

类金属元素影响 Co-Y-B 合金非晶形成能力和磁性能的机制分析*

马爽 郝玮晔 王旭东 张伟[†] 姚曼[‡]

(大连理工大学材料科学与工程学院, 大连 116024)

(2022 年 5 月 4 日收到; 2022 年 7 月 25 日收到修改稿)

本文采用第一性原理分子动力学 (*ab initio* molecular dynamics, AIMD) 方法模拟了 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{M}_{10}$ ($\text{M} = \text{B}, \text{C}, \text{Si}, \text{P}$) 合金形成非晶的过程, 探究添加类金属元素 C, Si, P 对 Co 基 Co-Y-B 合金非晶形成能力 (glass-forming ability, GFA) 和磁性能的影响, 着重从原子层面分析了局域原子结构与性能的关联. 计算的局域原子结构表征参数有对分布函数、配位数、化学短程序、Voronoi 多面体指数、局域五次对称性和均方位移. 结果表明, 4 种合金不同的局域原子结构特征造成其 GFA 的差异. $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{C}_{10}$ 和 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{P}_{10}$ 合金中棱柱结构的含量较高, B/C-C 和 B/P-P 原子间的溶质分离性较弱, 过冷态时 (1100 K) 原子扩散能力较强, 不利于提高合金的 GFA. $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{Si}_{10}$ 合金中畸变二十面体结构的含量较高, Co-Si 原子间吸引力较强, B/Si-Si 原子间具有较好的分离性, 过冷态时原子的扩散能力较低, 有利于提高合金的 GFA. 因此, 添加 Si 元素有助于提高合金的 GFA, 而 C 和 P 元素的添加会降低 GFA, 且 C 元素对 GFA 的削弱作用更为明显. 4 种合金的 GFA 按 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{Si}_{10} > \text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{25} > \text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{P}_{10} > \text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{C}_{10}$ 的顺序依次降低. 添加 C, Si, P 元素使体系的总磁矩均有所下降, 按照 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{25} > \text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{Si}_{10} > \text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{C}_{10} > \text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{P}_{10}$ 的顺序依次递减. Co-Si 原子间较强的 p-d 轨道杂化作用增强了磁交换耦合作用, 导致添加 Si 元素对总磁矩的削弱作用较小.

关键词: Co 基非晶合金, 第一性原理分子动力学模拟, 非晶形成能力, 磁性能

PACS: 81.05.Kf, 61.43.Dq, 71.15.Pd

DOI: 10.7498/aps.71.20220873

1 引言

Co 基非晶合金具有许多优异的性能, 例如高强度、高磁导率、低矫顽力和接近于零的磁致伸缩系数等, 尤其是高频下的软磁特性极佳, 在电子产业和通信技术领域具有广阔的应用前景. 然而, Co 基非晶合金的非晶形成能力 (glass-forming ability, GFA) 和饱和磁感应强度 (B_s) 相对较低, 其应用范围受到了限制^[1-4]. 因此, 开发具有高 GFA 和优异软磁性能的 Co 基非晶合金、并阐明其结构和性能的关联具有重要的科学意义和应用价值.

类 (非) 金属元素 (B, C, Si, P) 是形成铁磁性 Fe、Co、Ni 基非晶合金重要的元素, 它具有较小的原子半径, 且与多数金属元素间存在较大的负混合焓, 容易进入大原子间隙, 利于提高体系的致密度, 抑制晶体相的形核和长大. 因此, 可以通过添加类金属元素的合金化手段, 提高合金熔体的热稳定性并使其 GFA 和磁性能得到显著改善^[5-11]. Hibino 等^[12] 通过在 Fe-B-C 合金中添加原子质量分数为 4%—5% 的 Si 元素, 有效地扩大了体系的过冷液相区间, 阻碍了竞争晶体相的形核, 从而抑制了晶体相的析出, 提高了 GFA. Wang 等^[13] 向 Fe-B 合金中添加 C, Si, P 元素提高了 GFA 和 B_s , 推测是

* 国家自然科学基金 (批准号: 51871039) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: wzhang@dlut.edu.cn

[‡] 通信作者. E-mail: yaoman@dlut.edu.cn

由于类金属元素的加入不仅可以提高体系的致密度和局域原子结构的稳定性, 而且由于原子间键长的缩短, 磁交换耦合作用显著增强, 起到提高 GFA 和 B_s 的作用.

非晶合金优异的性能与其原子无序排列的独特结构密切相关, 而目前实验表征手段对非晶合金微观结构的测定和描述仍有一定的局限性, 因此第一性原理分子动力学 (*ab initio* molecular dynamics, AIMD) 模拟成为研究其微观结构并探索结构和物性关联的有效方法^[14–15]. 例如, Yu 等^[16]从原子尺度探讨了 Fe-Y-Nb-B 合金 GFA 的影响机理, 认为添加 Y 和 Nb 元素提高了元素分布的不均匀性, 并促进了体系内 Fe 原子为中心的畸变二十面体结构的形成, 从而提高了 GFA. Guan 等^[17]发现 Pd-Ni-P 合金中 Ni-P 原子间的强共价相互作用导致棱柱结构和二十面体结构以共点、共边、共面的方式连接, 使体系具有优异的 GFA. Chen 等^[18]发现过渡金属元素 TM (TM = V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni) 对 Fe-TM-Si-B-P 合金磁性能的影响与局域电子自旋涨落和结构畸变有关. 上述工作为探究非晶合金微观结构与宏观性能间的关联提供了有价值的观点, 但是目前针对 Co 基非晶合金微观结构、GFA、磁性能的相关性和机制有待明晰.

因此, 考虑类金属元素添加对合金 GFA 和磁性能的影响以及研究方法的选取这两方面因素, 本工作选择课题组前期经实验制备、并证明具有较高 GFA 的 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{25}$ 合金作为基础合金^[19], 将 C, Si, P 替代部分 B 元素, 使用 AIMD 方法获得 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{M}_{10}$ (M = B, C, Si, P) 合金的非晶态结构, 并计算其局域原子结构的表征参数 (对分布函数、配位数、化学短程序、Voronoi 多面体指数、局域五次对称性和均方位移)、磁矩、电子态密度, 致力于从原子层面分析局域原子结构与 GFA 和磁性能的关联, 阐明 C, Si, P 元素影响 GFA 和磁性能的微观机制, 为研发高 GFA、高性能软磁性 Co 基非晶合金提供依据. 此外, 文中使用了多种表征参数, 较为系统地 from 原子和电子层面表征非晶合金的局域原子结构, 对于其他非晶合金体系局域原子结构的全面表征具有一定的借鉴意义.

2 计算条件及方法

2.1 非晶态合金形成的模拟方法

采用基于密度泛函理论 (density functional

theory, DFT) 的 AIMD 方法模拟 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{M}_{10}$ 非晶合金的形成过程^[20]. AIMD 计算使用投影缀加波方法 (projected augmented wave, PAW)^[21] 以及 VASP (vienna *ab initio* simulation package, VASP) 软件^[22], 利用 Perdew-Wang 广义梯度近似 (generalized gradient approximation, GGA)^[23] 描述电子间的交换关联作用. 模拟采用周期边界条件、正则系综, 通过 Nosé-Hoover 热浴来控制温度^[24,25]. 4 种非晶合金的初始构型是包含 100 个原子的立方超胞 (图 1(a)–(d)), 通过 Monte Carlo 方法将所有原子随机且均匀分布在超胞模型中. 元素配比按合金成分确定, 体系尺寸由室温下的密度决定, 布里渊区积分只采用一个 Γ 点. 原子的运动轨迹通过 Verlet 积分算法实现^[26], 时间步长为 2 fs. 模拟过程中, 体系先在 3000 K 下充分弛豫 5000 个时间步, 以消除原子对初始位置的记忆效应. 随后以 1.67×10^{14} K/s 的速度依次降温到 2000, 1100, 800, 300 K, 获得非晶态结构 (图 1(e)–(h)). 体系在每个温度下弛豫 3000 个时间步以达到平衡状态, 同时考虑到温度对模型尺寸的影响, 通过改变模型边长 L 调节内部平均压力为 ± 0.5 kbar (1 bar = 100 kPa) 获得平衡体积, 来优化对应温度下的模型尺寸. 最后选取后 2000 个构型用于局域原子结构的统计分析. 磁性能计算引入了强关联体系的 Hubbard U ($U = 3.0$ eV^[27]) 修正.

