На правах рукописи

ПЛЕТНЁВА Марина Владимировна

# МИКРОМАГНИТНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕРМИЧЕСКОГО НАМАГНИЧИВАНИЯ МНОГОСЛОЙНЫХ СТОХАСТИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Специальность 01.04.07 – физика конденсированного состояния

ΑΒΤΟΡΕΦΕΡΑΤ

диссертации на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук

Барнаул – 2008

Работа выполнена на кафедре физики ГОУ ВПО «Бийский педагогический государственный университет им. В. М. Шукшина»

Научный руководитель:	доктор физико-математических наук, профессор Манаков Николай Александрович
Официальные оппоненты:	доктор физико-математических наук, профессор Сагалаков Анатолий Михайлович
	доктор физико-математических наук, профессор Алтухов Юрий Александрович
Ведущая организация:	ГОУ ВПО «Тверской государственный универси- тет»

Защита состоится 02 октября 2008 года в 12 час. на заседании диссертационного совета Д 212.004.04 в Алтайском государственном техническом университете им. И.И. Ползунова по адресу: 656099, г. Барнаул, пр. Ленина, 46.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова.

Автореферат разослан "\_\_\_\_" \_\_\_\_ 2008 г.

Отзывы на автореферат, заверенные гербовой печатью организации, просим посылать в 2-х экземплярах на адрес университета.

Ученый секретарь диссертационного совета, кандидат физико-математических наук

*Wheelly* Романенко В.В.

#### ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования. Одно из приоритетных направлений развития физики конденсированного состояния вещества связано с созданием и изучением новых материалов со специальными свойствами. В этой связи, исследование необычных физических свойств соединений на основе редкоземельных элементов представляется важным и значимым как с точки зрения фундаментальной науки, так и для реализации различных технических применений. Уже несколько десятилетий соединения на основе редкоземельных металлов неодима (Nd) и самария (Sm) представляют большой интерес для современной техники и являются объектом многих экспериментальных и теоретических исследований. Эти материалы имеют высокие значения намагниченности насыщения, коэрцитивной силы и температуры Кюри и, благодаря этому, позволяют создавать сильные магнитные поля при минимальном весе и габаритах.

При эксплуатации постоянных магнитов на основе поликристаллических сплавов редкоземельных металлов SmCo<sub>5</sub>, Sm<sub>2</sub>Co<sub>17</sub>, Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B необходимо учитывать присущую им характерную особенность – эффект термического намагничивания (TH), то есть прирост намагниченности размагниченного обратным полем образца в результате нагревания [1]. К настоящему времени, несмотря на проведенные экспериментальные исследования [1-4], причины явления термического намагничивания недостаточно ясны и теоретически слабо изучены. Используемые модели не отражают в полной мере реальный вклад различных видов взаимодействий в эффект TH, особенно в случае поликристаллических сплавов редкоземельных металлов, полученных быстрой закалкой из жидкого состояния. Требуется более детальное теоретическое исследование зависимости термического намагничивания от основных магнитных параметров материала, степени дисперсности его структуры и характера доменной структуры.

Исходным пунктом строгого теоретического описания магнитного поведения сплавов является микромагнитный подход [5], который в силу ясности и простоты используемых физических представлений привлекает внимание многих отечественных и зарубежных исследователей и позволяет использовать мощные методы компьютерного моделирования. Последнее особенно актуально в том случае, когда экспериментальное наблюдение микромагнитного поведения невозможно или весьма затруднено. Поэтому принципиально важным в настоящее время представляется создание адекватных методов расчета, позво-

ляющих получить достаточно обоснованное представление о характере микромагнитного поведения поликристаллических сплавов высокоанизотропных магнетиков, в том числе о механизме эффекта термического намагничивания.

