\text{Fe}_{80}\text{P}_{13-x}\text{C}_7\text{Ge}_x$ ($x = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6$) 快淬样品在 300 K 下 $\mu_0 M_S$ 与 H_c 随 Ge 含量的变化关系 [67]
 Fig. 9. Ge concentration dependence of $\mu_0 M_S$ and H_c at 300 K for as-quenched $\text{Fe}_{80}\text{P}_{13-x}\text{C}_7\text{Ge}_x$ ($x = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6$) [67].

过渡金属如 Fe, Co, Ni 等由于其未填充的 d 电子壳层, 能够产生局部磁矩, 并通过直接参与磁相互作用影响合金的磁性. 与通过间接方式影响磁矩的非磁性元素不同, 过渡金属原子对磁性的贡献更加直接. 近期, Chen 等 [72] 通过第一性原理计算, 系统地研究了 $\text{Fe}_{82}\text{Si}_4\text{B}_{10}\text{P}_4$ 非晶合金中原子含量为 5% Fe 原子被不同过渡金属 ($X = \text{V}, \text{Cr}, \text{Mn}, \text{Co}, \text{Ni}$) 替代的结构、电子和磁性特性. 研究结果表明, X 原子的加入会导致 $\text{Fe}_{82}\text{Si}_4\text{B}_{10}\text{P}_4$ 非晶合金的

饱和磁感应强度降低. 具体来说, V, Cr 和 Mn 原子由于与 Fe 原子之间的强烈 3d 电子杂化作用, 表现出反铁磁性, 并削弱了周围 Fe 原子的磁矩. 而 Co 和 Ni 原子虽然也会减小局部磁矩, 但少量 Co 的掺入则能显著增大合金的总磁矩, 这在实验上也得到验证. 这表明 Co 的掺入与其他过渡金属相比, 在磁性方面具有独特的效应. 与此同时, Chen 等 [72] 还特别关注了元素替代引起的局部结构畸变对非晶合金磁性的影响, 发现这些结构变化进一步增强了某些合金的磁性能. 在 $\text{Fe}_{82}\text{Si}_4\text{B}_{10}\text{P}_4$ 非晶合金中, 当一个 Fe 原子被 Mn 或 Co 替代时, 经过结构弛豫后, 附近的原子发生了位移 (见图 10(a)–(c)). 无论是否经历弛豫, Mn 和 Co 分别表现出反铁磁性和铁磁性 (见图 10(d)). 弛豫过程引起的结构畸变增强了 Mn 和 Co 的局部磁矩, 同时也提升了非晶合金的整体磁矩. 如图 10(e) 所示, 对于比 Fe 多一个 d 电子的 Co 来说, 其引入可使 Fe 基非晶合金的饱和磁感应强度从 0.42 T 增至 1.69 T, 超过了 $\text{Fe}_{82}\text{Si}_4\text{B}_{10}\text{P}_4$ 非晶合金本身的数值. 这些结果表明, 元素替代引起的局部结构畸变也对非晶合金的磁性有着重要的影响.

2025 年, Xiao 等 [73] 系统研究了铁磁性元素 Co, Ni 的协同掺杂对 Fe 基非晶合金结构与磁性能的影响. 研究发现, 适量 Co, Ni 的共掺杂不仅能够显著提升合金的饱和磁化强度, 同时还能增强其玻璃形成能力, 实现了二者的协同优化. 该工作通过第一性原理分子动力学模拟与实验验证相结合的方法, 从原子尺度揭示了铁磁性元素掺杂对非晶合金微观结构和宏观性能的内在联系. 通过 Voronoi 多面体分析与 Honeycutt-Andersen 键对分析, 发现 Co, Ni 掺杂显著提高了体系中的二十面体结构与体心立方结构对应键对含量之间的差异, 其中 $\text{Fe}_{76}\text{Ni}_{10}\text{B}_7\text{C}_7$ 合金的差异最大 (见图 11), 且实验结果表明该合金具有最优的玻璃形成能力, 说明合金的玻璃形成能力与二十面体和体心立方团簇的比例有关; 同时, 计算结果表明, Co 和 Ni 掺杂能够有效增强 Fe 原子的磁矩, 其原因在于: Fe 原子周围局域环境的变化引起 Fe-3d 电荷在自旋向上和自旋向下态之间重新分布, 同时 Fe-Co 和 Fe-Ni 原子对之间的强交换相互作用得以增强. 实验结果也证实了上述结论, 表明适量加入 Co 并辅以少量 Ni 掺杂可以显著提高合金的总磁矩. 振动样品磁强计测量的宏观磁矩与模拟结果趋势一致. 研究表

