

**О ВЯЗКОСТИ РАСПЛАВОВ (Fe<sub>0.75</sub>B<sub>0.15</sub>Si<sub>0.10</sub>)-(Ta, Nb)**

<sup>1,2,3</sup>СТЕРХОВА И. В., <sup>1,2,3</sup>КАМАЕВА Л. В., <sup>2</sup>БЛИНОВА А. И., <sup>1</sup>ЛАДЬЯНОВ В. И.,  
<sup>3</sup>ЩЕЛКАЧЕВ Н. М.

<sup>1</sup> Удмуртский федеральный исследовательский центр Уральского отделения РАН,  
426067, г. Ижевск, ул. Т. Барамзиной, 34

<sup>2</sup> Удмуртский государственный университет, 426034, г. Ижевск, ул. Университетская, 1

<sup>3</sup> Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН,  
108840, Троицк, Москва, Калужское шоссе, стр. 14

**АННОТАЦИЯ.** В работе проведено исследование кинематической вязкости расплавов (Fe<sub>0.75</sub>B<sub>0.15</sub>Si<sub>0.10</sub>)<sub>99</sub>Ta<sub>0.5</sub>Nb<sub>0.5</sub> и (Fe<sub>0.75</sub>B<sub>0.15</sub>Si<sub>0.10</sub>)<sub>97.5</sub>Ta<sub>0.25</sub>Nb<sub>2.25</sub>. Показано, что температурные зависимости вязкости монотонны и хорошо описываются уравнением Аррениуса. Установлено, что при комплексном легировании расплава Fe<sub>75</sub>B<sub>15</sub>Si<sub>10</sub> Ta и Nb существенное влияние на вязкость оказывает Nb. Исследование структуры расплавов (Fe<sub>0.75</sub>B<sub>0.15</sub>Si<sub>0.10</sub>)<sub>99</sub>Ta<sub>0.5</sub>Nb<sub>0.5</sub> и (Fe<sub>0.75</sub>B<sub>0.15</sub>Si<sub>0.10</sub>)<sub>97.5</sub>Ta<sub>0.25</sub>Nb<sub>2.25</sub> методом первопринципной молекулярной динамики показало, что такое поведение вязкости обусловлено изменением химического ближнего порядка в окружении атомов примеси Ta и Nb.

**КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА:** расплавы Fe-B-Si-(Ta, Nb), объемные аморфные сплавы, кинематическая вязкость, температурные зависимости вязкости.

**ВВЕДЕНИЕ**

Система Fe-B-Si является основой большинства промышленно важных аморфных и нанокристаллических материалов с высокими механическими и магнитными свойствами [1 – 3]. Сплавы этой системы хорошо аморфизуются в условиях сверхбыстрой закалки из жидкой фазы [4]. Однако максимальная толщина аморфных лент не превышает 270 мкм [4] и наблюдается для сплава состава Fe<sub>75</sub>B<sub>15</sub>Si<sub>10</sub> близкого к эвтектическому. Микролегирование этого сплава позволяет существенно повысить его стеклообразующую способность. На основании эмпирических критериев объемной аморфизации A. Inoue [5] была разработана группа сплавов на основе Fe<sub>75</sub>B<sub>15</sub>Si<sub>10</sub>, легированного тугоплавкими элементами, такими как Nb, Zr, Hf, Y, Ta [4, 6 – 9]. Сплавы этой группы относятся к хорошим магнитомягким материалам с высокими механическими свойствами [4, 6 – 9]. При этом концентрация легирующих элементов составляет всего несколько ат.%. Так для сплавов (Fe<sub>0.75</sub>B<sub>0.15</sub>Si<sub>0.1</sub>)<sub>99</sub>Zr<sub>1</sub> и (Fe<sub>0.75</sub>B<sub>0.15</sub>Si<sub>0.1</sub>)<sub>96</sub>Nb<sub>4</sub> максимальная толщина аморфного слоя составляет соответственно 0.75 и 1.5 мм [4, 9]. Кроме того, в [8] отмечается, что легирование Ta способствует повышению как термической стабильности, так и магнитных и механических свойств быстрозакаленных лент сплавов на основе Fe-B-Si. При этом в четверных системах появляются стабильные фазы типа τ-фаз (Fe-B-Si-Nb) и фаз Лавеса (Fe-B-Si-Ta), которые являются фазами-стеклообразователями. Дальнейшее повышение стеклообразующей способности этих расплавов возможно за счет комплексного легирования, при котором возрастает вероятность образования в системе метастабильных фаз со сложной кристаллической структурой, что повышает конкуренцию при зарождении кристаллических фаз и способствует хорошей объемной аморфизуемости.

Ранее нами были проведены исследования вязкости расплавов (Fe<sub>0.75</sub>B<sub>0.15</sub>Si<sub>0.10</sub>)<sub>100-x</sub>Ta<sub>x</sub> и (Fe<sub>0.75</sub>B<sub>0.15</sub>Si<sub>0.10</sub>)<sub>100-x</sub>Nb<sub>x</sub> (x = 0 – 4 ат.%) [10], которые показали, что на концентрационных зависимостях наблюдаются локальные максимумы вязкости вблизи 1 ат.% Ta и 3 ат.% Nb, соответственно. При этом небольшие добавки Ta не влияют на величину вязкости расплавов

Fe-B-Si, а Nb увеличивают ее значительно. Такое поведение вязкости, как показано в [10], обусловлено различием в химическом взаимодействии атомов Ta и Nb в расплавах Fe-B-Si. Как известно, кинематическая вязкость является важным физико-химическим свойством металлических расплавов, которое чувствительно к структурным изменениям в жидкой фазе. Кроме того, вязкость выступает в качестве одного из основных технологических параметров металлургического процесса. При аморфизации методами закалки из расплава представляет интерес не только оценка абсолютных значений вязкости, но и исследование поведения ее значений в широком температурно-концентрационном интервале. Это позволяет определить оптимальные составы сплавов и температуры закалки расплава, обеспечивающие высокую аморфизуемость. Учитывая, что наибольшие значения вязкости для расплавов  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{100-x}\text{Ta}_x$  и  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{100-x}\text{Nb}_x$  ( $x = 0 - 4$  ат.%) наблюдаются вблизи 1 ат.% Ta и 3 ат.% Nb соответственно [10], то для анализа комплексного легирования сплава Fe-B-Si танталом и ниобием были выбраны сплавы с суммарным количеством легирующего элемента 1 ат.% и 2.5 ат.% –  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{99}\text{Ta}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}$  и  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{97.5}\text{Ta}_{0.25}\text{Nb}_{2.25}$ .