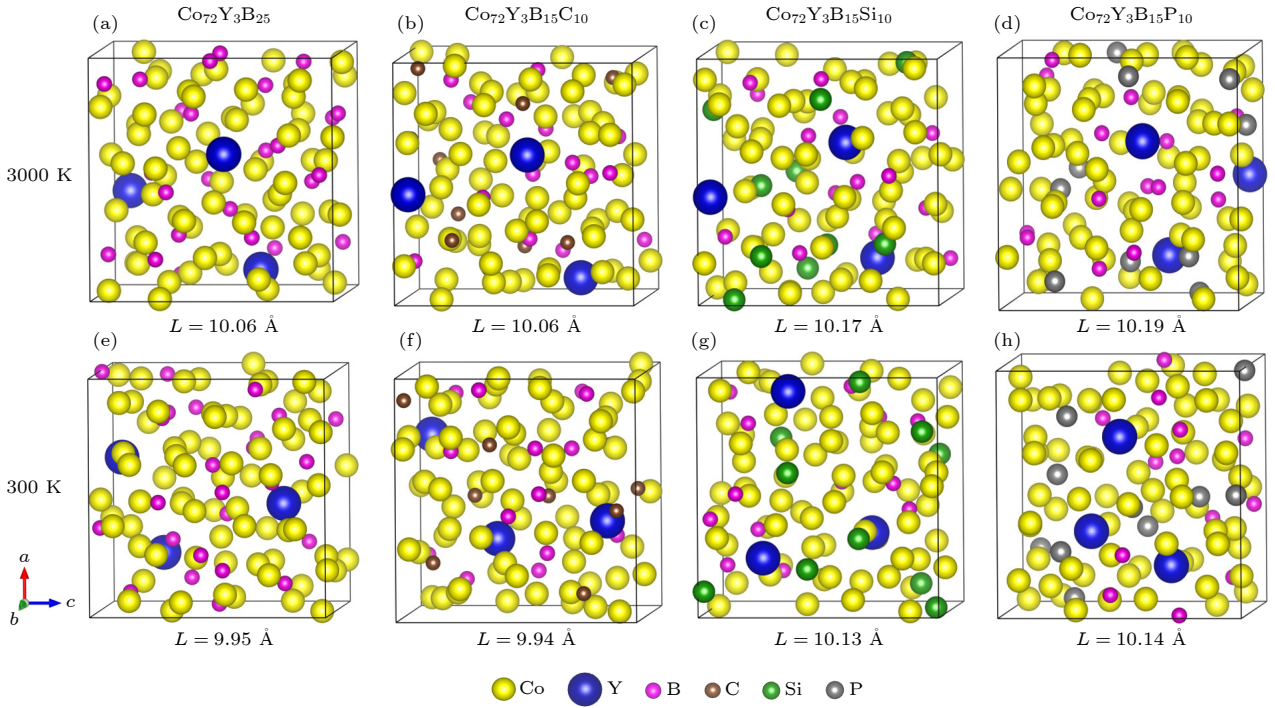
2.2 局域原子结构的表征参数

为从原子层面表征非晶合金的局域原子结构, 分别计算了对分布函数 (pair distribution function, PDF)、配位数、化学短程序 (chemical short-range order, CSRO)、Voronoi 多面体指数、局域五次对称性 (local five-fold symmetry, LFFS) 和均方位移 (mean square displacement, MSD).

对分布函数 PDF 反映的是从任意原子出发, 到半径为 r 的位置处出现其他原子的几率, 表达式为^[28]

$$g(r) = \frac{1}{4\pi r^2 \rho N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1, j \neq i}^N \delta(r - |\mathbf{r}_{ij}|), \quad (1)$$

其中, ρ 是体系的原子数密度, N 是总原子数, $|\mathbf{r}_{ij}|$ 是第 i 个原子和第 j 个原子间的距离. 对 PDF 的第一峰进行积分可得到体系的配位数.

图 1 3000 和 300 K 时 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{M}_{10}$ 合金的立方超胞模型Fig. 1. Cubic supercells of $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{M}_{10}$ alloys at 3000 and 300 K.

Warren-Cowley 定义的化学短程序 CSRO 参数 a_{ij} 可定量地反映原子间的化学亲和作用 [29]:

$$a_{ij} = 1 - \frac{N_{ij}}{c_j N_i}, \quad (2)$$

N_{ij} 和 N_i 分别是偏配位数和总配位数, c_j 是 j 类型原子的比例. $a_{ij} > 0$ 表示 j 原子不易于聚集在 i 原子周围, $a_{ij} < 0$ 表示 j 原子倾向于聚集在 i 原子周围, 排斥或吸引程度与绝对值大小成正比.

非晶合金中 Voronoi 多面体的作用与晶体中的 Wigner-Seitz 元胞类似, 定义为中心原子与近邻原子连线的垂直分面所围成的最小封闭凸多面体, 用指数 $\langle n_3, n_4, n_5, n_6 \rangle$ 的形式表示 [30], n_i 代表多面体中 i 边形的数量, $\sum n_i$ 代表配位数.

根据体系中 Voronoi 多面体的类型和含量, 非晶结构的平均局域五次对称性 LFFS 可表示为 [31]

$$W = \sum_i \left(\frac{n_i^5}{\sum_{k=3,4,5,6} n_i^k} \times P_i \right), \quad (3)$$

其中, n_i^5 和 n_i^k 分别是 i 类型多面体中五边形和 k 边形的数量, P_i 是这类多面体的含量. LFFS 参数是较为普适的几何结构参量, 反映了局域原子结构中五次对称的程度, 即 GFA 越强的合金, 体系中的平均五次对称性越高.

均方位移 MSD 随时间的变化表征了原子的扩散行为, 表达式为 [32]

$$R_\alpha^2(t) = \frac{1}{N_\alpha} \left\langle \sum_{k=1}^{N_\alpha} |r_{\alpha k}(t+t_0) - r_{\alpha k}(t_0)|^2 \right\rangle, \quad (4)$$

其中 N_α 表示 α 类原子总数, $r_{\alpha k}(t+t_0)$ 和 $r_{\alpha k}(t_0)$ 分别表示 α 类 k 原子在 $t+t_0$ 时刻和 t_0 时刻的位移, $\langle \rangle$ 表示取平均. 根据 Einstein 扩散方程, 原子的自扩散系数 D 与 MSD 有如下关系 [32]:

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\langle R_\alpha^2(t) \rangle}{6t}, \quad (5)$$

当 $t \rightarrow \infty$ 时, MSD 曲线的斜率越小, 意味着体系扩散能力越低、黏度越大, 可以延缓晶化过程, 从而提高 GFA [32].