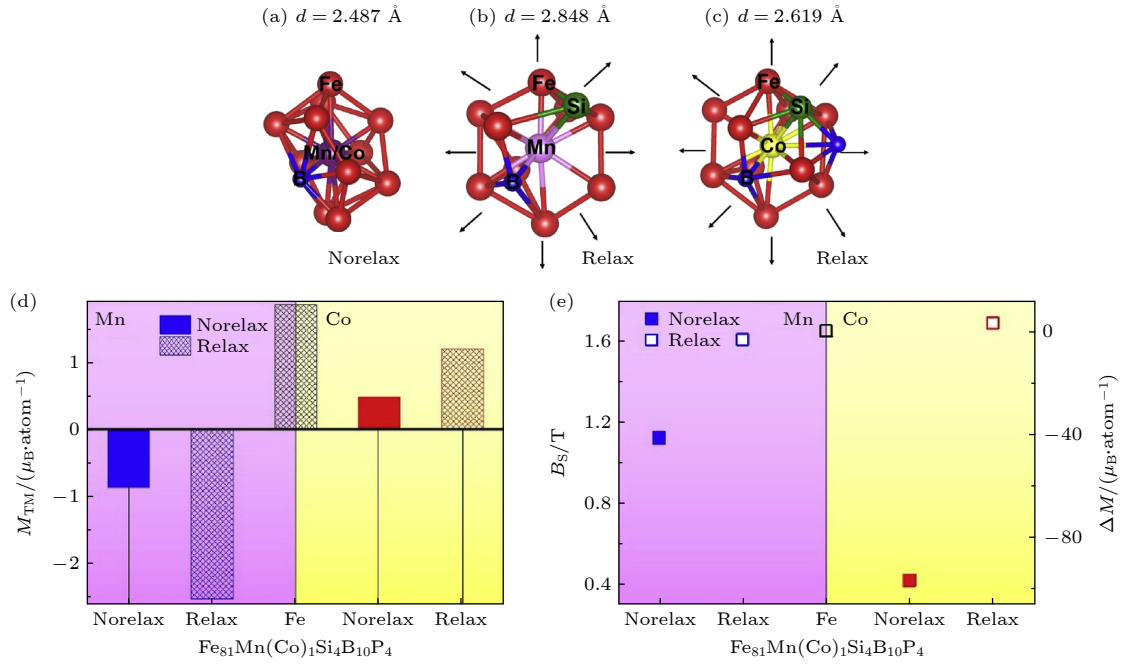


图 10 $\text{Fe}_{81}\text{Mn}(\text{Co})_1\text{Si}_4\text{B}_{10}\text{P}_4$ 非晶合金中 Mn/Co 及其最近邻原子的构型 (a) 未经结构弛豫; (b), (c) 经结构弛豫; (d) Mn/Co 原子在未弛豫和弛豫状态下的局部磁矩; (e) $\text{Fe}_{81}\text{Mn}(\text{Co})_1\text{Si}_4\text{B}_{10}\text{P}_4$ 非晶合金在未弛豫和弛豫状态下的 B_s 和磁矩变化量 (ΔM), 竖线对应 $\text{Fe}_{82}\text{Si}_4\text{B}_{10}\text{P}_4$ 的数值^[72]

Fig. 10. The configuration of Mn/Co and its nearest neighbor atoms in $\text{Fe}_{81}\text{Mn}(\text{Co})_1\text{Si}_4\text{B}_{10}\text{P}_4$ amorphous alloy: (a) Without and (b), (c) with structural relaxation; (d) local magnetic moment of Mn/Co atom without and with relaxation; (e) B_s and ΔM of $\text{Fe}_{81}\text{Mn}(\text{Co})_1\text{Si}_4\text{B}_{10}\text{P}_4$ amorphous alloy without and with relaxation, the vertical line corresponds to the value of $\text{Fe}_{82}\text{Si}_4\text{B}_{10}\text{P}_4$ ^[72].

明, 通过 Co, Ni 的协同掺杂, 可在提升玻璃形成能力的同时有效增强合金的饱和磁化强度, 为实现高性能 Fe 基非晶合金的理性设计提供了坚实的理论与实验依据。

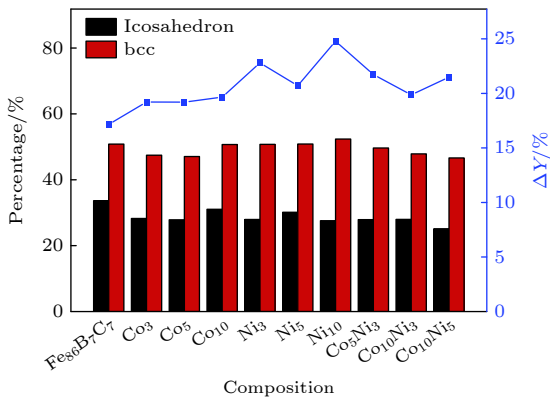


图 11 300 K 下不同非晶合金二十面体与体心立方结构型多面体的占比及二者的差值^[73]

Fig. 11. Ratios of icosahedral and body-centered cubic (bcc) polyhedra in various amorphous alloys at 300 K and their differences^[73].