В связи с этим в данной работе были проведены исследования вязкости  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{99}\text{Ta}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}$  и  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{97.5}\text{Ta}_{0.25}\text{Nb}_{2.25}$ .

## МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Исследуемые сплавы  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{99}\text{Ta}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}$  и  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{97.5}\text{Ta}_{0.25}\text{Nb}_{2.25}$  получали сплавлением соответствующих пропорций заранее выплавленных лигатур  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{99}\text{Ta}_1$ ,  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{99}\text{Nb}_1$ ,  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{97}\text{Nb}_3$  в вакуумной печи при 1650 °C в течение 30 минут.

Кинематическую вязкость ( $\nu$ ) измеряли методом затухающих крутильных колебаний цилиндрического тигля с расплавом в варианте Швидковского Е.Г. [11] на автоматизированной установке [12]. Выбор режимов измерения вязкости исследованных расплавов проводили с учетом ранее полученных результатов об особенностях измерения вязкости расплавов  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{100-x}\text{Ta}_x$  и  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{100-x}\text{Nb}_x$  [10, 13]. Как показано в [10, 13] при повышении концентрации легирующего элемента Ta или Nb в расплавах Fe-B-Si более 1 или 1.5 ат.%, соответственно, наблюдаются седиментационные процессы, которые оказывают влияние на характер температурной зависимости декремента затухания. Поэтому для исключения проявления седиментационных процессов и получения равновесных температурных зависимостей кинематической вязкости измерения проводили в следующих режимах: 1) нагрев расплава после плавления до 1680 °C; 2) охлаждение от 1680 °C до температуры начала кристаллизации тугоплавких боридов, формирование которых приводит к седиментации; 3) измерение равновесных политерм вязкости в режимах нагрева и последующего охлаждения [10, 13]. Измерения проводили в корундовых тиглях в защитной атмосфере очищенного гелия в режимах ступенчатого нагрева и последующего охлаждения, шаг по температуре составлял 30 °C, время выдержки на каждой температуре перед началом измерений – 10 минут. Для предотвращения неконтролируемого влияния оксидной пленки измерения проводили в условиях двух торцевых поверхностей касания расплава с тиглем. В качестве второй торцевой поверхности использовали цилиндрическую крышку из  $\text{Al}_2\text{O}_3$  [14]. Методика измерений и расчета вязкости описана подробно в [12]. Для доверительной вероятности 0.95 в исследованном температурном интервале ошибка определения абсолютных значений вязкости в единичном эксперименте составляет 1.5 % при общей ошибке не более 4 %.

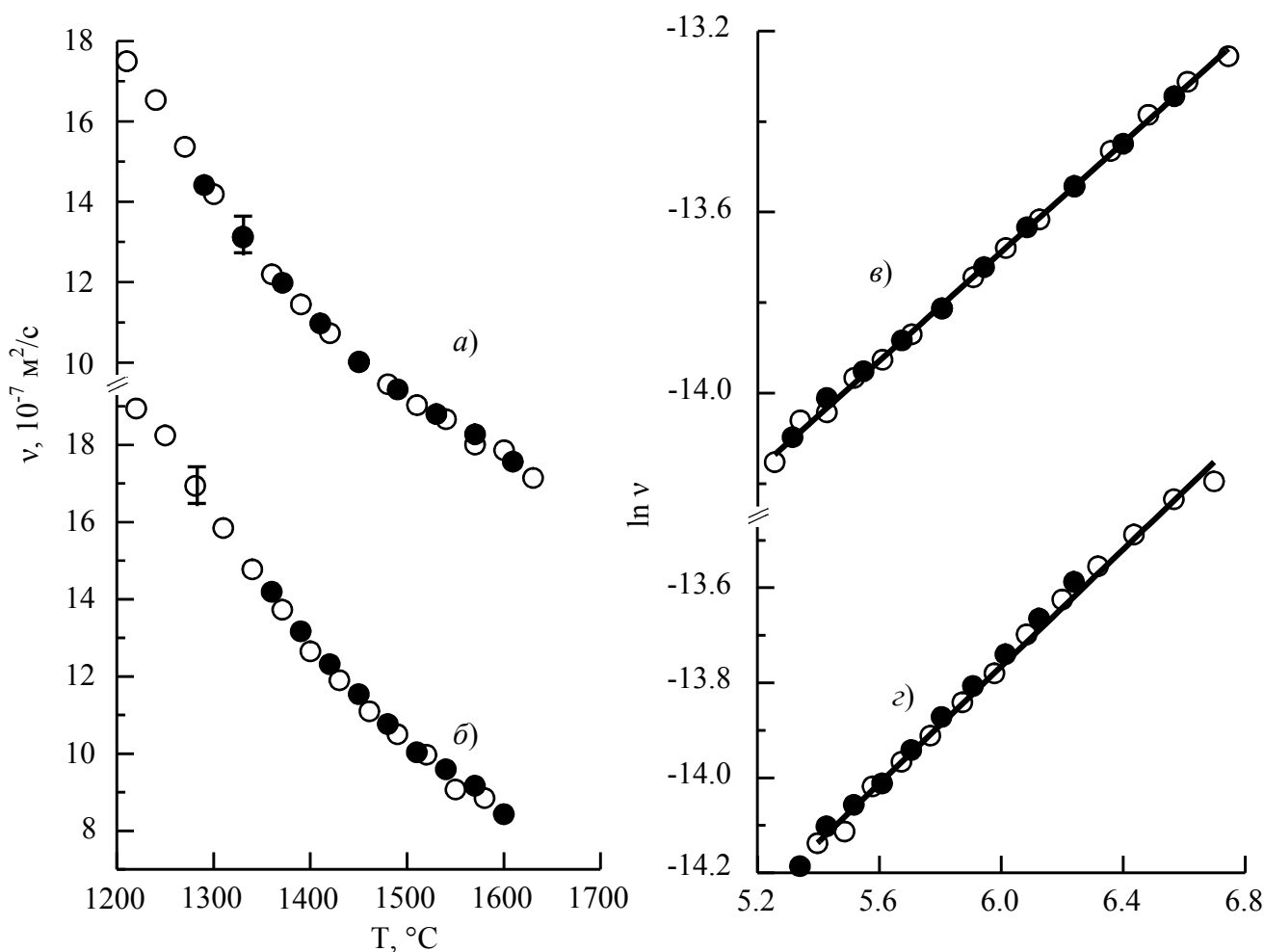
Структурные характеристики расплавов определялись с помощью первопринципного молекулярно-динамического моделирования с помощью программы моделирования Vienna ab initio (VASP) [15]. Для расчетов использовались псевдопотенциалы типа PAW и обменно-корреляционный функционал в градиентном приближении Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) [16, 17].

## ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 1 представлены температурные зависимости вязкости расплавов  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{99}\text{Ta}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}$  и  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{97.5}\text{Ta}_{0.25}\text{Nb}_{2.25}$  в координатах  $\nu(T)$  и  $\ln \nu(1/T)$ . Видно, что политермы вязкости, как в режиме нагрева, так и охлаждения являются монотонными зависимостями, которые хорошо описываются уравнением Аррениуса:

$$\nu = A_\nu \exp\left\{\frac{E_\nu}{RT}\right\},$$

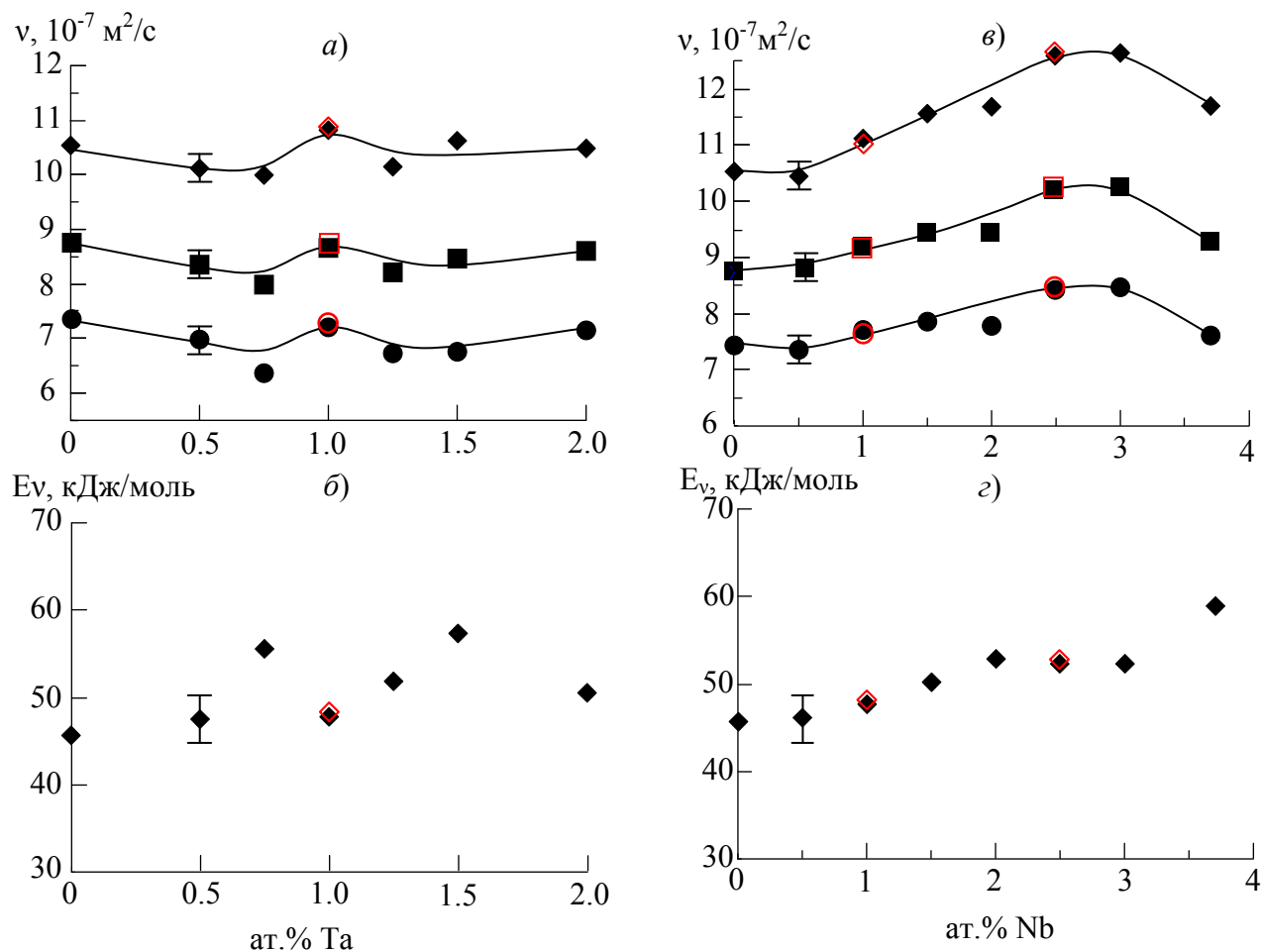
где  $A_\nu$  – постоянная,  $E_\nu$  – энергия активации вязкого течения. Параметры аппроксимирующих уравнений для температурных зависимостей вязкости расплавов  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{99}\text{Ta}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}$  и  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{97.5}\text{Ta}_{0.25}\text{Nb}_{2.25}$  составляют  $E_\nu = 50.1$  кДж/моль,  $A_\nu = -17.2018$  и  $E_\nu = 52.7$  кДж/моль,  $A_\nu = -17.3694$  соответственно. Полученные результаты сравнили с результатами проведенных ранее исследований температурных и концентрационных зависимостей вязкости расплавов  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{100-x}\text{Ta}_x$  и  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{100-x}\text{Nb}_x$  ( $x = 0 - 4$ ) (рис. 2).



