

Манаков Н.А., Еремин А.М.*, Толстобров Ю.В.*
Оренбургский государственный университет, *Бийский педагогический государственный
университет им. В.М. Шукшина

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ОБРАЗОВАНИЯ ОБРАТНЫХ ДОМЕНОВ НА НЕОДНОРОДНОСТЯХ В ВЫСОКОАНИЗОТРОПНЫХ ОДНООСНЫХ МАГНЕТИКАХ

Статья посвящена теоретическому анализу в рамках теории микромагнетизма процесса перемагничивания одноосного высокоанизотропного магнетика с единичными когерентными и некогерентными низкоанизотропными магнитными выделениями разной формы и размера.

Механизм и параметры перемагничивания определяют эксплуатационные характеристики магнитного материала. Поэтому их прогнозирование весьма важно при разработке новых и совершенствовании известных высокоанизотропных магнитотвердых сплавов. Одним из основных механизмов формирования высококоэрцитивного состояния является задержки образования и роста зародышей перемагничивания. Однако, не смотря на огромный экспериментальный материал, накопленный по этому вопросу, систематические расчеты процессов зародышеобразования в реальных магнитотвердых материалах до настоящего времени не проведены. Поэтому целью настоящей работы является численное моделирование процессов перемагничивания высокоанизотропных магнетиков с когерентными и некогерентными магнитными дефектами различной формы и размеров, выступающими в роли центров зарождения доменов перемагничивания, а также анализ влияния магнитостатических полей на эти процессы [1-10].

Теоретическое исследование процессов перемагничивания магнетиков, как правило, базируется на микромагнитный подход. В целом он был сформулирован в работе [11], где в наиболее общем виде выписаны основные уравнения, получаемые при варьировании функционала свободной энергии, вместе с граничными условиями. Однако непосредственное интегрирование этих уравнений без каких-либо упрощающих предположений не представляется возможным не только аналитически, но пока и численно. В связи с этим работы по теории микромагнетизма можно классифицировать по степени упрощения модели, независимо от объектов изучения.

В рамках одномерных одно-угловых приближений изучались массивные магнетики, тонкие магнитные пленки, мелкие ферромагнитные частицы. Существует обширная группа работ по перемагничиванию пластинчатого выделения (ПВ) в массивной матрице, среди которых

можно отметить работы [12-15], в которых рассматривался процесс разрушения однородно намагниченного состояния (ОНС) или закрепления доменных границ на ПВ. В этих работах получены аналитические выражения для коэрцитивной силы H_c в случае резкой границы в двух асимптотических приближениях, больших и малых толщинах выделения. Но в более общем случае, когда рассматриваются ПВ разной толщины и магнитные параметры ПВ и матрицы отличаются не только константой анизотропии, асимптотические оценки, полученные в этих работах не применимы.

Постановка задачи и методика численных расчетов. Рассматривались выделения в форме пластины, цилиндра и сферы в неограниченной матрице. Оси легкого намагничивания (ОЛН) матрицы и выделения были параллельны (когерентные выделения) или перпендикулярны (некогерентные выделения) друг относительно друга. Внешнее поле H совпадало по направлению с ОЛН матрицы. Граница между выделением и матрицей аппроксимировалась резкой или непрерывной переходной областью, на которой магнитные параметры изменялись, соответственно, скачком или непрерывно и линейно.

Равновесное состояние магнетика во внешнем поле можно рассматривать, как некоторый локальный минимум функционала свободной энергии, определенного на пространстве функций состояния в непрерывном случае (микромагнитный подход) или в N -мерном пространстве обобщенных координат в дискретном случае (гамильтониан Гейзенберга) [11].

При произвольном распределении намагниченности, задаваемом полем единичных векторов $\vec{V}(\vec{x})$ ($\vec{M}_S(\vec{x}) = M_S \vec{V}(\vec{x})$), полная энергия системы без учета магнитоупругих эффектов и поверхностной анизотропии дается выражением:

$$E[\vec{V}(\vec{x})] = \int_V A(\vec{x}) [(\nabla V_1)^2 + (\nabla V_2)^2 + (\nabla V_3)^2] dV + \int_V F(\vec{V}(\vec{x})) dV - \int_V M_S(\vec{x}) \vec{H} \vec{V}(\vec{x}) dV - \frac{1}{2} \int_V M_S(\vec{x}) \vec{H}_m(\vec{x}) \vec{V}(\vec{x}) dV, \quad (1)$$

где первый член описывает обменную энергию, второй – энергию магнитной анизотропии ($F(\vec{V}(\vec{x}))$) – некоторая функция ориентации намагниченности, вид которой зависит от симметрии кристаллической решетки), третий – энергию намагниченности во внешнем поле \vec{H} , а последний – энергию магнитоэстатических полей рассеяния, создаваемых намагниченностью $\vec{M}_s(\vec{x})$, V – объем системы, A – константа обменного взаимодействия, M_s – константа намагниченности насыщения.