由于合金表面结构与性质常与内部有差异, Li 等^[74] 采用从头算分子动力学研究了 $\text{Fe}_{78}\text{B}_{13}\text{Si}_9$ 非晶薄层表面原子结构与磁性. 如图 12(a), (b) 所示,

研究发现表面区域更加有序, 表现为更高的键角有序值. 表面还具有更高的菱形对称性 (更多的 1311 与 1321 键对) 以及更低的配位数. 另一方面, 用 Fe 的磁矩与局域态密度 (local density of states, LDOS) 来表征磁性. 结果表明, 表面部分的平均 Fe 磁矩大于内部部分, 其原因在于表面部分的 Fe-Fe 配位数更低 (见图 12(c), (d)). 这一工作为理解 Fe 基非晶合金表面结构与磁性的内在关联提供了重要的微观图像。

通过退火生成的铁基非晶/纳米晶材料往往比块材具有更优异的软磁性能^[16,75], 其原子结构的研究对理解铁基非晶磁性也具有重要意义. Cao 等^[76] 通过分子动力学模拟从原子层面系统研究 Fe 基非晶合金在退火过程中的结构演化与纳米晶化机制. 研究表明, $\text{Fe}_{78}\text{Si}_{15}\text{B}_7$ 非晶合金的主要键类型为 1551, 1541 和 1431, 这些类型的键反映出二十面体结构在合金中占主导地位, 表明非晶合金具有较强的局域有序性. 退火处理对合金的内部簇结构产生了显著影响. 随着温度的变化, $\langle 0,0,12,0 \rangle$ 簇的比例在退火过程中先升高后下降, 且在 848.15 K 时达到了最高值. 这一现象表明, 在退火温度为 848.15 K

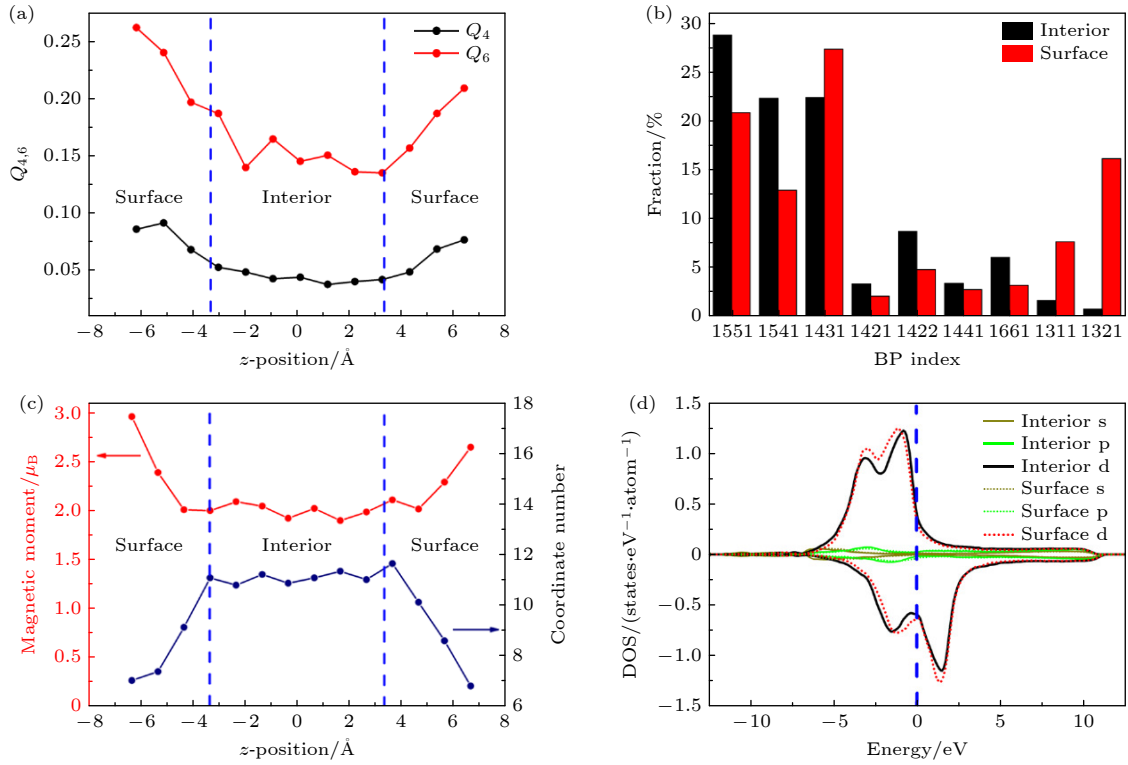


图 12 (a) $\text{Fe}_{78}\text{B}_{13}\text{Si}_9$ 非晶薄膜中键角序 Q_4 与 Q_6 沿 Z 方向的变化; (b) $\text{Fe}_{78}\text{B}_{13}\text{Si}_9$ 非晶薄膜中表面与内部区域的成键对分布; (c) $\text{Fe}_{78}\text{B}_{13}\text{Si}_9$ 非晶薄膜中 Fe 原子磁矩沿 Z 方向的分布; (d) $\text{Fe}_{78}\text{B}_{13}\text{Si}_9$ 非晶薄膜中表面与内部区域 Fe 原子的 LDOS^[74]