**Рис. 1.** Температурные зависимости кинематической вязкости расплавов  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{99}\text{Ta}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}$  (а, в) и  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{97.5}\text{Ta}_{0.25}\text{Nb}_{2.25}$  (б, г) в режимах нагрева (●) и охлаждения (○)

На рис. 2 представлены концентрационные зависимости вязкости и энергии активации вязкого течения расплавов  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{100-x}\text{M}_x$  ( $\text{M} = \text{Ta}$  или  $\text{Nb}$ ,  $x = 0 - 4$  ат.%) [10], на которые нанесены значения кинематической вязкости и  $E_v$  расплавов  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{99}\text{Ta}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}$  и  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{97.5}\text{Ta}_{0.25}\text{Nb}_{2.25}$  (красный ромб).

Видно, что при замене одного легирующего элемента другим значения вязкости, а также энергии активации вязкого течения практически не изменяются (изменение не превышает ошибку измерения). При этом сохраняются индивидуальные особенности концентрационных зависимостей, характерные для каждой системы в отдельности. При суммарном количестве легирующего элемента 1 ат.% вязкость расплавов не изменяется по сравнению с вязкостью расплава  $\text{Fe}_{75}\text{B}_{15}\text{Si}_{10}$ . Однако увеличение концентрации Nb в сплаве приводит к существенному повышению значений вязкости (рис. 2, в).



**Рис. 2.** Концентрационные зависимости вязкости (а, в,  $\blacklozenge$  – 1400 °С,  $\blacksquare$  – 1500 °С,  $\bullet$  – 1600 °С) и энергии активации вязкого течения (б, г) расплавов  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.1})_{100-x}\text{Ta}_x$  (а, б) и  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.1})_{100-x}\text{Nb}_x$  (в, г)  $x=0-4$  [10]. Символы  $\blacklozenge$ ,  $\blacksquare$ ,  $\circ$  соответствуют значениям вязкости и энергии активации вязкого течения расплавов  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{99}\text{Ta}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}$  и  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{97.5}\text{Ta}_{0.25}\text{Nb}_{2.25}$

Таким образом, проведенные исследования вязкости расплавов  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{99}\text{Ta}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}$  и  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{97.5}\text{Ta}_{0.25}\text{Nb}_{2.25}$  показали, что замена части атомов Nb танталом не оказывает значимого влияния на вязкость, в результате чего сохраняется тенденция к увеличению значений вязкости при легировании расплава Nb. Причем при комплексном легировании Ta и Nb атомы Ta увеличивают вязкость также как и атомы Nb, чего не наблюдается при легировании расплава Fe-B-Si только одним Ta. Такое влияние небольших добавок Ta и Nb на вязкость может быть связано только с изменением химического ближнего упорядочения в расплавах при комплексном легировании.

Поэтому методом первопринципной молекулярной динамики был проведен анализ химического ближнего порядка расплавов  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{99}\text{Ta}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}$  и  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{97.5}\text{Ta}_{0.25}\text{Nb}_{2.25}$ . По рассчитанным полным и парциальным функциям радиального распределения атомов были определены основные характеристики структуры расплавов – расстояние между ближайшими соседями ( $r$ ) и координационные числа ( $Z$ ), которые представлены в таблице.

Таблица

Расстояния между ближайшими соседями ( $r_{i-j}$ ) и координационные числа ( $Z_{i-j}$ ) в  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})$  - (Ta, Nb) расплавах при 1400 К

i-j	$(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{99}\text{Nb}_{0.5}\text{Ta}_{0.5}$		$(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{97}\text{Ta}_{0.25}\text{Nb}_{2.25}$	
	$r_{i-j}, \text{Å}$	$Z_{i-j}$	$r_{i-j}, \text{Å}$	$Z_{i-j}$
tot-tot	2.39	12.89	2.39	12.86
B-tot	2.07	8.98	2.05	9.03
B-B	1.82	0.49	1.81	0.55
B-Fe	2.06	8.20	2.05	7.92
B-Si	2.22	0.41	2.19	0.46
Fe-tot	2.42	13.56	2.41	13.46
Fe-B	2.07	1.63	2.05	1.56
Fe-Fe	2.43	10.19	2.43	9.79
Fe-Si	2.37	1.47	2.36	1.40
Fe-Ta	2.66	0.1	2.68	0.14
Fe-Nb	2.7	0.11	2.63	0.58
Si-tot	2.36	12.12	2.35	12.36
Si-B	2.22	0.61	2.23	0.57
Si-Fe	2.38	10.70	2.35	10.44
Si-Si	2.78	0.98	2.47	0.73
Ta-tot	2.69	16.04	2.68	17.43
Ta-B	2.38	1.69	2.39	2.74
Ta-Fe	2.66	12.28	2.68	13.30
Ta-Si	2.70	1.85	2.69	1.40
Nb-tot	2.63	17.66	2.62	17.43
Nb-B	2.42	2.39	2.41	13.61
Nb-Fe	2.62	13.09	2.63	13.28
Nb-Si	2.78	1.42	2.73	2.07

Для анализа химического ближнего порядка в расплавах (Fe-B-Si)-(Ta, Nb) использовали коэффициент Уоррена-Каули ( $\alpha$ ) [18, 19], который рассчитывали по следующей формуле

$$\alpha_{i-j} = 1 - \frac{Z_{i-j}}{Z_{i-total} \cdot x_j},$$

где  $Z_{i-total}$  и  $Z_{i-j}$  – координационные числа, определенные из полной и парциальной ФПРА соответственно,  $x_j$  – концентрация атома  $j$ .