Цель и задачи исследования. Целью диссертационной работы явилось численное моделирование микромагнитного поведения поликристаллических сплавов высокоанизотропных магнетиков в одномерном приближении на модели многослойной стохастической системы (МСС). В соответствии с поставленной целью решались следующие задачи:

 – разработка численной методики, позволяющей эффективно моделировать микромагнитное поведение МСС для широкого спектра параметров;

 теоретический анализ формирования распределения намагниченности и процессов перемагничивания МСС;

– теоретическое изучение микромагнитного механизма термического намагничивания в МСС.

**Объект, предмет исследования.** Объектом изучения является микромагнитное поведение поликристаллических постоянных магнитов на основе редкоземельных металлов. В рамках этого объекта предметом исследования служит эффект термического намагничивания поликристаллических сплавов высокоанизотропных магнетиков.

Научная новизна работы заключается в том, что впервые:

 – разработаны методики расчёта магнитостатического потенциала многослойной стохастической системы и численной минимизации функционала свободной энергии системы с учетом магнитостатической энергии;

 проведено теоретическое исследование микромагнитных свойств многослойных стохастических систем с некомпланарным распределением осей легкого намагничивания (ОЛН) в слоях, учитывающее возникновение и влияние магнитостатических полей;

– на модели многослойной стохастической системы в рамках теории микромагнетизма обоснована возможность нового механизма эффекта термического намагничивания в быстрозакаленных поликристаллических сплавах высокоанизотропных магнетиков, отличного от механизма моделей А.А. Зайцева – А.С. Лилеева [2] и Р. Шумана – Л. Яна [4];

 проведен анализ влияния обменного и магнитостатического взаимодействий на характер термического намагничивания многослойной стохастической системы.

Достоверность полученных результатов обеспечивается физической корректностью постановки и решения задач диссертации, использованием строгих математических методов, их корреляцией с предшествующими теоретическими оценками и экспериментальными данными, совпадением численных результатов, полученных разными методами.

**Практическая значимость** работы заключается в том, что результаты исследования могут быть использованы для полуколичественного описания микромагнитных свойств реальных поликристаллических сплавов высокоанизотропных магнетиков. Они способствуют более глубокому пониманию процессов намагничивания и перемагничивания, а, следовательно, позволяют более эффективно прогнозировать свойства новых магнитных материалов. Предложенная в работе численная методика отличается высокой универсальностью моделирования различных микромагнитных стохастических систем.

#### На защиту выносятся следующие положения и результаты:

 – математическая модель МСС с некомпланарными ОЛН и численная реализация минимизации функционала свободной энергии, учитывающая возникновение и влияние магнитостатических полей рассеяния;

 – результаты численного моделирования распределения намагниченности, процессов перемагничивания и термического намагничивания МСС с компланарными и некомпланарными ОЛН.

Личный вклад автора. Все основные результаты работы, выносимые на её защиту, были получены автором лично. Выбор направления исследований, формулировка задач и обсуждение результатов проводились совместно с научным руководителем профессором Н.А. Манаковым и научным консультантом Ю.В. Толстобровым. Автором лично были разработаны используемые математические модели МСС и проведены: а) численные эксперименты, результаты которых положены в основу диссертации; б) анализ физического содержания представленных в диссертации численных решений; в) обобщение результатов и формулировка окончательных выводов теоретических исследований.

Апробация работы. Основные результаты, приведенные в диссертационной работе, были обсуждены на Всероссийской научно-технической конференции «Измерения, автоматизация и моделирование в промышленности и научных исследованиях» (Бийск, 2001, 2004); на Всероссийской научнотехнической конференции «Информационные технологии в экономике, науке

и образовании» (Бийск, 2004); на III Международной научно-технической школе-конференции «Молодые ученые – науке, технологиям и профессиональному образованию в электронике» (Москва, 2005); на VIII Международной школе-семинаре «Эволюция дефектных структур в конденсированных средах» (Барнаул, 2005); на Всероссийской научно-практической конференции «Фундаментальные науки и образование» (Бийск, 2006, 2008); на Российско-Японском семинаре «Магнитные явления в физикохимии молекулярных систем» (Оренбург, 2006).