Если рассматривать полную энергию как функционал, определенный на фазовом пространстве системы, то необходимым условием равновесности состояния будет равенство нулю первой вариационной производной по ($\vec{V}(\vec{x})$), вычисленной в этом состоянии.

Если произвести расчет вариации δE и приравнять ее к нулю, т. е. $\delta E = 0$, то получим два дифференциальных уравнения, описывающих рассматриваемую систему:

$$\vec{V} \times [2A\Delta\vec{V} - \frac{\partial F}{\partial \vec{V}} + M_s(\vec{H} + \vec{H}_m)] = 0 \quad (2)$$

$$\vec{V} \times \frac{\partial \vec{V}}{\partial n} = 0 \quad (3)$$

Второе уравнение дает граничные условия, здесь n – внешняя нормаль к поверхности магнетика.

Размагничивающее поле \vec{H}_m определяют через градиент магнитоэстатического потенциала U :

$$\vec{H}_m = -\nabla U \quad (4)$$

Потенциал удовлетворяет уравнениям:

$$\Delta U = 4\pi M_s \vec{V} \cdot \vec{V} \quad \text{и} \quad \Delta U = 0 \quad (5)$$

Соответственно в объеме и вне объема магнетика и дополнительно граничным условиям на поверхности:

$$U_{in} = U_{out}, -\frac{\partial U_{in}}{\partial n} + 4\pi M_s \vec{n} \cdot \vec{V} = -\frac{\partial U_{out}}{\partial n}, U(\infty) = 0, \quad (6)$$

где U_{in} и U_{out} – значения магнитоэстатического потенциала на поверхности, но внутри (U_{in}) и на поверхности, но снаружи (U_{out}) магнетика. Дифференциальные уравнения (2-6) представляют собой основные уравнения микромагнетика вместе с граничными условиями. В них заключена полная формулировка задачи о равновесном положении вектора \vec{V} .

Локальный минимум функционала (1), соответствующий равновесному состоянию магнетика можно искать численной минимизацией, без решения уравнений (2-3). Для этого необхо-

димо произвести дискретизацию, т. е. представить соответствующий интеграл (1) в виде суммы. В таком виде функционал E можно трактовать как функцию N -переменных. Минимум функции соответствует минимуму функционала.

Нахождение равновесного состояния магнетика осуществлялось путем минимизации энергии системы E в N -мерном пространстве обобщенных координат с помощью метода градиентного спуска и метода сопряженных градиентов. При этом выражение для энергии численно интегрировалось по формуле Симпсона (в случае одномерного приближения микромагнитной теории) и по обобщенной формуле прямоугольников (в случае двухмерного приближения микромагнитной теории). При построении петель гистерезиса в качестве начального приближения выбиралось однородно намагниченное состояние в достаточно большом поле. Затем, при уменьшении поля, каждое предыдущее решение являлось начальным приближением для последующего.

Уравнения для магнитоэстатического потенциала (5) в случае некогерентного цилиндрического выделения с граничными условиями (6) решалось методом конечных разностей. Был получен сеточный аналог уравнения (5), который при сгущении сетки приводится к уравнению (5), а на границе системы – к граничным условиям (6). Полученное сеточное уравнение решалось методом последовательной верхней релаксации [16].

Разработанная численная методика моделирования позволяет исследовать различные типы систем. Специфика модельного описания зависит от особенностей геометрии системы.

Результаты численных расчетов и их анализ.