Коэффициент Уоррена-Каули показывает, насколько реальное химическое ближнее окружение выбранного атома отличается от случайного при заданной концентрации. Если  $\alpha_{ij} = 0$ , то вокруг атомов  $i$  случайное количество атомов  $j$ , если  $\alpha_{ij} < 0$ , то атомов  $j$  больше, чем при среднестатистическом распределении и между атомами  $i$  и  $j$  наблюдается "эффективное притяжение". Если  $\alpha_{ij} > 0$ , то атомов  $j$  меньше, чем при случайном расположении атомов, и тогда между атомами  $i$  и  $j$  наблюдается "эффективное отталкивание".

Атомные радиусы В, Si, Fe, Nb и Ta располагаются в порядке возрастания [20]. При этом атомный размер В намного меньше Fe и Si, атомные радиусы которых характеризуются близкими значениями. А радиусы атомов Nb и Ta превосходят размеры атомов Fe и Si в 1.5 раза. Такое различие в атомных радиусах приводит к тому, что для исследованных расплавов атомный ближний порядок определяется тремя характерными масштабами взаимодействия (см. таблицу). Наименьшее расстояние между ближайшими соседями соответствует взаимодействиям атомов металлов и Si с атомом В. При этом, минимальное расстояние между ближайшими соседями наблюдается для взаимодействия Fe-В. Взаимодействие между атомами Fe и Si является основным взаимодействием в исследованных системах и определяет радиус первой координационной сферы. А атомы Ta и Nb располагаются между первой и второй координационными сферами. Таким образом, введение в расплав Fe-B-Si Ta и Nb приводит к увеличению диапазона радиусов взаимодействия компонент, что повышает склонность этих расплавов к аморфизации.

Рассчитанные коэффициенты Уоррена-Каули для  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{99}\text{Ta}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}$  и  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{97.5}\text{Ta}_{0.25}\text{Nb}_{2.25}$  расплавов представлены на рис. 3. Согласно полученным результатам в исследованных расплавах наблюдается выраженный химический ближний порядок. Самые сильные химические взаимодействия наблюдаются вокруг атомов В и Si и одинаковы для обоих исследованных составов. Эффективное отталкивание атомов В и Si, как друг от друга, так и от себе подобных приводит к тому, что в окружении этих атомов преобладают атомы металлов Fe, Ta, Nb. Окружение атомов Fe определяется хорошо известным эффективным притяжением Fe и Si, а также сильным эффективным притяжением между атомами железа и примеси (Ta, Nb). Причем эффективное притяжение между атомами Fe и Nb в расплаве с суммарной концентрацией Ta и Nb 1 ат.% несколько больше, чем между Fe и Ta, а в расплаве  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{97.5}\text{Ta}_{0.25}\text{Nb}_{2.25}$  наоборот – эффективное притяжение между атомами Fe и Nb меньше, чем между Fe и Ta.

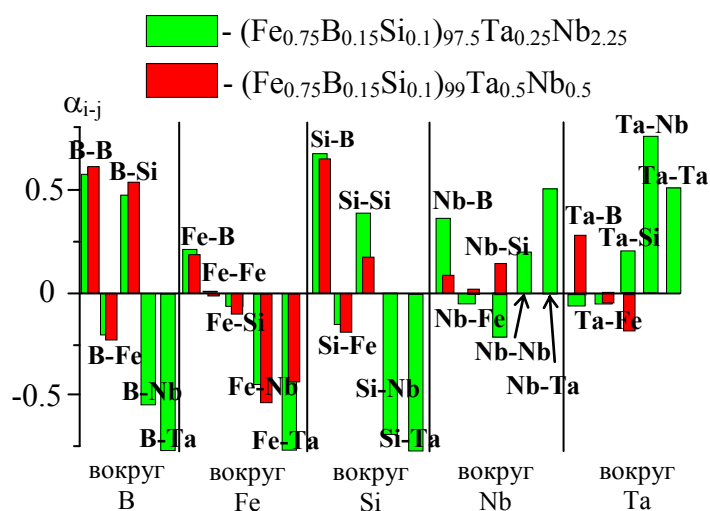


Рис. 3. Коэффициент Уоррена-Каули для расплавов  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{99}\text{Ta}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}$  и  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{97.5}\text{Ta}_{0.25}\text{Nb}_{2.25}$

Окружение вокруг атомов примеси определяется составом сплава, самые большие различия связаны со взаимодействием Ta и Nb с Si. Для расплава  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{99}\text{Ta}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}$

вблизи атомов Nb, количество атомов Si меньше, чем при среднестатистическом распределении атомов. Увеличение концентрации Nb в расплаве приводит к тому, что количество атомов Si вблизи атомов Nb становится больше среднестатистического, т.е. эффективное отталкивание между атомами Nb и Si переходит в эффективное притяжение. При этом для атомов В в окружении атомов Та наблюдается обратная тенденция. Повышение концентрации Nb в расплаве сопровождается уменьшением количества атомов Si в ближайшем окружении атомов Та. Кроме того, вблизи атомов Та наблюдается увеличение количества атомов В при повышении концентрации Nb в расплаве.