**Публикации.** По материалам диссертации опубликовано 16 печатных работ, в том числе 5 из них в изданиях, рекомендованных перечнем ВАК РФ. Перечень опубликованных работ приведен в конце автореферата.

#### Структура и объем диссертационной работы

Диссертация состоит из введения, 3 глав, заключения и списка литературы, включающего 172 наименования. Работа изложена на 107 страницах текста, содержит 20 рисунков.

#### ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Во введении** обосновывается актуальность, новизна и практическая значимость темы диссертационного исследования, формулируются его цель и задачи, раскрывается структура работы, и излагаются основные положения, выносимые на защиту.

**Первая глава** «Термическое намагничивание постоянных магнитов» носит обзорный характер и посвящена анализу результатов современного состояния научных исследований явления термического намагничивания, наблюдаемого в поликристаллических постоянных магнитах на основе редкоземельных металлов SmCo<sub>5</sub>, Sm<sub>2</sub>Co<sub>17</sub>, Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B, NdFeB и феррита бария BaFe<sub>12</sub>O<sub>19</sub>. Изложено развитие теории термического намагничивания, подробно рассмотрены механизмы эффекта термического намагничивания в рамках существующих теоретических моделей TH A.A. Зайцева – А.С. Лилеева и Р. Шумана – Л. Яна [2, 4]. К недостаткам рассмотренных теоретических исследований можно отнести то, что:

во-первых, указанные модели были направлены, прежде всего, на качественное понимание эффекта ТН в спеченных магнитах, а термическое намагничивание, обнаруженное в сплавах SmCo<sub>5</sub> и Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B, полученных быстрой закалкой из жидкого состояния [3] не находит адекватного объяснения с помощью предложенных моделей;

во-вторых, ни одна из перечисленных моделей не использовала для описания механизма ТН строгого микромагнитного подхода, исследования строились на использовании статистического подхода Ф. Прайзаха.

Указанные обстоятельства послужили поводом для теоретического изучения термического намагничивания поликристаллических сплавов высокоанизотропных магнетиков в рамках строгого микромагнитного подхода.

**Во второй главе** «Методика численных расчётов» описаны основные положения и методы теории микромагнетизма, которые использовались далее для построения модели МСС и описания методики численных расчётов.

При теоретическом изучении в рамках теории микромагнетизма магнитных свойств поликристаллических сплавов высокоанизотропных магнетиков использовалась модель многослойной стохастической системы с компланарными ОЛН, например в [6-7]. Существенным ограничением модельного описания в указанных работах являлось предположение о том, что ОЛН в слоях системы, векторы магнитных моментов и внешнего поля ориентированы в плоскости слоев, а, следовательно, исключалось возникновение магнитостатического взаимодействия и не учитывалось его влияние на поле намагниченности.



Рис. 1. Геометрия МСС. Здесь  $0 \le \theta \le \pi, 0 \le \phi < 2\pi -$ углы, определяющие единичный вектор намагниченности **m**.

Учитывая вышесказанное, в настоящей работе для аппроксимации поликристаллических сплавов высокоанизотропных магнетиков была выбрана модель МСС с некомпланарными осями легкого намагничивания (рис. 1), состоящая из конечного числа плоскопараллельных неограниченных слоев одноосного магнетика, с возможными в некоторых случаях немагнитными прослойками. Магнитные слои различались ориентацией ОЛН и магнитными параметрами, предполагалось, что все параметры системы изменялись только в направлении координаты z, ортогональной поверхности слоев.