Fig. 12. (a) Variation of the order parameters Q_4 and Q_6 along the Z -axis in the $\text{Fe}_{78}\text{B}_{13}\text{Si}_9$ amorphous slab; (b) distribution of bond pairs for the surface and interior regions in the $\text{Fe}_{78}\text{B}_{13}\text{Si}_9$ amorphous slab; (c) distribution of the Fe magnetic moment along the Z -axis in the $\text{Fe}_{78}\text{B}_{13}\text{Si}_9$ amorphous slab; (d) LDOS of Fe atoms in the surface and interior regions of the $\text{Fe}_{78}\text{B}_{13}\text{Si}_9$ amorphous slab^[74].

时,二十面体结构的转变最为显著,可能为结晶相的形成提供了前驱结构.此外,热效应促使合金表面附近的原子转变为类二十面体的结构,使得表面更易于形成晶核,促进了合金的结晶过程.在 Fe 基非晶合金的退火过程中, $\text{Fe}_{78}\text{Si}_{15}\text{B}_7$ 显示出较强的转变为纳米晶状态的倾向,这主要归因于其较低的能量要求使其更容易形成二十面体结构.与此相比, $\text{Fe}_{74}\text{Cu}_1\text{Nb}_3\text{Si}_{15}\text{B}_7$ 合金在退火过程中更难形成二十面体结构.这是因为 Cu 和 Nb 元素的掺入不仅增加了合金中元素的种类,还引入了更大的原子半径差异,导致了形成二十面体结构的难度增大.该研究揭示了原子堆积结构在 Fe 基非晶合金结晶行为中的重要作用,值得进一步深入研究.

4 总结与展望

深入理解铁基非晶磁性能机制,不仅对发展磁性理论至关重要,也是设计和优化新型非晶软磁材料的根本依据.非晶合金的磁性行为通常采用类似

晶态合金的结论进行解释,例如磁性原子浓度和 Fe—Fe 键长与磁矩及饱和磁化强度密切相关.然而,由于非晶合金独特的结构特性,其磁性能的起源必然与其结构存在内在关联.

在铁基非晶材料中,由于缺乏长程原子有序性,原子间距和键角呈分布态,这导致由 Fe-3d 电子决定的交换积分在空间上出现幅度(甚至某些局域环境下符号)的涨落,引起局域磁有序程度和局域磁矩取向的非均匀分布.另一方面,合金元素种类及其局域化学环境会影响 Fe 及其他磁性原子的局域磁矩大小.上述两方面因素共同影响单位体积内各原子自发磁矩的矢量和,从而决定材料的宏观饱和磁化强度.因此,通过掺杂或替换不同元素,可以系统探究 SRO 对局域电子结构和磁矩的调制作用,从而进一步揭示其与宏观磁性的内在联系.已有研究表明,电子转移效应以及原子半径、元素间混合焓等原子尺度参数的差异,会显著改变合金的局域结构环境并影响其磁性行为.近年来,针对铁基非晶合金中结构与磁性能耦合机制的研究逐步深入,逐渐形成了以 SRO、MRO 及纳米尺度结

构为核心的多尺度结构机理框架. 在原子尺度上, 键长、配位数以及化学短程有序在很大程度上决定了局域交换作用的强弱, 并对合金结构的热稳定性起着关键作用; 中程尺度上, 原子团簇的连接方式与空间分布特征直接影响局域应力场分布及磁各向异性的形成, 且某些团簇连接方式也被发现与饱和磁感应强度有关; 而在纳米尺度, 结构非均匀性主要通过改变磁畴形貌和畴壁钉扎过程, 在宏观上显著影响剩磁、磁化曲线形状和矫顽力, 并可能对饱和磁化强度产生影响. 由此可见, 不同结构层次间的耦合与传递构成了非晶体系中结构-性能关联的本质, 为理解和调控其磁性提供了多尺度结构机理的统一框架.