Таким образом, отличие значений вязкости расплавов, полученных при комплексном легировании Та и Nb от расплава основы  $Fe_{75}B_{15}Si_{10}$ , определяется химическим взаимодействием атомов примеси (Та и Nb) с атомами В и Si. Анализ структур расплавов  $(Fe_{0.75}B_{0.15}Si_{0.10})_{99}Ta_{0.5}Nb_{0.5}$  и  $(Fe_{0.75}B_{0.15}Si_{0.10})_{97.5}Ta_{0.25}Nb_{2.25}$  показал, что легирование Та и Nb расплава Fe-B-Si не изменяет основных особенностей его структуры и межатомного взаимодействия, обеспечивающих высокую аморфизуемость (малый радиус межатомного взаимодействия Fe-B и эффективное притяжение между атомами Fe и Si). При этом увеличивается диапазон радиусов взаимодействия компонент, что повышает способность к аморфизации этих расплавов.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе проведены исследования кинематической вязкости расплавов  $(Fe_{0.75}B_{0.15}Si_{0.10})_{99}Ta_{0.5}Nb_{0.5}$  и  $(Fe_{0.75}B_{0.15}Si_{0.10})_{97.5}Ta_{0.25}Nb_{2.25}$ . Показано, что температурные зависимости вязкости исследованных расплавов являются монотонными зависимостями, которые хорошо описываются уравнением Аррениуса. Увеличение концентрации Nb приводит к повышению вязкости расплава, энергия активации вязкого течения при этом не изменяется. Показано, что значения вязкости исследованных расплавов определяются химическим взаимодействием атомов примеси (Та и Nb) с атомами В и Si. Анализ структуры расплавов  $(Fe_{0.75}B_{0.15}Si_{0.10})_{99}Ta_{0.5}Nb_{0.5}$  и  $(Fe_{0.75}B_{0.15}Si_{0.10})_{97.5}Ta_{0.25}Nb_{2.25}$ , проведенный методом первопринципной молекулярной динамики, показал, что легирование Та и Nb расплава Fe-B-Si не изменяет основных особенностей его структуры и межатомного взаимодействия, обеспечивающих высокую аморфизуемость (малый радиус межатомного взаимодействия Fe-B и эффективное притяжение между атомами Fe и Si) и приводит к увеличению диапазона радиусов взаимодействия компонент, что также повышает способность к аморфизации этих расплавов.

*Работа выполнена по теме НИР (№ 121030100001-3).*

*Исследования выполнялись с использованием оборудования ЦКП «Центр физических и физико-химических методов анализа, исследования свойств и характеристик поверхности, наноструктур, материалов и изделий» УдмФИЦ УрО РАН.*

*Анализ атомного ближнего упорядочения в расплавах проводили при поддержке гранта РФФ №18-12-00438.*

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Makino A., Men H., Kubota T., Yubuta K., Inoue A. FeSiBPCu Nanocrystalline Soft Magnetic Alloys with High  $B_s$  of 1.9 Tesla Produced by Crystallizing Hetero-Amorphous Phase // Materials Transactions, 2009, vol. 50, iss. 1, pp. 204-209.
2. Dong C., Inoue A., Wang X. H., Kong F. L., Zanaeva E. N., Wang F., Bazlov A. I., Zhu S. L., Li Q. Soft magnetic properties of  $Fe_{82-83}B_{14-15}Si_2C_{0.5-1}$  amorphous alloys with high saturation magnetization above 1.7 T // Journal of Non-Crystalline Solids, 2018, vol. 500, pp. 173-180.
3. Stergioudis G. A., Vourlias G., Morawiec H., Stroz D., Polychroniadis E. K. Instabilities in crystallization and magnetic behavior of Fe-Si-B amorphous alloys // Materials Research Bulletin, 2004, vol. 39, iss. 2, pp. 231-236.