В рамках выбранной модели были получены выражения для основных уравнений микромагнетизма. А именно, свободная энергии системы без учёта магнитоупругих эффектов и поверхностной анизотропии записывается в безразмерной форме, полагая, что *L* – толщина системы, в виде функционала от поля намагниченности **m** следующим образом:

$$E = \int_{0}^{1} \left\{ \frac{A}{M_{S}^{2}L^{2}} \left[ \left( \frac{\partial m^{x}}{\partial z} \right)^{2} + \left( \frac{\partial m^{y}}{\partial z} \right)^{2} + \left( \frac{\partial m^{z}}{\partial z} \right)^{2} \right] + \left[ \frac{K_{1}}{M_{S}^{2}} \left( 1 - \left( \mathbf{m} \cdot \mathbf{w} \right)^{2} \right) + \frac{K_{2}}{M_{S}^{2}} \left( 1 - \left( \mathbf{m} \cdot \mathbf{w} \right)^{2} \right)^{2} \right] - \frac{1}{M_{S}} \mathbf{H} \cdot \mathbf{m} + \frac{1}{2} \mathbf{m} \cdot \mathbf{H}^{m} \right\} dz , \qquad (1)$$

где первое слагаемое подынтегральной суммы соответствует плотности энергии обменного взаимодействия, A – константа обмена,  $M_S$  – намагниченность насыщения; второе – плотности энергии магнитной кристаллографической анизотропии в случае одноосного кристалла,  $K_1$ ,  $K_2$  – константы магнитной анизотропии,  $\mathbf{w} = (w^x, w^y, w^z)$  – единичный вектор ориентации ОЛН; третье – плотность энергии намагниченности во внешнем магнитном поле **H**; последнее слагаемое описывает плотность собственной магнитостатической энергии,  $\mathbf{H}^m$  – размагничивающее поле, созданное объемными и поверхностными магнитными зарядами; единичный вектор намагниченности  $\mathbf{m} = (m^x, m^y, m^z)$  и параметры системы являются функциями от координаты z, где z = 0 и z = 1 левая и правая (в единицах L) границы системы.

Для определения размагничивающего поля  $\mathbf{H}^m = -\nabla U$  в работе было предложено два способа: 1) вычисление потенциала *U* путем решения дифференциального уравнения Пуассона; 2) вычисление потенциала как сумму вклада объемных источников с плотностью  $-\partial m^z / \partial z$  и поверхностных источников с плотностью  $\mathbf{m} \cdot \mathbf{n}$ . В любой точке  $z^*$ , принадлежащей многослойной системе, для потенциала получена следующая интегральная формула:

$$U(z^{*}) = U^{o\delta} + U^{nos} = 2\pi \left\{ \int_{a}^{z^{*}} m^{z} dz - \int_{z^{*}}^{b} m^{z} dz \right\},$$
(2)

где пределы интегрирования a и b в случае системы без прослоек – это границы системы (a = 0, b = 1), а в случае системы с прослойками – это левая и правая границы слоя, которому принадлежит точка  $z^*$ .

Нахождение равновесного распределения намагниченности заключалось в поиске некоторого локального минимума функционала (1) в предположении, что эволюция системы происходила в направлении наискорейшего понижения энергии. При численном решении задачи данное предположение приводило к применению градиентного спуска для дискретного аналога  $E^{h}$  функционала (1) - функции 3*n* переменных (координат  $m^x$ ,  $m^y$  и  $m^z$  в *n* узлах сетки, принадлежащих МСС). Нахождение магнитостатического потенциала U было связано с численным интегрированием выражения (2). При вычислении градиента  $E^h$ учитывалась неявная зависимость функционала (1) от поля намагниченности т через потенциал U, что исключало возникновение проблемы «седловых точек». Градиентный спуск считался законченным, когда при малом градиенте смещение в направлении  $-\nabla E^h$  оказывалось невозможным без роста функции  $E^h$ . Дополнительной проверкой, что найденное решение являлось точкой локального минимума  $E^h$ , служило смещение из точки минимума на некоторое расстояние в направление  $-\nabla E^{h}$  (перешагивание через минимум), при этом система должна возвращаться в исходную точку.