从多个尺度联系非晶结构与磁性已经成为探究铁基非晶结构起源的重要方法, 虽然近年来部分实验与模拟计算方面已经有了一些进展, 但是这方面的研究内容仍相对缺乏, 对铁基非晶磁性的认识仍然不足. 比如中程变化的程度如何精确对应磁结构的变化? 如何精准调控这些结构? 是否所有 Fe 基体系都存在液-液相变? 此外, 目前主流实验技术尚无法直接揭示非晶体系中原子团簇的拓扑连接模式, 因此很难验证这些局部结构特征如何进化为中程结构. 虽然 XRD、小角中子散射等技术可以提供整体结构信息, 但它们在揭示原子级团簇的连接方式、拓扑结构等细节方面仍存在局限性. 尽管计算模拟 (如分子动力学模拟、密度泛函理论计算等) 可以提供关于原子级结构的深入洞察, 但目前微观结构与磁性的关联的计算仍较集中在电子结构层面的分析, 原子结构与磁性尤其是饱和磁化强度的关联并没有像其与玻璃形成能力的关联一样有比较清晰的关联图像. 由于体系规模和势函数选择的限制, 这些模拟方法在描述中程结构演化及对应磁矩的演化时面临挑战, 模拟精度也受限于计算资源与模拟方法的适用性. 因此, 如何在实验和计算方法之间建立有效的桥梁, 成为理解短程序到中程有序结构演化、建立多尺度结构分析的关键难题之一.

近年来, 机器学习在材料科学领域的应用迅速兴起, 正在推动一场材料设计的范式转变^[77]. 机器学习在数据驱动的优化方面具有巨大潜力, 为加速发现新材料, 尤其是复杂无序材料领域的新材料, 提供了一条更加高效的途径. 各种机器学习方法已被用于预测具有优异软磁性能的铁基非晶合金成

分, 并为这些合金的实际应用与性能优化提供了新的高效技术和方法^[78-82]. 然而, 仅依靠成分设计本身往往难以对材料性能背后的物理机理给出系统而深入的认识和理解, 尤其是在成分、微观结构与磁性行为高度耦合的铁基非晶合金体系中. 随着机器学习势的快速发展以及在非晶材料中日益增多的应用^[83-86], 将其与第一性原理计算和原子尺度模拟相结合, 有望打破传统计算模拟方法时间和空间的限制, 为揭示铁基非晶合金的磁性微观结构之间的内在联系提供一种全新的研究技术和路径.

参考文献

- [1] Silveyra J M, Ferrara E, Huber D L, Monson T C 2018 *Science* **362** eaao0195
- [2] Shi L X, Chai T T, Du X N, Jia J L, Yao K F, Zhang Z J, Chen N 2026 *Mater. Sci. Eng. R Rep.* **167** 101078
- [3] Hui X D, Lyu K, Si J J, Du C X, Wang R S 2018 *Chin. J. Eng.* **40** 1158 (in Chinese) [惠希东, 吕昉, 斯佳佳, 杜晨曦, 王荣山 2018 *工程科学学报* **40** 1158]
- [4] Duwez P, Lin S C H 1967 *J. Appl. Phys.* **38** 4096
- [5] Luborsky F 1978 *IEEE Trans. Magn.* **14** 1008
- [6] Hasegawa R 2004 *Mater. Sci. Eng. A* **375-377** 90
- [7] Cotai A, Neamtu B V, Popa F, Marinca T F, Isnard O, Chicinaş I 2021 *J. Alloys Compd.* **880** 160497
- [8] Ahmadian Baghbaderani H, Masood A, Alvarez K L, Ó Mathúna C, McCloskey P, Stamenov P 2021 *J. Alloy. Compd.* **877** 160194
- [9] Ohta M, Yoshizawa Y 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 062517
- [10] Makino A 2012 *IEEE Trans. Magn.* **48** 1331
- [11] Chen H S 1980 *Rep. Prog. Phys.* **43** 353
- [12] Suryanarayana C, Inoue A 2013 *Int. Mater. Rev.* **58** 131
- [13] Ouyang G Y, Jensen B, Tang W, Schlagel J, Hilliard B, Pan C C, Cui B Z, Dennis K, Jiles D, Monson T, Anderson I, Kramer M J, Cui J 2020 *Acta Mater.* **201** 209
- [14] Ke H B, Zhou J, Tong X, Wang W H 2025 *Sci. Technol. Rev.* **43** 20 (in Chinese) [柯海波, 周靖, 童星, 汪卫华 2025 *科技导报* **43** 20]
- [15] Gubanov A I 1960 *Soviet Phys. Solid State* **30** 275
- [16] Yao K F, Shi L X, Chen S Q, Shao Y, Chen N, Jia J L 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 01610 (in Chinese) [姚可夫, 施凌翔, 陈双琴, 邵洋, 陈娜, 贾蓓蓓 2018 *物理学报* **67** 016101]
- [17] Shen B L, Akiba M, Inoue A 2006 *Appl. Phys. Lett.* **88** 131907
- [18] O'Handley R C, Hasegawa R, Ray R, Chou C P 1976 *Appl. Phys. Lett.* **29** 330
- [19] Mitera M, Naka M, Masumoto T, Kazama N, Watanabe K 1978 *Phys. Stat. Sol. (a)* **49** K163
- [20] Ray R, Hasegawa R, Chou C P, Davis L A 1977 *Scr. Metall.* **11** 973
- [21] Shi L X, Hu X Y, Li Y H, Yuan G T, Yao K F 2021 *Intermetallics* **131** 107116
- [22] Grey D G, Cesnek M, Bujdoš M, Miglierini M B 2024 *Metals* **14** 712
- [23] Jiao Z B, Li H X, Gao J E, Wu Y, Lu Z P 2011 *Intermetallics* **19** 1502
- [24] Liu Q L, Mo J Y, Liu H S, Xue L, Hou L, Yang W M, Dou L T, Shen B L, Dou L M 2016 *J. Non-Cryst. Solids* **443** 108
- [25] Zhou W H, Zhang S Y, Song L J, Huo J T, Wang J Q, Li Y