Приведем некоторые результаты расчетов. Наиболее подробно они приведены и проанализированы в работах [1-10]. В частности, были определены значения коэрцитивной силы H_c и поля разрушения ОНС H_0 для четырех вариантов:

- 1) $L = 0,05 \div 100, \Delta = 0$;
- 2) $2\Delta + L = 1,0 \div 100, 2\Delta = 1,0$;
- 3) $2\Delta + L = 2,0 \div 100, 2\Delta = 2,0$;
- 4) $L = 0, 2\Delta = 0,2 \div 25$;

где L – размер выделения (диаметр сферы или цилиндра или ширина ПВ), Δ – ширина переходного слоя (ПС) (L и Δ приведены в едини-

цах $\sqrt{\frac{A_2}{K_2}}$). $A_1=1, K_1=0,01, M_{s1}=1$ – параметры де-

фекта; $A_2=1, K_2=1, M_{S1}=1$ – параметры матрицы. Эти конкретные значения магнитных констант выделения и матрицы выбраны такими потому, что зародыш обратной намагниченности (ЗОН) образуется в областях с пониженным значением константы анизотропии K . Для общности полученных результатов магнитные константы и линейные размеры выделения и ПС взяты в безразмерных, относительных единицах.

В качестве примера на рисунках 1 показаны зависимости приведенных значений коэрцитивной силы $h_c = \frac{H_c M_{S2}}{K_2}$ и поля разрушения

ОНС $h_0 = \frac{H_0 M_{S2}}{K_2}$ от приведенного диаметра L когерентного сферического выделения, а на рисунке 2 – зависимость $h_c = \frac{H_c M_{S2}}{K_2}$ от приведенной толщины ПС Δ некогерентного цилиндрического выделения.

В таблице 1 даны расчетные значения H_c и H_0 для магнетиков $SmCo_5, Nd_2Fe_{14}B, Sm_2Co_{17}$ с выделением Co или Fe различной формы и размеров.

Установлено, что в случае резкой межфазной границы быстрое уменьшение коэрцитивной силы и поля разрушения ОНС наблюдается с ростом размера выделения до $\sim 4 \sqrt{\frac{A_2}{K_2}} \div 5 \sqrt{\frac{A_2}{K_2}}$. При дальнейшем росте размера выделения обе величины быстро достигают асимптотических значений, причем H_c значительно раньше H_0 . Наличие достаточно протяженного ПС на границе дефекта уменьшает H_c до сколько угодно малых значений (см. рис. 2).

Согласно аналитическим оценкам работы [15] значения H_c для $SmCo_5$ с ПВ Co при $L \gg 40$ нм: $H_c (\Delta = 0) = 85$ кЭ; $H_c (\Delta = 2,5$ нм) = 61 кЭ; $H_c (\Delta = 5$ нм) = 40 кЭ; $H_c (\Delta = 20$ нм) = 36 кЭ; $H_c (\Delta = 40$ нм) = 33 кЭ. Численным расчетам для $L =$

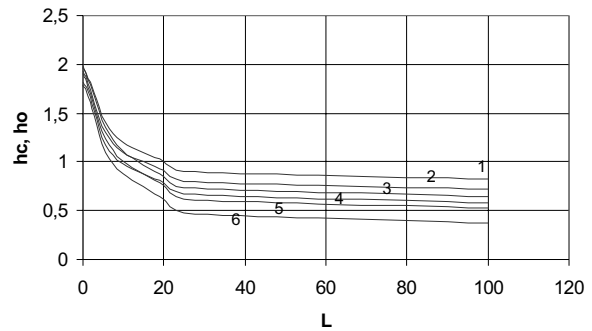


Рисунок 1. Зависимость приведенной коэрцитивной силы $h_c = \frac{H_c M_{S2}}{K_2}$ и приведенного поля разрушения

ОНС $h_0 = \frac{H_0 M_{S2}}{K_2}$ от приведенного диаметра L

(в единицах $\sqrt{\frac{A_2}{K_2}}$) когерентного сферического выделения (1 – $h_c(L), 3 - h_0(L)$ для $D=0, L=0,05e100$; 2 – $h_c(L), 5 - h_0(L)$ для $2D+L=1,0e100, 2D=1,0$; 4 – $h_c(L), 6 - h_0(L)$ для $2D+L=2,0e100, 2D=2,0$).

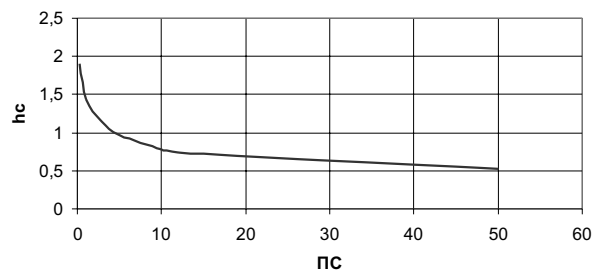


Рисунок 2. Зависимость приведенной коэрцитивной

силы $h_c = \frac{H_c M_{S2}}{K_2}$ от приведенной толщины ПС Δ

(в единицах $\sqrt{\frac{A_2}{K_2}}$) некогерентного цилиндрического выделения.