3 计算结果与讨论

3.1 C, Si, P 元素添加对 Co-Y-B 合金 GFA 的影响

本节通过计算 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{25}$, $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{C}_{10}$, $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{Si}_{10}$, $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{P}_{10}$ 4 种合金在液态 (2000 K)、过冷态 (1100 K)、玻璃转变温度 (800 K)、以及非晶态 (300 K) 的局域原子结构, 分析降温过程中局域原子结构的变化, 探究 C, Si, P 元素添加对 Co-Y-B

非晶合金 GFA 的影响, 并评价 4 种合金的 GFA.

3.1.1 对分布函数

温度在 2000 和 300 K 下 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{M}_{10}$ 合金中不同原子间的 PDF, 见图 2(a)–(f). PDF 第一峰对应的横坐标 r 代表原子间的键长, 键长的长短在一定程度上反映了原子间的相互作用. 原子对的两原子相同时, 键长越短说明两原子间吸引作用越强, 图中标记了主要的键长值. 比较键长的变化可以看出 C, Si, P 元素的加入使原子间的相互作用发生了变化.

从图 2 可以看出, 4 种合金在液态 2000 K 时的 PDF 都较为平滑, 表现出液体的典型特征. Co-B, B-B 键长基本不变, 分别为 1.991 Å 和 1.851 Å (图 2(a) 和 (b)). 由于原子半径 $\text{Si} > \text{P} > \text{C}$, 因此 Co-M 和 Y-M 键长也呈现相同的趋势, 即 $r_{\text{Co-Si}} > r_{\text{Co-P}} > r_{\text{Co-C}}$ 以及 $r_{\text{Y-Si}} > r_{\text{Y-P}} > r_{\text{Y-C}}$ (图 2(c) 和

(d)). 注意到 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{C}_{10}$ 和 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{Si}_{10}$ 合金的 $g_{\text{B-M}}(r)$ 第 1 峰十分微弱, 第 2 峰的峰值较高 (图 2(e)), 说明 B-C 和 B-Si 原子间的化学键较弱. 对比 3 种合金 $g_{\text{M-M}}(r)$ 第 1 峰的峰高 (图 2(d) 和 (f)), 发现 $g_{\text{C-C}}(r)$ 的峰值较高, 表明 C-C 原子间的吸引作用较强.

相较于液态, 4 种合金在非晶态 300 K 时 PDF 的第一峰都高且尖, 意味着短程序的形成, 同时键长大体呈现增加的趋势. PDF 的第 2 峰均存在不同程度的劈裂现象, 说明体系存在中程序结构. 图 2(b) 中可见, B-B 键长的变化较为明显, $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{Si}_{10}$, $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{P}_{10}$ (1.859 Å) $>$ $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{C}_{10}$ (1.837 Å) $>$ $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{25}$ (1.815 Å), 表明 B 含量较多的 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{25}$ 合金中 B-B 原子间的化学键较强, C, Si, P 元素添加后, $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{C}_{10}$ 合金中 B-B 原子间的吸引力强于其余两种合金. $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{C}_{10}$ 合金的 $g_{\text{Y-M}}(r)$

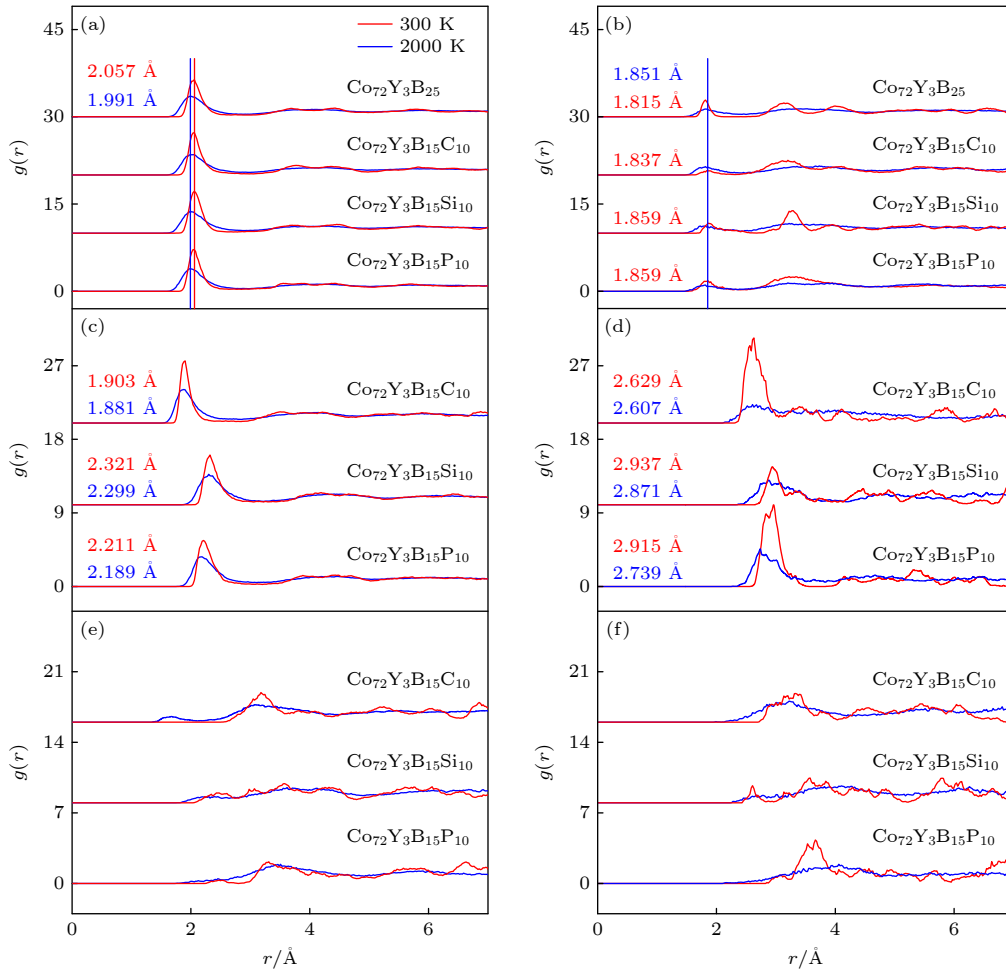


图 2 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{M}_{10}$ 合金的对分布函数 (a) Co-B; (b) B-B; (c) Co-M; (d) Y-M; (e) B-M; (f) M-M, 温度分别为 2000 和 300 K
Fig. 2. PDFs between different atoms (a) Co-B; (b) B-B; (c) Co-M; (d) Y-M; (e) B-M; (f) M-M of $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{M}_{10}$ alloys at 2000 and 300 K.

和 $g_{B-M}(r)$ 第一峰明显变高, 即 Y-C 和 B-C 原子间的吸引力增强 (图 2(d) 和 (e)). 从图 2(f) 中可知, C-C 和 P-P 原子间的吸引力较强, 而 Si-Si 原子间的吸引力较弱, 原子倾向在次近邻的位置连接.

3.1.2 配位数与化学短程序

为进一步反映原子间的相互作用, 计算了 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{M}_{10}$ 合金中各原子的总配位数 N_i 和偏配位数 N_{ij} , 以及两原子间的 Warren-Cowley 参数 a_{ij} , 温度分别为 2000 和 300 K, 如图 3 所示. 原子的总配位数 N_i 为该原子的偏配位数 N_{ij} 之和, 如 $N_{\text{Co}} = N_{\text{Co-Co}} + N_{\text{Co-Y}} + N_{\text{Co-B}} + N_{\text{Co-M}}$. 根据原子间的 N_{ij} 和 a_{ij} , 可以观察到 C, Si, P 元素的添加使原子间的吸引或排斥作用发生了显著变化.