Расчеты проводились на сетках разных размеров, но во всех случаях шаг сетки выбирался меньше характерной ширины доменной границы  $\sqrt{A/K_1}$ . Путём сравнительного анализа была проведена оптимизация размера сетки, отвечающая необходимой точности расчётов, специфике аппроксимирующих формул и возможностям вычислительной техники. Представленные ниже результаты получены на достаточно мелких сетках, когда шаг не оказывал на них существенного влияния.

Отметим, что разработанная в главе численная методика моделирования позволяет исследовать как отдельные равновесные микромагнитные состояния, реализующиеся в многослойных системах различных типов при различных внешних условиях, так и гистерезис многослойных систем. Специфика модельного описания при этом будет зависеть от особенностей геометрии системы.

**Третья глава** «Моделирование термического намагничивания быстрозакаленных сплавов высокоанизотропных магнетиков» посвящена результатам исследования эффекта термического намагничивания поликристаллических сплавов высокоанизотропных магнетиков на модели МСС.

Моделируемый эксперимент ТН состоял из двух этапов. Первоначально проводилось моделирование процесса размагничивания системы обратным полем из однородно намагниченного состояния. При построении решения в качестве начального приближения выбиралось однородно намагниченное состояние в достаточно большом поле – точка 1 на рис. 2. Затем величина внешнего поля H равномерно изменялась до величины  $H_R$ , при этом система равновесно перемещалась в точку 2. Точка 2 выбиралась таким образом, что при выключении внешнего поля система приходила бы в частично или полностью размагниченное состояние ное состояние (точка 3).



Рис. 2. Схема размагничивания МСС обратным полем (стрелками показано направление процесса размагничивания), где  $\overline{m}$  – намагниченность системы в начальном направлении внешнего магнитного поля H,  $H_R$  – величина обратного поля,  $H_C$  – коэрцитивная сила.

На следующем этапе моделировалось изменение намагниченности в отсутствии внешнего магнитного поля при изменении температуры. Изменение температуры выражалось через функциональную зависимость константы магнитной анизотропии от температуры, а другие параметры системы полагались неизменными (поскольку они гораздо слабее зависят от температуры). В ходе моделирования относительная величина констант анизотропии  $K_1/K_1^0$  и  $K_2/K_2^0$ , где  $K_1^0$  и  $K_2^0$  – значения  $K_1$  и  $K_2$  при температуре T = 293K, соответственно, равномерно уменьшалась от 1 до 0.01, а затем увеличивалась до исходного значения. В качестве начального приближения выбиралось частично или полностью размагниченное состояние (точка 3) с  $K_1/K_1^0 = 1$  и  $K_2/K_2^0 = 1$ , а для каждого следующего значения констант анизотропии находилось новое равновесное состояние системы и фиксировалась ее намагниченность. Соответствующее изменение температуры для магнетика Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B, показано на рисунках.

В работе изучались многослойные системы, различных типов, состоящие из 50 слоев. Для общности полученных результатов толщина слоев d представлена в единицах  $\sqrt{A/K_1}$ , а величина внешнего поля *H* в единицах  $2K_1/M_s$ . В расчетах использовались значения магнитных параметров магнетика Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B: *A* =  $1.7 \times 10^{-6}$  эрг/см,  $M_s = 1275\Gamma$ c,  $K_1 = 4.5 \times 10^7$  эрг/см<sup>3</sup>,  $K_2 = 0.66 \times 10^7$  эрг/см<sup>3</sup> и экспериментальная зависимость констант анизотропии от температуры.

В ходе исследования эффекта термического намагничивания рассматривались следующие многослойные системы: 1) система с компланарными осями легкого намагничивания без прослоек, в которой присутствует обменное взаимодействие между слоями и отсутствуют магнитостатические поля рассеяния; 2) система с ортогональными слоям осями легкого намагничивания, имеющая немагнитные прослойки, которые исключали обменное и магнитостатическое взаимодействия между слоями; 3) система с некомпланарными осями легкого намагничивания без прослоек, в которой имеют место обменное и магнитостатическое взаимодействия между слоями.