- 2025 *J. Mater. Sci. Technol.* **213** 146
- [26] Zhao C L, Wang A D, He A, Chang C T, Liu C T 2021 *Sci. China Mater.* **64** 1813
- [27] Suzuki K, Ito N, Garitaonandia J S, Cashion J D 2006 *J. Appl. Phys.* **99** 08F114
- [28] Liu M, Wang Z, Xu Y C 2015 *IEEE Trans. Magn.* **51** 2004704
- [29] Suzuki K, Ito N, Saranu S, Herr U, Michels A, Garitaonandia J S 2008 *J. Appl. Phys.* **103** 07E730
- [30] Jiang M F, Wang J J, Cai M J, Li J, Dong W Y, Guo Z J, Shen B L 2025 *J. Non-Cryst. Solids* **650** 123382
- [31] Yoshizawa Y, Oguma S, Yamauchi K 1988 *J. Appl. Phys.* **64** 6044
- [32] Ding H P, Liu L C, Shao L L, Zhou J, Zuo D R, Ke H B, Wang W H 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 136101 (in Chinese) [丁华平, 刘李晨, 邵里良, 周靖, 左定荣, 柯海波, 汪卫华 2025 物理学报 **74** 136101]
- [33] Huang B, Yang Y, Wang A D, Wang Q, Liu C T 2017 *Intermetallics* **84** 74
- [34] Cai Y F, Lin B, Wang Y C, Umetsu R, Liang D D, Qu S J, Zhang Y, Wang J Q, Shen J 2024 *J. Mater. Sci. Technol.* **180** 141
- [35] Xu K, Ling H B, Li Q, Li J F, Yao K F, Guo S F 2014 *Intermetallics* **51** 53
- [36] Amiya K, Urata A, Nishiyama N, Inoue A 2005 *J. Appl. Phys.* **97** 10F913
- [37] Jung H Y, Stoica M, Yi S, Kim D H, Eckert J 2014 *J. Magn. Mater.* **364** 80
- [38] Yang Z Z, Zhu L, Jiang S S, Zhu C, Xu Q H, Lin Y, Chen F G, Wang Y G 2022 *J. Alloy. Compd.* **904** 164067
- [39] Yang W M, Liu H S, Fan X D, Xue L, Dun C C, Shen B L 2015 *J. Non-Cryst. Solids* **419** 65
- [40] Dou L T, Liu H S, Hou L, Xue L, Yang W M, Zhao Y C, Chang C T, Shen B L 2014 *J. Magn. Mater.* **358–359** 23
- [41] Xu Q H, Lu L L, Yan Q, Chen F G, Jain A, Lin Y, Zhou H Z, Wang Y G 2023 *J. Alloys Compd.* **960** 171059
- [42] Hasegawa R, O'Handley R C 1979 *J. Appl. Phys.* **50** 1551
- [43] Feng Y, Yan Z C, Chen Q, Zhang H, Qi Z G, Liu H Z, Bai Y W, Wang W M 2022 *Metall. Mater. Trans. A* **53** 3002
- [44] Chrobak A, Nosenko V, Haneczok G, Boichyshyn L, Kotur B, Bajorek A, Zivotsky O, Hendrych A 2011 *Mater. Chem. Phys.* **130** 603
- [45] Mi X R, Hu L, Wu B W, Long Q, Wei B B 2024 *Acta Phys. Sin.* **73** 097102 (in Chinese) [糜晓磊, 胡亮, 武博文, 龙强, 魏炳波 2024 物理学报 **73** 097102]
- [46] Ge J C, He H Y, Zhou J, Lu C Y, Dong W X, Liu S N, Lan S, Wu Z D, Wang A D, Wang L, Yu C, Shen B L, Wang X L 2019 *J. Alloys Compd.* **787** 831
- [47] Zhu L, Liu S N, Lan S, Xu Y M, Li C, Zheng H, Jiang S S, Men J R, Wang X L, Pan F M, Wang Y G 2020 *J. Alloys Compd.* **823** 153911
- [48] Ge J C, Gu Y, Yao Z Z, Liu S N, Ying H Q, Lu C Y, Wu Z D, Ren Y, Suzuki J ichi, Xie Z H, Ke Y B, Zeng J R, Zhu H, Tang S, Wang X L, Lan S 2024 *J. Mater. Sci. Technol.* **176** 224
- [49] Bai Y W, Li J C, Zhang J, Dong B S, Li X X, Zhao X, Cui Z, Li T, Hu L 2024 *J. Non-Cryst. Solids* **624** 122705
- [50] Bai Y W, Bian X F, Qin J Y, Li X X, Song K K 2020 *J. Non-Cryst. Solids* **528** 119723
- [51] Tong X, Zhang Y, Wang Y C, Liang X Y, Zhang K, Zhang F, Cai Y F, Ke G B, Wang G, Shen J, Makino A, Wang W H 2022 *J. Mater. Sci. Technol.* **96** 233
- [52] Lin Y, Dai J, Yang Z Z, Jiang S S, Xu Q H, Wang Y G, Chen F G, Jain A 2023 *J. Alloys Compd.* **936** 168268