4. Inoue A., Shen B. Soft magnetic bulk glassy Fe-B-Si-Nb alloys with high saturation magnetization above 1.5 T // *Materials Transactions*, 2002, vol. 43, iss. 4, pp. 766-769.
5. Inoue A. Stabilization of Metallic Supercooled Liquid and Bulk Amorphous Alloys // *Acta Materialia*, 2000, vol. 48, iss. 1, pp. 279-306.
6. Inoue A., Shen B. New Fe-based bulk glassy alloys with high saturated magnetic flux density of 1.4–1.5 T // *Materials Science and Engineering: A*, 2004, vol. 375-377, pp. 302-306.
7. Geng Y., Wang Y., Wang Z., Qiang J., Wang H., Dong C., Tegus O. Formation and structure-property correlation of new bulk Fe–B–Si–Hf metallic glasses // *Materials and Design*, 2016, vol. 106, pp. 69-73.
8. Betancourt I., Baez S. Influence of Ta, Y substitutions on the thermal stability, microhardness and magnetic properties of melt spun Fe–B–Si amorphous alloys // *Journal of Non-Crystalline Solids*, 2009, vol. 355, iss. 22-23, pp. 1202-1205.
9. Inoue A., Shen B. Formation and Soft Magnetic Properties of Fe-B-Si-Zr Bulk Glassy Alloys with High Saturation Magnetization above 1.5 T // *Materials Transactions*, 2002, vol. 43, iss. 9, pp. 2350-2353.
10. Sterkhova I. V., Kamaeva L. V., Lad'yanov V. I., Chchelkatchev N. M. Role of Ta and Nb alloying elements on the viscosity of Fe-B-Si melts // *Journal of Molecular Liquids*, 2021, vol. 323, pp. 114636.
11. Швидковский Е. Г. Некоторые вопросы вязкости жидких металлов. М.: Гостехиздат, 1955. 208 с.
12. Бельтюков А. Л., Ладьянов В. И. Автоматизированная установка для определения кинематической вязкости металлических расплавов // *Приборы и техника эксперимента*. 2008. № 2. С. 155-161.
13. Ладьянов В. И., Стерхова И. В., Камаева Л. В., Корепанов А. Ю., Хадиулин Р. З. Об особенностях измерения вязкости расплавов  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.14}\text{Si}_{0.11})_{100-x}\text{Ta}_x$  ( $x=0-4$ ) // *Химическая физика и мезоскопия*. 2017. Т. 19, № 3. С. 416-423.
14. Бельтюков А. Л., Ладьянов В. И., Олянина Н. В. Об особенностях измерения вязкости металлических расплавов методом крутильных колебаний // *Расплавы*. 2009. № 6. С. 19-27.
15. Kresse G., Furthmuller J., Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set // *Computational Materials Science*, 1996, vol. 6, iss. 1, pp. 15-50.
16. Perdew J. P., Chevary J. A., Vosko S. H., Jackson K. A., Pederson M. R., Singh D. J., Fiolhais C. Atoms, Molecules, Solids, and Surfaces: Applications of the Generalized Gradient Approximation for Exchange and Correlation // *Physical Review B*, 1992, vol. 46, iss. 11, pp. 6671-6687.
17. Perdew J. P., Wang Y. Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy // *Physical Review B*, 1992, vol. 45, iss. 23, pp. 13244-13249.
18. Warren B. E., Averbach B. L., Roberts B. W. Atomic size effect in the X-ray scattering by alloys // *Journal Applied Physics*, 1951, vol. 22, iss. 12, pp. 1493-1496.
19. Wang J., Li X., Pan S., Qin J. Mg fragments and Al bonded networks in liquid Mg-Al alloys // *Computational Materials Science*, 2017, vol. 129, pp. 115-122.
20. Clementi E., Raimondi D. L. Atomic Screening Constants from SCF Functions // *The Journal of Chemical Physics*, 1963, vol. 38, pp. 2686-2689.

### On the Viscosity of $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})-(\text{Ta}, \text{Nb})$ Melts

<sup>1,2,3</sup>Sterkhova I. V., <sup>1,2,3</sup>Kamaeva L. V., <sup>2</sup>Blinova A. I., <sup>1</sup>Lad'yanov V. I., <sup>3</sup>Shchelkachev N. M.

<sup>1</sup> Udmurt Federal Research Center, Ural Branch of the RAS, Izhevsk, Russia

<sup>2</sup> Udmurt State University, Izhevsk, Russia

<sup>3</sup> Vereshchagin Institute for High Pressure Physics of the RAS, Troitsk, Moscow, Russia

**SUMMARY.** In this paper the study of the kinematic viscosity of the  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{99}\text{Ta}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}$  and  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{97.5}\text{Ta}_{0.25}\text{Nb}_{2.25}$  melts have been investigated by the method of damped torsional vibrations. It is shown that the temperature dependences of the viscosity of the studied melts are monotonic dependences, which are well described by the Arrhenius equation. An increase in the Nb concentration leads to an increase in the viscosity of the melt. The activation energy of the viscous flow does not change in this case. Analysis



of the structure of the  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{99}\text{Ta}_{0.5}\text{Nb}_{0.5}$  and  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.15}\text{Si}_{0.10})_{97.5}\text{Ta}_{0.25}\text{Nb}_{2.25}$  melts carried out by the ab-initio molecular dynamics method showed that the difference in the viscosity values of the melts obtained upon complex doping of Ta and Nb from the  $\text{Fe}_{75}\text{B}_{15}\text{Si}_{10}$  base melt is determined by the chemical interaction of impurity atoms (Ta and Nb) with B and Si atoms. It is shown that alloying with Ta and Nb of the Fe-B-Si melt does not change the main features of its structure and interatomic interaction, which provide high amorphizability (small radius of interatomic interaction of Fe-B and effective attraction between Fe and Si atoms). In this case, the range of the radius of interaction of the components increases, which grows the ability to amorphize these melts.