从图 3(a) 和 (b) 中可见, 原子的配位数 $N_{\text{Co}} \sim 13$, $N_{\text{Y}} \sim 17$, $N_{\text{B}} \sim 9$, $N_{\text{C}} \sim 8 \sim 10$, $N_{\text{Si}} \sim 13$, $N_{\text{P}} \sim 10$, 所有原子的第一配位壳层都以 Co 原子为主. 2000 K 时, 随着 C, Si, P 元素的添加, $N_{\text{Co-Si}}$ 的值较大 ($N_{\text{Co-C}} = 0.81$, $N_{\text{Co-Si}} = 1.55$, $N_{\text{Co-P}} = 1.05$), 且 $a_{\text{Co-Si}}$ 为负值 ($a_{\text{Co-C}} = 0.39$, $a_{\text{Co-Si}} = -0.12$, $a_{\text{Co-P}} = 0.21$), 说明 Co-Si 原子间的吸引力较强, Co-C 和 Co-P 原

子间则呈现出排斥作用. 以 B 为中心原子的第一配位壳层中, $a_{\text{B-B}}$ 和 $a_{\text{B-M}}$ 均为正值 (图 3(c) 中橙色和绿色柱状线), 即 B-B 和 B-M 原子间都有很强的排斥作用, 说明 C, Si, P 元素倾向于在熔体中分散分布. 以 C, Si, P 为中心原子的第一配位壳层中, 由于 $a_{\text{C-C}} = -0.39$, $a_{\text{Si-Si}} = 0.81$, $a_{\text{P-P}} = -0.21$, 意味着 C-C 和 P-P 原子间具有较强的吸引作用, 而 Si-Si 原子间具有较强的排斥作用. 由此可见, $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{Si}_{10}$ 合金中 Co-Si 原子间的吸引作用会导致原子不易扩散, 而 B-Si 和 Si-Si 原子间的排斥作用有利于 Si 原子分散于熔体之中, 从而提高了合金熔体的热稳定性. 可将 Co 原子视为溶剂, B, C, Si, P 原子视为溶质, $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{Si}_{10}$ 合金中溶质原子间连接较少, 且溶质原子对溶剂原子有着一定的吸引力, 这种现象称为“溶质-溶质分离”[33]. $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{C}_{10}$ 和 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{P}_{10}$ 合金中 C-C 和 P-P 原子间的溶质-溶质分离性较差, 会导致体系的自由能变高, 促进了原子迁移, 不利于非晶态的形成和稳定.

300 K 时原子间的相互作用有较大的改变. 对比图 3(c) 和 (d), 观察到 $a_{\text{Y-M}}$ 值对应的红色柱状线

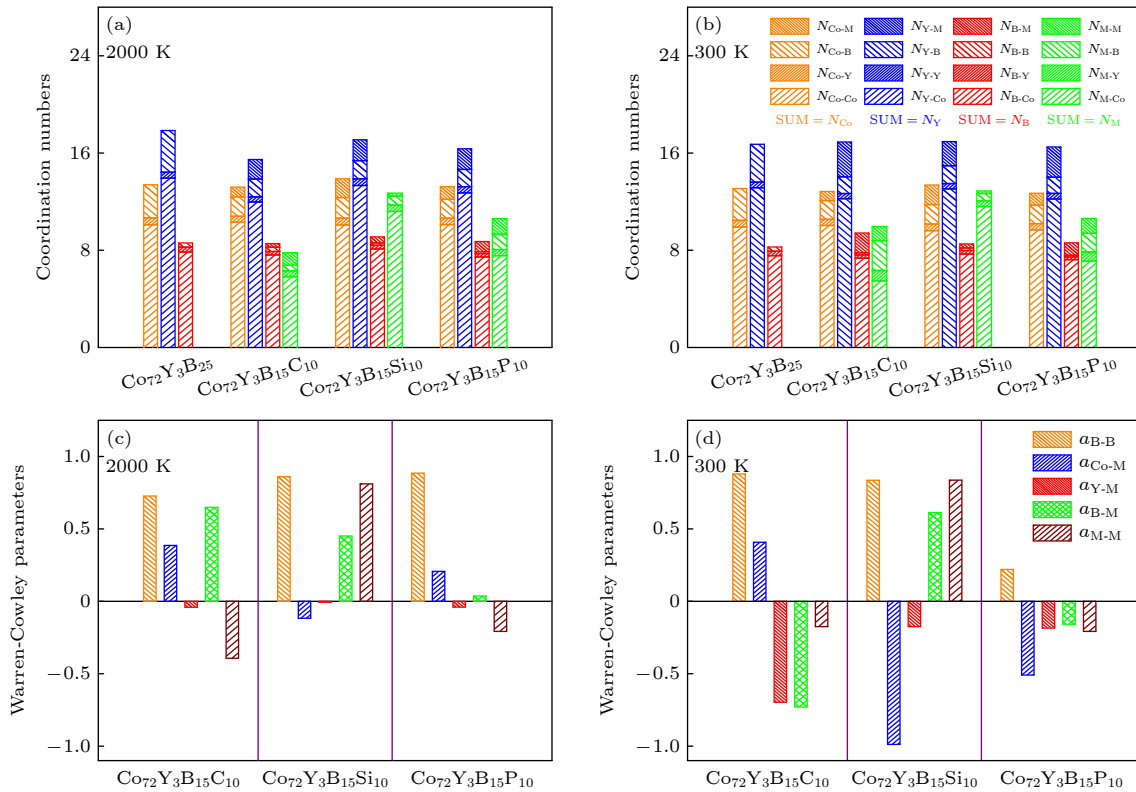


图 3 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{M}_{10}$ 合金的总配位数 N_i 、偏配位数 N_{ij} 和 Warren-Cowley 参数 a_{ij} , 温度分别为 2000 和 300 K

Fig. 3. The total coordination numbers (CNs) N_i , partial CNs N_{ij} , and Warren-Cowley parameters a_{ij} of $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{M}_{10}$ alloys at 2000 and 300 K.

减小, 表明 Y-M 原子间的吸引力增强. $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{C}_{10}$ 和 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{P}_{10}$ 合金中, $a_{\text{B-C}}$ 和 $a_{\text{B-P}}$ 值对应的绿色柱状线由正值变为负值, 即 B-C 和 B-P 原子间已从液态的排斥关系变为吸引关系, $a_{\text{C-C}} = -0.18$, $a_{\text{P-P}} = -0.16$, 说明 C 和 P 原子在非晶态时也倾向于自身聚集. $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{Si}_{10}$ 合金中 Si 和 Co 原子为中心的配位数相接近 ($N_{\text{Si}} = 12.88$, $N_{\text{Co}} = 13.37$), $a_{\text{Co-Si}}$ 由 -0.12 减小到 -0.99 , 意味着 Co-Si 原子间的吸引作用进一步增强, 而其余原子间的 N_{ij} 和 a_{ij} 与液态时相比变化不大. 配位数和化学短程序的结论与对分布函数的分析结果一致. 基于上述分析, 从溶质-溶质分离的角度, 由于 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{Si}_{10}$ 合金中 Co-Si 原子间的吸引作用较强, B-B, B-Si 和 Si-Si 键具有较好的溶质-溶质分离, 有利于提高

局域结构的稳定性和合金熔体的热稳定性, 因此推测其可能具有更大的 GFA.