- [53] Cowlam N, Carr G E 1985 *J. Phys. F: Met. Phys.* **15** 1109
- [54] Bratkovsky A M, Smirnov A V 1993 *J. Phys. : Condens. Matter* **5** 3203
- [55] Bratkovsky A M, Smirnov A V 1993 *Phys. Rev. B* **48** 9606
- [56] Hafner J, Tegze M, Becker Ch 1994 *Phys. Rev. B* **49** 285
- [57] Nowak H J, Andersen O K, Fujiwara T, Jepsen O, Vargas P 1991 *Phys. Rev. B* **44** 3577
- [58] Ching W Y, Xu Y N, Harmon B N, Ye J, Leung T C 1990 *Phys. Rev. B* **42** 4460
- [59] Tian H, Zhang C, Zhao J J, Dong C, Wen B, Wang Q 2012 *Physica B* **407** 250
- [60] Zhu L, Wang Y G, Cao C C, Meng Y 2017 *Chin. Phys. B* **26** 067101
- [61] Lu S W 2023 *J. Non-Cryst. Solids* **617** 122510
- [62] Wang Y C, Zhang Y, Makino Akihiro, Liang Y Y, Kawazoe Y 2014 *IEEE Trans. Magn.* **50** 1
- [63] Wang Y C, Zhang Y, Takeuchi A, Makino A, Liang Y, Kawazoe Y 2015 *Mater. Res. Express* **2** 016506
- [64] Lu L J, Guo Y M, Li X, Zhang T 2022 *J. Alloy. Compd.* **904** 164101
- [65] Wang H, Hu T, Zhang T 2013 *Physica B* **411** 161
- [66] Jiang Y H, Jia S K, Chen S W, Li X L, Wang L, Han X J 2022 *Materials* **15** 3149
- [67] Park J H, Choi M Y, Kim S M, Hong Y K, Choi-Yim H 2024 *J. Non-Cryst. Solids* **624** 122724
- [68] Muraca D, Cremaschi V J, Sirkin H 2007 *J. Magn. Mater.* **311** 618
- [69] Luborsky F E 1983 *Amorphous Metallic Alloys* (Oxford: Butterworth-Heinemann) pp1–7
- [70] Estévez D C, Betancourt I 2012 *J. Non-Cryst. Solids* **358** 1778
- [71] Cremaschi V, Sánchez G, Sirkin H 2004 *Physica B* **354** 213
- [72] Chen H, Zhou S X, Dong B S, Jin J J, Liu T Q, Guan P F 2020 *J. Alloy. Compd.* **819** 153062
- [73] Xiao J H, Ding D W, Li L, Sun Y T, Li M Z, Wang W H 2025 *Chin. Phys. Lett.* **42** 016102
- [74] Li X, Zuo L, Zhang X, Zhang T 2018 *J. Phys. Chem. C* **122** 28613
- [75] Zhou J F, You J H, Qiu K Q 2022 *J. Appl. Phys.* **132** 040702
- [76] Cao S, Liu G Y, Huang J K, Yu X Q, Fan D, Ni Y, Luo Y M 2024 *J. Non-Cryst. Solids* **624** 122726
- [77] Agrawal A, Choudhary A 2016 *APL Mater.* **4** 053208
- [78] Xiong J, Bai B W, Jiang H R, Faus-Golfe A 2024 *Rare Met.* **43** 5256
- [79] Li K Y, Liu L C, Shao L L, Zhou J, Ke H B, Li M Z, Wang W H 2025 *J. Alloy. Compd.* **1010** 178325
- [80] Guo W H, Wu Y, Shi L X, Jia J L, Wang R B, Bu H T, Zhu Z F, Shao Y, Yao K F 2025 *Acta Mater.* **285** 120643
- [81] Liu Y B, Madanchi A, Anker A S, Simine L, Deringer V L 2025 *Nat. Rev. Mater.* **10** 228
- [82] Yang S Y, Zang B W, Xiang M L, Shen F Y, Song L, Gao M, Zhang Y, Huo J T, Wang J Q 2025 *Adv. Funct. Mater.* **35** 2425588
- [83] Friederich P, Häse F, Proppe J, Aspuru-Guzik A 2021 *Nat. Mater.* **20** 750
- [84] Zhang C, Tang L, Sun Y, Ho K M, Wentzcovitch R M, Wang C Z 2022 *Phys. Rev. Mater.* **6** 063802
- [85] Li F C, Zhang Z B, Liu H R, Zhu W Q, Wang T Y, Park M, Zhang J Y, Bömminghoff N, Feng X B, Zhang H T, Luan J H, Wang J Y, Liu X D, Chang T H, Chu J P, Lu Y, Liu Y H, Guan P F, Yang Y 2024 *Nat. Mater.* **23** 52
- [86] Wu Y X, Huang F Q, Chen Z, Liu H S, Zhou J, Ke H B, Peng H L 2025 *J. Non-Cryst. Solids* **665** 123608