**KEYWORDS:** Fe-B-Si- (Ta, Nb) melts, bulk amorphous alloys, kinematic viscosity, temperature dependences of viscosity.

## REFERENCES

1. Makino A., Men H., Kubota T., Yubuta K., Inoue A. FeSiBPCu Nanocrystalline Soft Magnetic Alloys with High  $B_s$  of 1.9 Tesla Produced by Crystallizing Hetero-Amorphous Phase. *Materials Transactions*, 2009, vol. 50, iss. 1, pp. 204-209. <https://doi.org/10.2320/matertrans.MER2008306>
2. Dong C., Inoue A., Wang X. H., Kong F. L., Zanaeva E. N., Wang F., Bazlov A. I., Zhu S. L., Li Q. Soft magnetic properties of  $\text{Fe}_{82-83}\text{B}_{14-15}\text{Si}_2\text{C}_{0.5-1}$  amorphous alloys with high saturation magnetization above 1.7 T. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 2018, vol. 500, pp. 173-180. <https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2018.07.072>
3. Stergioudis G. A., Vourlias G., Morawiec H., Stroz D., Polychroniadis E. K. Instabilities in crystallization and magnetic behavior of Fe-Si-B amorphous alloys. *Materials Research Bulletin*, 2004, vol. 39, iss. 2, pp. 231-236. <https://doi.org/10.1016/j.materresbull.2003.09.034>
4. Inoue A., Shen B. Soft magnetic bulk glassy Fe-B-Si-Nb alloys with high saturation magnetization above 1.5 T. *Materials Transactions*, 2002, vol. 43, iss. 4, pp. 766-769. <https://doi.org/10.2320/matertrans.43.766>
5. Inoue A. Stabilization of Metallic Supercooled Liquid and Bulk Amorphous Alloys. *Acta Materialia*, 2000, vol. 48, iss. 1, pp. 279-306. [https://doi.org/10.1016/S1359-6454\(99\)00300-6](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(99)00300-6)
6. Inoue A., Shen B. New Fe-based bulk glassy alloys with high saturated magnetic flux density of 1.4–1.5 T. *Materials Science and Engineering: A*, 2004, vol. 375-377, pp. 302-306. <https://doi.org/10.1016/j.msea.2003.10.058>
7. Geng Y., Wang Y., Wang Z., Qiang J., Wang H., Dong C., Tegus O. Formation and structure-property correlation of new bulk Fe-B-Si-Hf metallic glasses. *Materials and Design*, 2016, vol. 106, pp. 69-73. <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2016.05.102>
8. Betancourt I., Baez S. Influence of Ta, Y substitutions on the thermal stability, microhardness and magnetic properties of melt spun Fe-B-Si amorphous alloys. *Journal of Non-Crystalline Solids*, 2009, vol. 355, iss. 22-23, pp. 1202-1205. <https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2009.05.013>
9. Inoue A., Shen B. Formation and Soft Magnetic Properties of Fe-B-Si-Zr Bulk Glassy Alloys with High Saturation Magnetization above 1.5 T. *Materials Transactions*, 2002, vol. 43, iss. 9, pp. 2350-2353. <https://doi.org/10.2320/matertrans.43.2350>
10. Sterkhova I. V., Kamaeva L. V., Lad'yanov V. I., Chtchelkatchev N. M. Role of Ta and Nb alloying elements on the viscosity of Fe-B-Si melts. *Journal of Molecular Liquids*, 2021, vol. 323, pp. 114636. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2020.114636>
11. Shvidkovskiy Ye. G. *Nekotoryye voprosy vyazkosti zhidkikh metallov* [Some questions of the viscosity of liquid metals]. Moscow: Gostekhizdat Publ., 1955. 208 p.
12. Bel'tyukov A. L., Lad'yanov V. I. An automated setup for determining the kinematic viscosity of metal melts. *Instruments and Experimental Techniques*, 2008, vol. 51, no. 2, pp. 304-310. <https://doi.org/10.1007/s10786-008-2027-z>
13. Lad'yanov V. I., Sterkhova I. V., Kamaeva L. V., Korepanov A. Yu., Khadiulin R. Z. Ob osobennostyakh izmereniya vyazkosti rasplavov  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.14}\text{Si}_{0.11})_{100-x}\text{Ta}_x$  ( $x=0-4$ ) [On the peculiarities of the viscosity measurement of the  $(\text{Fe}_{0.75}\text{B}_{0.14}\text{Si}_{0.11})_{100-x}\text{Ta}_x$  ( $x=0-4$ ) melts]. *Khimicheskaya fizika i mezoskopiya* [Chemical Physics and Mesoscopy], 2017, vol. 19, no. 3, pp. 416-423.
14. Bel'tyukov A. L., Lad'yanov V. I., Olyanina N. V. Ob osobennostyakh izmereniya vyazkosti metallicheskih rasplavov metodom krutil'nykh kolebaniy [About of characteristic properties of mea-

surement of stickiness metallic melts by method of torsional vibration]. *Rasplavi* [Russian metallurgy], 2009, no. 6, pp. 19-27.

15. Kresse G., Furthmuller J., Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set. *Computational Materials Science*, 1996, vol. 6, iss. 1, pp. 15-50. [https://doi.org/10.1016/0927-0256\(96\)00008-0](https://doi.org/10.1016/0927-0256(96)00008-0)

16. Perdew J. P., Chevary J. A., Vosko S. H., Jackson K. A., Pederson M. R., Singh D. J., Fiolhais C. Atoms, Molecules, Solids, and Surfaces: Applications of the Generalized Gradient Approximation for Exchange and Correlation. *Physical Review B*, 1992, vol. 46, iss. 11, pp. 6671-6687. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.46.6671>

17. Perdew J. P., Wang Y. Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy. *Physical Review B*, 1992, vol. 45, iss. 23, pp. 13244-13249. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.45.13244>

18. Warren B. E., Averbach B. L., Roberts B. W. Atomic size effect in the X-ray scattering by alloys. *Journal Applied Physics*, 1951, vol. 22, iss. 12, pp. 1493-1496. <https://doi.org/10.1063/1.1699898>

19. Wang J., Li X., Pan S., Qin J. Mg fragments and Al bonded networks in liquid Mg-Al alloys. *Computational Materials Science*, 2017, vol. 129, pp. 115-122. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2016.12.006>

20. Clementi E., Raimondi D. L. Atomic Screening Constants from SCF Functions // *The Journal of Chemical Physics*, 1963, vol. 38, pp. 2686-2689. <https://doi.org/10.1063/1.1733573>

---

*Стерхова Ирина Валентиновна, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник НЦ МФМ УдмФИЦ УрО РАН, тел. +7(3412)21-65-66, e-mail: [irina.sterkhova@udman.ru](mailto:irina.sterkhova@udman.ru)*

*Камаева Лариса Вячеславовна, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник НЦ МФМ УдмФИЦ УрО РАН, тел. +7(3412)21-78-33, e-mail: [lara\\_kam@mail.ru](mailto:lara_kam@mail.ru)*

*Блинова Анна Ивановна, магистрант 2 курса УдГУ*

*Ладьянов Владимир Иванович, доктор физико-математических наук, руководитель НЦ МФМ УдмФИЦ УрО РАН, тел. +7(3412)21-65-77, e-mail: [las@ftiudm.ru](mailto:las@ftiudm.ru)*

*Щелкачев Николай Михайлович, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник, ИФВД РАН, e-mail: [n.chtchelkatchev@gmail.com](mailto:n.chtchelkatchev@gmail.com)*