3.1.3 Voronoi 多面体指数与局域五次对称性

为了进一步了解局域原子结构的类型和特征, 采用 Voronoi 多面体指数法分析了 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{M}_{10}$ 合金的构型, 同时计算了平均局域五次对称性 LFFS 参数 W . 图 4(a)–(e) 是 4 种合金在非晶态 300 K 时以 Co, B, C, Si, P 原子为中心的主要 Voronoi 多面体含量, 从图 4(a) 中可看出, Co 原子为中心的 Voronoi 多面体主要是 $\langle 0, 1, 10, 2 \rangle$, $\langle 0, 2, 8, 4 \rangle$, $\langle 0, 1, 10, 4 \rangle$, $\langle 0, 3, 6, 4 \rangle$, $\langle 0, 3, 6, 5 \rangle$ 和 $\langle 0, 2, 8, 5 \rangle$, 其中, $\langle 0, 1, 10, 2 \rangle$ 和 $\langle 0, 1, 10, 4 \rangle$ 代表畸变二十面体结构^[34], $\langle 0, 3, 6, 4 \rangle$ 和 $\langle 0, 3, 6, 5 \rangle$ 多面体代表畸变

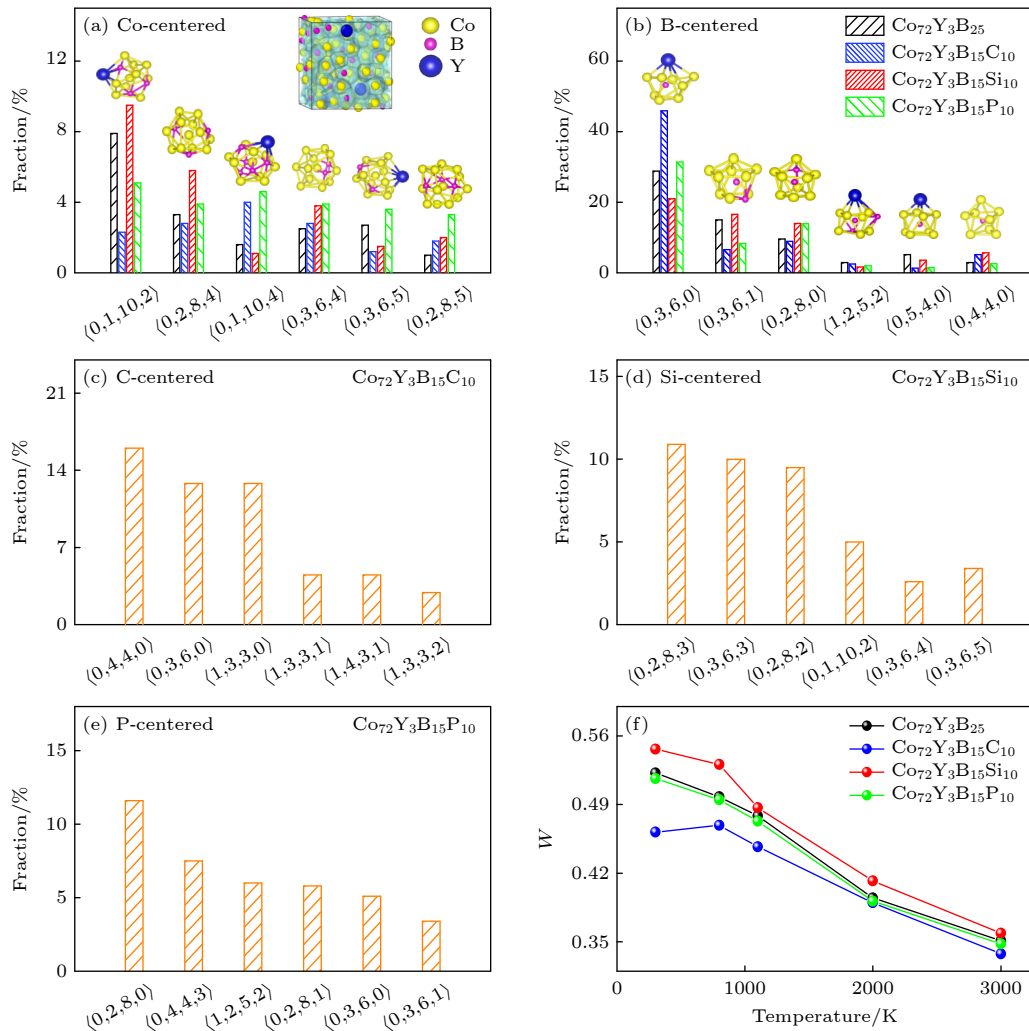


图 4 (a)–(e) 300 K 时 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{M}_{10}$ 合金中以 Co, B, C, Si, P 原子为中心的主要 Voronoi 多面体含量, (f) 4 种合金的 LFFS 参数 W 随温度的变化趋势

Fig. 4. (a)–(e) Fractions of major Voronoi polyhedral centered by Co, B, C, Si, and P atoms in $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{M}_{10}$ alloys at 300 K; (f) temperature dependence of LFFS parameters W during cooling for all of the alloys.

体心立方 bcc 结构^[35], 即 Co 原子周围的局域结构以畸变二十面体和 bcc 结构为主. B 原子为中心的主要 Voronoi 多面体类型是 $\langle 0, 3, 6, 0 \rangle$, $\langle 0, 3, 6, 1 \rangle$ 和 $\langle 0, 2, 8, 0 \rangle$ (图 4(b)), 分别对应冠状三棱柱、-畸变冠状三棱柱和 Archimedian 反三棱柱结构, 意味着 B 原子周围的局域结构以三棱柱结构为主. 对比图中 Voronoi 多面体含量可以发现, 4 种合金中 B 原子为中心的棱柱结构含量较高 (~50%), 因此可视为体系的主导结构.

$\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{C}_{10}$ 和 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{P}_{10}$ 合金中 B 原子为中心的棱柱结构的含量较高, 分别为 61.4% 和 53.6% (图 4(b)), 从图 4(c) 和 (d) 中可以看出 C 和 P 原子周围的局域结构与 B 原子相似, 可见 C 和 P 元素的加入提高了棱柱结构的含量. $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{Si}_{10}$ 合金中 Co 原子为中心的畸变二十面体结构的含量较多 (10.6%), 且 Si 原子周围的局域结构与 Co 原子相似, 说明 Si 元素的加入有利于提高畸变二十面体结构的含量. 二十面体结构具有五次对称性, 不利于周期性排列, 同时容易形成致密的堆积结构, 能够起到抑制晶体相形核的作用, 有利于提高 GFA^[31]. $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{Si}_{10}$ 合金中较高含量的畸变二十面体结构可能使其具有更高的 GFA.

考虑到畸变二十面体结构不是体系中主导的多面体结构, 仅用畸变二十面体结构含量变化来评价 GFA 不一定可靠. 因而采用平均局域五次对称性 LFFS 参数 W 进一步描述非晶合金体系的局域结构特征. 图 4(f) 是 LFFS 参数 W 随温度的变化趋势, 可以看出 4 种合金的 W 随着温度的降低快速增大, 其中, $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{P}_{10}$ 与 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{25}$ 合金的 W 值十分接近, 但略低于 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{25}$ 合金, 而 Co_{72}

$\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{C}_{10}$ 合金的 W 值最低, 说明较多的棱柱结构会降低局域结构的五次对称性, 对合金的 GFA 会造成一定的不利影响. $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{Si}_{10}$ 合金的 W 值最高, 意味着加入 Si 元素有助于提高合金的五次对称性和 GFA.