SPECIAL TOPIC—Order tuning in disordered alloys

Correlation between microstructure and magnetism of iron-based amorphous alloys

LIU Xiaorong LI Kangyuan LI Maozhi[†]

(*Key Laboratory of Quantum State Construction and Manipulation (Ministry of Education), School of Physics, Renmin University of China, Beijing 100872, China*)

(Received 25 November 2025; revised manuscript received 17 December 2025)

Abstract

Fe-based amorphous alloys have continuously attracted extensive attention due to their excellent soft magnetic properties, such as high saturation magnetization, high permeability, low coercivity, and low core loss. However, the theoretical studies on the magnetism of amorphous alloys remain incomplete, and the structural origins of the magnetic properties in Fe-based amorphous alloys are still unclear, making it difficult to fully explain their magnetic behaviors. Existing research primarily focuses on how different elements affect the electronic structure, magnetic moment, saturation magnetization, and other properties of iron-based amorphous alloys. However, little effort has been paid to the in-depth exploration into the underlying mechanisms of the local atomic structures, including short-range and medium-range order, influence magnetic properties. This review summarizes the recent experimental and computational progress in exploring the potential correlation mechanism between amorphous structures and soft-magnetic properties, aiming to provide a reference for further elucidating the structural origins of magnetic properties in Fe-based amorphous alloys, and to identify key unresolved issues in future research.

Keywords: Fe-based amorphous alloys, soft magnetism, structural origin, amorphous alloys

DOI: [10.7498/aps.75.20251598](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251598)

CSTR: [32037.14.aps.75.20251598](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20251598)

[†] Corresponding author. E-mail: maozhili@ruc.edu.cn

铁基非晶合金微观结构与磁性的关联性

刘小榕 李康源 李茂枝

Correlation between microstructure and magnetism of iron-based amorphous alloys

LIU Xiaorong LI Kangyuan LI Maozhi

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 040708 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251598

CSTR: 32037.14.aps.75.20251598

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251598>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

不同力学激励形式探索La基非晶合金微观结构非均匀性

Probing microstructural heterogeneity of La-based amorphous alloy under versatile mechanical stimuli

物理学报. 2024, 73(4): 046101 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231421>

激光熔化3D打印高性能铁基非晶软磁器件及其物理机制

Laser melting 3D printing prepared high-performance iron-based amorphous soft magnetic devices and their physical mechanisms

物理学报. 2025, 74(16): 166103 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250559>

退火时间对 $\text{Fe}_{80}\text{Si}_9\text{B}_{10}\text{Cu}_1$ 非晶合金纳米尺度结构不均匀性和磁性能的影响

Effects of annealing time on nanoscale structural heterogeneity and magnetic properties of $\text{Fe}_{80}\text{Si}_9\text{B}_{10}\text{Cu}_1$ amorphous alloy

物理学报. 2022, 71(15): 156102 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220446>

动力机械循环过程中非晶合金变形特征与年轻化机理研究

Deformation characteristic and rejuvenation mechanism of amorphous alloy during the mechanical cycling

物理学报. 2025, 74(16): 166101 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250563>

铁基非晶条带催化降解性能的退火晶化调控机理

Annealing crystallization control mechanism of catalytic degradation properties of Fe-based amorphous ribbons

物理学报. 2024, 73(9): 098801 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240249>

$\text{Fe}_{73.5}\text{Si}_{13.5}\text{B}_9\text{Cu}_1\text{Nb}_3$ 非晶合金的高温氧化和晶化机理

High-temperature oxidation and crystallization mechanism of $\text{Fe}_{73.5}\text{Si}_{13.5}\text{B}_9\text{Cu}_1\text{Nb}_3$ amorphous alloy

物理学报. 2025, 74(8): 088101 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250112>