В первом случае (система с компланарными ОЛН) эффект ТН наблюдается при отсутствии магнитостатического взаимодействия, что позволяет объяснить его исключительно обменным взаимодействием. Характер термического намагничивания (в результате изменения константы анизотропии) качественно сходен для разных толщин слоев. При нагревании системы после её полного или частичного размагничивания обратным полем намагниченность изменяется сначала слабо, а затем при некоторой температуре резко возрастает (рис. 3).

Величина эффекта термического намагничивания  $\Delta M_{term}$  (определение  $\Delta M_{term}$  показано на рис. 3 для случая d = 0.2) значительно зависит от толщины слоев системы и менее от характера случайного распределения ОЛН. При уменьшении толщины слоев от 2.0 наблюдается значительное увеличение термического намагничивания системы до значения  $\approx 0.85$ -0.9, что объясняется усилением роли обменного взаимодействия. При увеличении толщины слоев от 2.0 происходит плавное падение значения до  $\approx 0.1$ -0.2 в зависимости от характера случайного распределения ОЛН рис. 4.

Резкие скачки намагниченности на кривых изменения намагниченности системы обусловлены намагничиванием групп слоев при уменьшении их магнитной анизотропии. В отсутствии внешнего поля обменное взаимодействие между кристаллитами приводит к образованию больших блоков с модулиро-



Рис. 3. Кривые изменения намагниченности системы, состоящей из 50 слоев (1 случай) с одинаковой случайной выборкой ОЛН и различной толщиной слоя d, в цикле



Рис. 4. Зависимость величины термического намагничивания системы из 50 слоев (1 случай) от толщины слоя, точками обозначены значения, соответствующие различным случайным выборкам ОЛН.

ванным квазиоднородным распределением намагниченности, так называемых доменов обменного взаимодействия (ДОВ) и переходных областей между ними – «доменных» границ (рис. 5). Для слоев, составляющих ДОВ, помимо собст-

венных («локальных») ОЛН можно определить общую макроскопическую ось легкого намагничивания.

С увеличением температуры (уменьшением констант магнитной анизотропии слоев) слои с разрозненной ориентацией намагниченности объединяются в домены обменного взаимодействия, а также малые по размеру домены объединяются в более крупные. Причем такое объединение не всегда приводит к росту намагниченности в направлении первоначальной намагниченности системы (до размагничивания), в результате наблюдается немонотонная зависимость намагниченности от температуры на рис. 3.



Рис. 5. Домены обменного взаимодействия в системе, состоящей из 50 слоев, при толщине слоя d = 0.25 и K1/K<sub>1</sub><sup>0</sup> = 1. Ступенчатая линия – ориентация ОЛН, плавная – ориентация векторов намагниченности. Размер ДОВ составляет 21-22 слоя, а размер «доменной» границы 7 слоев.

Во втором случае, когда система имеет немагнитные прослойки, исключающие обменное и магнитостатическое взаимодействие между слоями (первоначально векторы намагниченности соседних слоев были антипараллельны, а значения констант анизотропии последовательно составляли  $\{K_1, K_2\}$  и  $\{\lambda K_1, \lambda K_2\}$ , где  $\lambda \in \{0.1, 0.2, ..., 0.9\}$ ) эффект ТН наблюдается лишь в некотором промежутке температур за счет поворота векторов намагниченности **m** в слоях с малой анизотропией в плоскость слоев. Такой поворот соответствует



b)



Рис. 6. Кривая изменения намагниченности системы из 50 слоев (2 случай), толщина слоя d = 0.5. Константа анизотропии в соседних слоях составляла последовательно (a) { $K_1$ ,  $K_2$ } и {0.5  $K_1$ , 0.5  $K_2$ }; (b) { $K_1$ ,  $K_2$ } и {0.3  $K_1$ , 0.3  $K_2$ }. Система показана упрощенно, состоящей из 4 слоев без прослоек. Знаками «→» «•→» показано, соответственно, нагревание и охлаждение системы,  $\overline{m^z} = \int_0^1 m^z(z) dz$ . понижению свободной энергии за счет значительного уменьшения магнитостатической энергии системы при некотором росте энергии анизотропии (рис. 6).