3.1.4 均方位移

为表征合金熔体的动力学行为, 计算了体系的 MSD. 图 5 是 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{M}_{10}$ 合金在温度 2000 K 和 1100 K 下 MSD 随时间的变化曲线, 横纵坐标均以 log-log 的形式表示. 对于 4 种合金, MSD 曲线包括 3 个阶段: 1) 首先, 在极短的时间内接近线性增长, 此时原子可以在团簇内自由移动; 2) 随着时间的延长, 原子受近邻原子的影响导致 MSD 曲线的上升变得缓慢, 称之为“笼子效应”^[36]. 此阶段出现较为明显的平台, 说明原子需要更长的时间才能自由扩散; 3) 最后 MSD 曲线又呈现线性增长, 此时原子冲破“笼子”的束缚进行自由扩散. 从图中可见, 液态 2000 K 时 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{P}_{10}$ 合金中原子的扩散能力最小, 符合原子扩散速率与质量的关系. 在过冷态 1100 K 时, 4 种合金 MSD 曲线中第 2 阶段的平台更为明显, 说明原子的扩散能力随温度的降低而降低. MSD 曲线在最后的线性增长阶段, $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{C}_{10}$ 合金的斜率最大, 表明其原子的扩散能力较强. $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{Si}_{10}$ 合金的斜率最小、原子的扩散能力较低, 可以起到延缓结晶过程、提高 GFA 的作用.

综上所述, 对局域原子结构的分析表明, C, Si, P 元素的加入使合金的局域原子结构发生了变化. $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{C}_{10}$ 和 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{P}_{10}$ 合金中 B/C-C 和

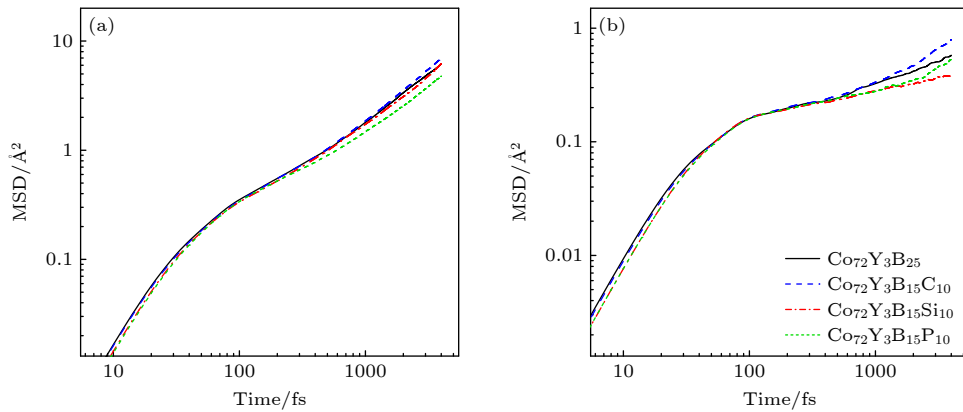


图 5 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{M}_{10}$ 合金的均方位移随时间的变化趋势 (a) $T = 2000$ K, (b) $T = 1100$ K

Fig. 5. Time dependence of MSD in $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{M}_{10}$ alloys at (a) $T = 2000$ K and (b) $T = 1100$ K.

B/P-P 原子间的溶质分离性较差, 体系中棱柱结构的含量较高, 在过冷态时原子的扩散能力较强. $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{Si}_{10}$ 合金中 Co-Si 原子间的吸引力较强, 溶质原子 B/Si-Si 间具有较好的分离性, 体系的局域结构呈现较高的五次对称性, 畸变二十面体结构的含量较高, 且体系在过冷态时具有较大的黏度. 因此, Si 元素的添加可以显著提高合金的 GFA, 而 C 和 P 元素的添加均不利于提高 GFA, 且 C 元素的添加会显著削弱 GFA. 4 种合金的 GFA 按照 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{Si}_{10} > \text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{25} > \text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{P}_{10} > \text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{C}_{10}$ 的顺序依次递减. Fe 基非晶合金的相关研究结果也从侧面验证了上述结果的准确性: Pang 等 [8] 在 $\text{Fe}_{43}\text{Cr}_{16}\text{Mo}_{16}\text{C}_{15}\text{B}_{10}$ 合金中分别用 C 和 P 替代原子质量分数为 5% 的 B 元素, 合金的临界直径由 2.7 mm 分别减小至 1.2 和 2.2 mm; Shen 等 [9] 研究表明, 用原子质量分数为 2.5% 的 Si 元素替代 $\text{Fe}_{77}\text{Ga}_3\text{P}_{12}\text{C}_4\text{B}_4$ 合金中的 P 元素, 合金的临界直径由 0.025 mm 提高至 2.5 mm.

3.2 C, Si, P 元素添加对 Co-Y-B 合金磁性能的影响

本节通过计算 4 种合金的总磁矩、总电子态密度, 探究 C, Si, P 元素添加对 Co-Y-B 非晶合金磁性能的影响. 表 1 是 300 K 时 4 种合金总磁矩以及各元素的磁矩. $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{25}$ 的总磁矩为 75.179 μ_B , 与 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{25}$ 非晶合金的实验值 66.336 μ_B 较为接近 [19], 一定程度验证了计算结果的可靠性. 在 4 种合金中, Y 和 C, Si, P 元素对体系磁矩的影响十分相似, 其中 Y 原子的平均磁矩为 -0.10 μ_B , B 原子的平均磁矩为 -0.07—-0.06 μ_B , C, Si 和 P 原子的平均磁矩为 -0.04—-0.02 μ_B . $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{25}$, $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{C}_{10}$, $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{Si}_{10}$, $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{P}_{10}$ 合金的总磁矩分别为 75.179, 69.645, 72.722, 68.969 μ_B . 总磁矩的变化可以通过磁价理论进行解释, 根据磁价理论 [37], 体系的总磁矩与组元的磁价成正比. 由于 B, C, Si, P 的磁价分别为 -3, -4, -4, -5, 因此

M 元素的加入会导致合金总磁矩的减小, 其中 P 元素的添加对总磁矩的削弱作用相对较强, 而 C 和 Si 元素的添加对总磁矩的削弱作用较弱.

图 6 是 4 种合金的电子态密度, 可以从电子结构的角度理解 C, Si, P 元素添加对 Co-Y-B 合金磁性能和 GFA 的影响. 自旋向上和自旋向下电子的不对称分布导致 4 种合金呈现铁磁性的特征. 图 6(a) 是 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{25}$ 合金的电子态密度, 可看出总态密度主要是 Co-3d 轨道电子的贡献, 也是体系磁性的主要来源. 1 eV $< E - E_{\text{Fermi}} < 6$ eV 区间主要是 Y-4d 轨道电子的贡献. 费米能级附近存在隙能隙, 说明体系具有共价特性, 是 Co-3d, Y-4d 和 B-2p 轨道间的杂化导致. C, Si, P 元素添加后, 从图 6(b)—(d) 可以看出, $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{C}_{10}$, $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{Si}_{10}$ 与 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{P}_{10}$ 合金总态密度的整体形状相似, 体系磁性的少量贡献也来源于 C-2p, Si-3p 以及 P-3p 轨道电子. P-3p 轨道有 3 个电子, 而 C-2p 和 Si-3p 轨道只有 2 个电子, 因此 P 元素的添加会使更多 p 轨道电子转移到 Co-3d 轨道的空穴中, 导致 Co 原子磁矩减小, 进而使总磁矩减小. 此外, 由于 B, C, Si, P 的价电子数分别为 3, 4, 4, 5, 因此添加 C, Si, P 元素导致费米能级向高能级方向移动. 其中, $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{Si}_{10}$ 合金费米能级附近自旋向下的电子处于峰谷 (图 6(c)), 意味着局域原子结构的稳定性较高. 图 6(e) 是 4 种合金在费米能级附近的电子态密度, 观察到费米能级处的电子态密度 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{P}_{10} > \text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{C}_{10} > \text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{25} > \text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{Si}_{10}$, 即 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{Si}_{10}$ 合金在费米能级处的电子状态较少, 说明体系中原子键的杂化程度较高 [38]. 结合 3.1 节的结果可知, $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{Si}_{10}$ 合金中 Co-3d 与 Si-3p 轨道电子较强的相互作用不仅提高了局域原子结构的稳定性, 而且增强了磁交换耦合作用, 进而使合金表现出较好的 GFA, 同时也保持较高的磁性能.