Таблица 1. Расчетные значения H_c и H_0 для $SmCo_5, Sm_2Co_{17}, Nd_2Fe_{14}B$ с выделением Co или Fe различной формы и размеров

Магнетик	L(нм)	Δ (нм)	H_c (кЭ)[H_0 (кЭ)]				
			Когерентное выделение			Некогерентное выделение	
			ПВ	цилиндр	сфера	ПВ	цилиндр
SmCo ₅ +Co	80	20	44[24]	46[31,2]	52[40]	46,4[28]	52,8[36,8]
	80	40	40[22]	44[28]	48[36]	42,8[25,6]	49,2[34,4]
Nd ₂ Fe ₁₄ B+Fe	86	43	13,7[7,3]	14,6[9,1]	15,5[11,9]	14,6[8,8]	15,7[11]
	172	86	11,9[6,4]	12,6[8,2]	13,7[10]	12,4[7,3]	13,9[9,7]
Sm ₂ Co ₁₇ +Co	104	52	10,4[5,7]	11[7,2]	11,7[9,1]	10,8[6,5]	11,96[8,4]
	208	104	9,1[4,9]	9,75[6,4]	10,4[7,8]	9,7[5,9]	10,6[7,4]

85 нм дают: $H_c(\Delta = 0) = 92$ кЭ; $H_c(\Delta = 2,5 \text{ нм}) = 69$ кЭ; $H_c(\Delta = 5 \text{ нм}) = 47,7$ кЭ; $H_c(\Delta = 20 \text{ нм}) = 42,7$ кЭ; $H_c(\Delta = 40 \text{ нм}) = 39,7$ кЭ.

Непрерывная межфазная граница значительно облегчает перемагничивание. Это позволяет объяснить сравнительно невысокие экспериментальные значения H_c , наблюдаемые на высокоанизотропных магнетиках, формированием низкоанизотропных выделений с непрерывным изменением магнитных параметров на межфазной границе. Наиболее хорошее согласие достигается при учете изменения в выделении не только константы магнитной анизотропии, но и константы обменного взаимодействия и намагниченности.

Результаты настоящих исследований можно использовать для анализа гистерезисных свойств одноосных магнетиков, перемагничивание которого начинается с образования ЗОН на выделениях, достаточно удаленных друг от друга.

Установлено, что перемагничивание одноосного магнетика с низкоанизотропным выделением характеризуется тремя критическими полями: полем разрушения ОНС H_0 , коэрци-

тивной силой H_c и полем коллапса $30H_k$ при уменьшении перемагничивающего поля. Для малых выделений ($L \ll 2\sqrt{A_2/K_2}$) $H_c = H_0 = H_k$, то есть перемагничивание происходит скачком при $H = H_0$, зародыш обратной намагниченности при этом неустойчив. В противном случае перемагничивание разбивается на два этапа: образование устойчивого ЗОН в выделении в поле H_0 и его выход в матрицу, то есть полное перемагничивание в поле H_c . При $K_1 \neq 0$ возможно существование устойчивых неоднородных состояний в полях меньше H_0 ($H_k < H_0$). С ростом толщины выделения H_0 резко снижается. Непрерывная межфазная граница существенно влияет на H_0 только при $L \leq 2\sqrt{A_2/K_2}$, когда ЗОН сильно «сжат» в выделении.

Учет магнитостатического члена в выражении для полной энергии системы в случае некогерентного цилиндрического выделения увеличивает значение H_c и H_0 за счет анизотропии формы выделения.