表 1 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{M}_{10}$ 合金的总磁矩和各元素的磁矩 (单位: μ_B)

Table 1. The total magnetic moments of $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{M}_{10}$ alloys and the local magnetic moments for different elements (unit: μ_B).

Alloys	μ_{total}	μ_{Co}	μ_{Y}	μ_{B}	μ_{C}	μ_{Si}	μ_{P}
$\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{25}$	75.179	1.086	-0.133	-0.063	—	—	—
$\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{C}_{10}$	69.645	1.005	-0.097	-0.067	-0.042	—	—
$\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{Si}_{10}$	72.722	1.053	-0.140	-0.059	—	-0.037	—
$\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{P}_{10}$	68.969	0.977	-0.097	-0.057	—	—	-0.023

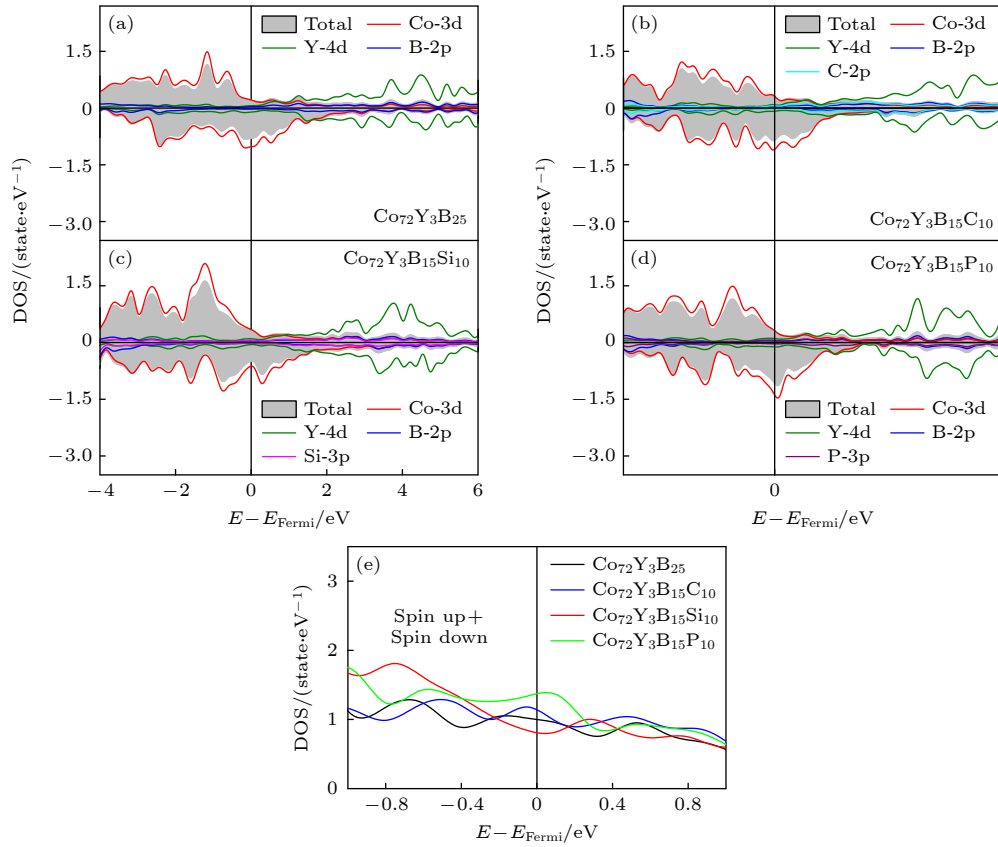


图 6 (a) $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{25}$, (b) $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{C}_{10}$, (c) $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{Si}_{10}$, (d) $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{P}_{10}$ 合金的总电子态密度和分波态密度, (e) 4 种合金在费米能级附近的总电子态密度

Fig. 6. The total density of state (DOS) and partial DOS for (a) $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{25}$, (b) $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{C}_{10}$, (c) $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{Si}_{10}$, (d) $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{P}_{10}$ alloys, and (e) TDOSs for all of the alloys near the Fermi level.

4 结 论

本文使用 AIMD 方法研究了 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{25}$, $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{C}_{10}$, $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{Si}_{10}$ 以及 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{P}_{10}$ 合金的液态及非晶态的局域原子结构, 探究了 C, Si, P 元素添加对 Co-Y-B 非晶合金的 GFA 以及磁性能的影响。

结果表明, 4 种合金从液态到非晶态的过程中, 短程有序化程度逐渐增强. Co 和 Si 原子为中心的局域结构以畸变二十面体结构为主, B, C 和 P 原子为中心的局域结构以棱柱结构为主. $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{C}_{10}$ 和 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{P}_{10}$ 合金中较高的棱柱结构含量、B/C-C 和 B/P-P 原子间较弱的溶质分离性、以及过冷态时较强的扩散能力会对 GFA 造成不利影响. $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{Si}_{10}$ 合金中畸变二十面体结构的含量较高, Co-Si 原子间吸引作用较强, B/Si-Si 原子间具有良好的分离性, 体系在过冷态时具有较大的黏度, 有利于提高合金的 GFA. 因此, 添加 Si 元素

会显著提升合金的 GFA, 添加 C 和 P 元素则不利于 GFA 的提高, 且 C 元素的加入会显著降低 GFA. 4 种合金的 GFA 按照 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{Si}_{10} > \text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{25} > \text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{P}_{10} > \text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{C}_{10}$ 的顺序依次递减. 总磁矩和电子态密度的计算结果表明, 4 种合金的磁性均来源于 Co-3d 轨道电子, C, Si, P 元素的添加会减小合金的总磁矩, 并按照 $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{25} > \text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{Si}_{10} > \text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{C}_{10} > \text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{P}_{10}$ 的顺序依次下降. Si 元素的加入对总磁矩的削弱作用较弱, 归因于 Co-3d 与 Si-3p 电子间的强相互作用增强了磁交换耦合作用。

感谢大连理工大学超级计算中心支持。

参考文献

- [1] Wang W H, Dong C, Shek C H 2004 *Mater. Sci. Eng. R* **44** 45
- [2] Inoue A, Shen B L, Koshihara H, Kato H, Yavari A R 2003 *Nat. Mater.* **2** 661

- [3] Wang Q Q, Zhang G L, Zhou J, Yuan C C, Shen B L 2020 *J. Alloys Compd.* **820** 153105
- [4] Taghvaei A H, Stoica M, Prashanth K G, Eckert J 2013 *Acta Mater.* **61** 6609
- [5] Wang W H 2007 *Prog. Mater. Sci.* **52** 540
- [6] Lu Z P, Liu C T 2004 *J. Mater. Sci.* **39** 3965
- [7] Zhao Y M, Li X, Liu X B, Bi J Z, Wu Y, Xiao R J, Li R, Zhang T J 2021 *Mater. Sci. Technol.* **86** 110
- [8] Pang S J, Zhang T, Asami K, Inoue A 2002 *Acta Mater.* **50** 489
- [9] Shen B L, Inoue A 2002 *Mater. Trans.* **43** 1235
- [10] Jiang J W, Li Q, Duan H M, Li H X 2017 *Comput. Mater. Sci.* **130** 76
- [11] Zhang W, Li Q, Duan H M 2015 *J. Appl. Phys.* **117** 104901
- [12] Hibino T, Bitoh T 2017 *J. Alloys Compd.* **707** 82
- [13] Wang A D, Zhao C L, He A N, Men H, Chang C T, Wang X M 2016 *J. Alloys Compd.* **656** 729
- [14] Guo G Q, Yang L, Wu S Y, Zeng Q S, Sun C J, Wang Y G 2016 *Mater. Des.* **103** 308
- [15] Ran Y Z, Li Y H, Ma S, Lai L Q, Chen J, Wang X D, Jiang L, Yao M, Zhang W 2022 *J. Alloys Compd.* **899** 163326
- [16] Yu Q, Wang X D, Lou H B, Cao Q P, Jiang J Z 2016 *Acta Mater.* **102** 116
- [17] Guan P F, Fujita T, Hirata A, Liu Y H, Chen M W 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 175501
- [18] Chen H, Zhou S X, Dong B S, Jin J J, Liu T Q, Guan P F 2020 *J. Alloys Compd.* **819** 153062
- [19] Liang X Y, Li Y H, Bao F, Zhu Z W, Zhang H F, Zhang W 2021 *Intermetallics* **132** 107135
- [20] Kohn W, Sham L J 1965 *Phys. Rev.* **140** 1133
- [21] Blöchl P E 1994 *Phys. Rev. B* **50** 17953
- [22] Kresse G, Hafner J 1993 *Phys. Rev. B* **47** 558
- [23] Wang Y, Perdew J P 1991 *Phys. Rev. B* **44** 13298
- [24] Hoover W G 1985 *Phys. Rev. A* **31** 1695
- [25] Nosé S 1984 *J. Chem. Phys.* **81** 511
- [26] Spreiter Q, Walter M 1999 *J. Comput. Phys.* **152** 102
- [27] Hamidreza H, Rossitza P 2018 *ACS Catal.* **8** 11773
- [28] Cheng Y Q, Ma E 2011 *Prog. Mater. Sci.* **56** 379
- [29] Cowley J M 1950 *J. Appl. Phys.* **21** 24
- [30] Finney J L 1977 *Nature* **266** 309
- [31] Hu Y C, Li F X, Li M Z, Bai H Y, Wang W H 2015 *Nat. Commun.* **6** 8310
- [32] Zhao Y F, Lin D Y, Chen X H, Liu Z K, Hui X D 2014 *Acta Mater.* **67** 266
- [33] Pont M, Puzniak R, Rao K V 1992 *J. Appl. Phys.* **71** 5585
- [34] Wang Q, Zhai B, Wang H P, Wei B 2021 *J. Appl. Phys.* **130** 185103
- [35] Hirata A, Hirotsu Y, Ohkubo T, Hanada T, Bengus V Z 2006 *Phys. Rev. B* **74** 214206
- [36] Pang H, Jin Z H, Lu K 2003 *Phys. Rev. B* **67** 094113
- [37] Williams A R, Moruzzi V L, Malozemoff A P, Terakura K 1983 *IEEE Trans. Magn.* **19** 1983
- [38] Yuan C C, Yang F, Xi X K, Shi C L, Moritz H D, Li M Z, Hu F, Shen B L, Wang X L, Meyer A, Wang W H 2020 *Mater. Today* **32** 26

Mechanism analysis of metalloid elements affecting amorphous forming ability and magnetic properties of Co-Y-B alloy^{*}

Ma Shuang Hao Wei-Ye Wang Xu-Dong Zhang Wei[†] Yao Man[‡]

(School of Materials Science and Engineering, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China)

(Received 4 May 2022; revised manuscript received 25 July 2022)

Abstract

Co-based metallic glass (MG) is a new class of soft magnetic material and has promising applications in high-frequency fields due to its high magnetic permeability and low coercivity. However, this kind of MG has poor glass-formation ability (GFA) and relatively low saturated magnetic flux density, so its application scope is limited. The atomic size of metalloid element M (B, C, Si, and P) is small, which can easily enter into the gap between atoms, and there is a relatively large negative enthalpy of mixing between metalloid element and metal element. Therefore, alloying with metalloid element M is an effective method to improve the GFA while maintaining superior soft magnetic properties for Co-based MG. In this work, the formation process of $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{M}_{10}$ MG is simulated by *ab initio* molecular dynamics (AIMD) method, and the effects of the addition of metalloid elements C, Si, P on the GFA and magnetic properties of Co-Y-B MGs are investigated. It is devoted to analyzing the relationship between local atomic structure and property at an atomic level.

According to the results of the characterization parameters of local atomic structure (pair distribution function, coordination numbers, chemical short-range order, Voronoi polyhedron index, local five-fold symmetry, and mean square displacement), it is found that the GFA of the four alloys is different due to their different local atomic structures. Both $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{C}_{10}$ alloy and $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{P}_{10}$ alloy possess a higher fraction of prism structure, weaker solute segregation between B/C-C and B/P-P atoms, higher atomic diffusivity in the supercooled state (1100 K), and hence weakening the GFA of the alloys. The $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{Si}_{10}$ alloy has a higher fraction of icosahedral-like structure, stronger attraction between Co-Si atoms and the solute segregation between B/Si-Si atoms, lower atomic diffusivity in the supercooled state, thereby increasing the GFA. Therefore, the addition of Si is beneficial for enhancing the GFA, while the addition of C or P will reduce the GFA, that is, the GFA of the four alloys decreases in the order of $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{Si}_{10} > \text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{25} > \text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{P}_{10} > \text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{C}_{10}$. In terms of magnetic properties, with the addition of C, Si, P elements, the total magnetic moment of $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{M}_{10}$ (M = B, C, Si, P) alloy decreases in the following order: $\text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{25} > \text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{Si}_{10} > \text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{C}_{10} > \text{Co}_{72}\text{Y}_3\text{B}_{15}\text{P}_{10}$. The stronger p-d orbital hybridization between Co-Si atoms enhances the ferromagnetic exchange interaction, leading the total magnetic moment to be less affected by Si addition.

Keywords: Co-based metallic glasses, *ab initio* molecular dynamics simulations, glass-forming ability, magnetic property

PACS: 81.05.Kf, 61.43.Dq, 71.15.Pd

DOI: 10.7498/aps.71.20220873

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 51871039).

[†] Corresponding author. E-mail: wzhang@dlut.edu.cn

[‡] Corresponding author. E-mail: yaoman@dlut.edu.cn

类金属元素影响Co-Y-B合金非晶形成能力和磁性能的机制分析

马爽 郝玮晔 王旭东 张伟 姚曼

Mechanism analysis of metalloid elements affecting amorphous forming ability and magnetic properties of Co-Y-B alloy

Ma Shuang Hao Wei-Ye Wang Xu-Dong Zhang Wei Yao Man

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 228102 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20220873

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220873>

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

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>

分子动力学模拟冷却速率对非晶合金结构与变形行为的影响

Molecular dynamics simulation of effect of cooling rate on the microstructures and deformation behaviors in metallic glasses

物理学报. 2020, 69(11): 116101 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191781>

$\text{La}_{65}\text{X}_{35}$ (X=Ni,Al)非晶合金原子结构的第一性原理研究

First principle study on atomic structure of $\text{La}_{65}\text{X}_{35}$ (X=Ni, Al) metallic glasses

物理学报. 2018, 67(17): 178101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180992>

非晶态物质原子局域连接度与弛豫动力学

Linking local connectivity to atomic-scale relaxation dynamics in metallic glass-forming systems

物理学报. 2020, 69(6): 066101 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20191870>

基于第一性原理分子动力学的填充方钴矿热输运性质及微观过程的研究

Thermal transport and microscopic dynamics in filled skutterudite $\text{YbFe}_4\text{Sb}_{12}$ studied by ab initio molecular dynamics simulation

物理学报. 2018, 67(1): 016301 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20171406>

镁中位错和非晶作用机制的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of mechanism of interaction between dislocation and amorphism in magnesium

物理学报. 2022, 71(14): 143101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212318>