Список использованной литературы:

1. Manakov N.A. Numerical modelling process of nucleation of inverse domains in uniaxial magnetics / N.A. Manakov A.M. Eryomin, Yu.V. Tolstobrov // The XIII th International Conference on Permanent Magnets. Suzdal – Moscow, 2000, Abstract book. – P. 63.
2. Еремин А.М. Численное моделирование зародышеобразования обратных доменов в высокоанизотропных магнетиках / А.М. Еремин // Программа и тезисы докладов IV Всероссийской конференции по математическому моделированию и информационным технологиям: Институт вычислительного моделирования СО РАН, Красноярск, 2003. – С. 24-25.
3. Еремин А.М. Микромагнетизм одноосного магнетика с пластинчатым выделением / А.М. Еремин, Ю.В. Толстобров // Бийский гос. пед. ин-т. – Бийск, 2000. – 10 с. Деп. в ВИНТИ 29.06.00, №1834-В00.
4. Еремин А.М. Численное моделирование зародышеобразования обратных доменов на некогерентном дефекте в форме пластинчатого выделения в одноосных высокоанизотропных магнетиках / А.М. Еремин // Компьютерные технологии в науке, производстве, социальных и экономических процессах: Материалы 2-ой Междунар. науч. – практ. конф.: В 6 ч. / Юж. Рос. гос. техн. ун-т (НПИ). – Новочеркасск: ООО НПО «ТЕМП», 2001. – Ч. 3. – С. 52 – 55.
5. Еремин А.М. Моделирование зародышеобразования обратных доменов на дефектах в высокоанизотропных магнетиках / А.М. Еремин, Н.А. Манаков, Ю.В. Толстобров // Математическое моделирование: Сб. тр. 5-й Всерос. науч. конф., Т. 1. Краевые задачи механики сплошной среды, тепло – и массообмена. Краевые задачи в физике и химии твердого тела. Численные методы и пакеты прикладных программ, механика конструкций: НФИКемГУ. – Новокузнецк, 2002. – С. 115-119.
6. Еремин А.М. Численное моделирование зародышеобразования обратных доменов на дефектах в высокоанизотропных одноосных магнетиках / А.М. Еремин // Современные проблемы информатизации в технике и технологиях: Сб. трудов. Вып. 7. – Воронеж: Центрально-Черноземное книжное издательство, 2002. – С. 11 – 12.
7. Еремин А.М. Численное моделирование зародышеобразования обратных доменов в высокоанизотропных магнетиках / А.М. Еремин, Н.А. Манаков, Ю.В. Толстобров // Изв. ВУЗов. Физика. -2002. – Т. 44, №8 (Приложение). С. 26-29.
8. Еремин А.М. Численное моделирование зародышеобразования обратных доменов на дефектах в высокоанизотропных магнетиках / А.М. Еремин, Н.А. Манаков, Ю.В. Толстобров // Магнитная анизотропия и гистерезисные свойства редкоземельных сплавов: Сб. материалов. Всерос. школы-семинара. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2003. – С. 5-13.
9. Еремин А.М. Комплексный теоретический анализ гистерезиса одноосного высокоанизотропного магнетика с гетерогенным выделением второй фазы / А.М. Еремин // Физико-химические процессы в неорганических материалах: Доклады 9-ой Междунар. конф., посв. 50-летию Кемеровского гос. ун-та, в 2-х т. / КемГУ. – Т. 2. – Кемерово: Кузбассвузиздат, 2004. – С. 397-401.
10. Еремин А.М. Решение основной задачи микромагнетика для одноосного высокоанизотропного магнетика с единичным магнитным выделением различной геометрической формы / А.М. Еремин // Краевые задачи и математическое моделирование: Сб. тр. 6-й Всерос. науч. конф., Т. 1. Краевые задачи и методы их решения: НФИКемГУ. – Новокузнецк, 2003. – С. 152-156.
11. Браун У.Ф. Микромагнетизм / У.Ф. Браун. – М.: Наука, 1979. – 159 с.
12. Aharoni A. Reduction in coercive force caused by a certain type of imperfection / A. Aharoni // Phys. Rev. – 1960. – V. 119, №1. – P. 127 – 131.
13. Крюков И.И. Микромагнетизм одноосного магнетика с пластинчатым выделением / И.И. Крюков, Н.А. Манаков, К.С. Сахаев // ФММ. 1989. – Т. 68, №4. – С. 648 – 655.
14. Сахаев К.С. Задержка смещения доменной границы на высокоанизотропных включениях / К.С. Сахаев, И.И. Крюков, Н.А. Манаков // Физика магнитных материалов: Калинин, – 1983. – С. 21 – 25.
15. Сахаев К.С. Гистерезис одноосного магнетика с пластинчатым выделением / К.С. Сахаев, И.И. Крюков, Н.А. Манаков // VIII Всесоюз. конф. по постоянным магнитам: Тез. докл. – М., 1985. – С. 25.
16. Роуч П. Вычислительная гидродинамика / П. Роуч. – М.: Мир, 1976. – 616 с.