При дальнейшем росте температуры векторы намагниченности **m** ориентируются в плоскости и в высокоанизотропных слоях. В результате образец полностью размагничивается. При охлаждении процесс изменения ориентации векторов намагниченности происходит в обратной последовательности с несколько смещенным и растянутым температурным промежутком намагниченности. В результате система приходит в исходное размагниченное состояние. Отмечено, что с уменьшением  $\lambda$  температурный промежуток намагниченности системы увеличивается, а левая и правая границы температурного промежутка намагниченности на участке нагревания определяются соотношениями:  $K_1/K_1^0 \approx 0.15$  и  $K_1/K_1^0 \approx 0.15\lambda$ . Результат, аналогичный показанному на рис. 6, получен и для систем с толщиной слоев d = 1.0 и d = 2.0.

В третьем случае (системы, в которых имеет место и обменное и магнитостатическое взаимодействия между слоями) моделирование эффекта ТН показывает, что магнитостатические поля препятствуют термическому намагничиванию системы.

Здесь усиление роли магнитостатического поля моделировалось увеличением степени некомпланарности ОЛН в слоях системы, которая задавалась параметром  $\gamma_{max}$  – наибольшим значением случайно задаваемых углов отклонения ОЛН от плоскости слоев. Других ограничений на случайную ориентацию осей не было.

При каждом фиксированном параметре  $\gamma_{max}$  моделирование проводилось для 5 случайных выборок углов отклонения ОЛН в слоях системы от плоскости слоев, причем проекции ОЛН на плоскость слоев в выборке для различных значений параметра  $\gamma_{max}$  оставались неизменны. Для каждой выборки рассчитывалась величина  $\Delta M_{term}$  (рис. 7). Как видно из рисунка, с повышением роли магнитостатического взаимодействия (увеличением отклонения ОЛН от плоскости слоев) термическое намагничивание убывает. Также в исследовании было отмечено, что уменьшение толщины слоев до 0.1 (в 10 раз) приводило к увеличению термического намагничивания  $\Delta M_{term}$ , что связывалось с повышением роли обменного взаимодействия.

Механизм возникновения эффекта термического намагничивания и его убывания с увеличением параметра  $\gamma_{max}$  можно пояснить на упрощенной системе, состоящей из 3 слоёв. Пусть в слоях 1, 2, и 3 (рис. 8*a*) ОЛН лежат в плос-



Рис. 7. Зависимость термического намагничивания  $\Delta M_{term}$  от некомпланарности легких осей  $\gamma_{max}$  в системе с толщиной слоев d = 1.0.



Рис. 8. Термическое намагничивание в трехслойной системе. Векторы **m**<sub>i</sub> – намагниченность i-го слоя. Пунктирной линией показаны оси легкого намагничивания.

кости слоев, что соответствует  $\gamma_{max} = 0$  и повернуты каждая последующая относительно предыдущей на  $\pi/3$  рад. В начальном (при комнатной температуре) размагниченном состоянии векторы намагниченности в каждом слое направлены по ОЛН так, что  $\mathbf{m}_1 + \mathbf{m}_2 + \mathbf{m}_3 = \mathbf{0}$ . При нагревании анизотропия слоев понижается, и обменное взаимодействие стремится ориентировать все векторы намагниченности в одном направлении (рис. 8b). Это означает, что намагниченность системы стремится к насыщению. После охлаждения векторы намагниченности вновь ориентируются по ОЛН, однако в слоях 1 и 3 их ориентация противоположна ориентации в начальном состоянии (рис. 8с). Намагниченность системы в этом состоянии составляет 2/3 от насыщения и направлена вдоль легкой оси слоя 2. Таким образом, размагниченная в исходном состоянии система в результате цикла нагревание-охлаждение намагнитилась. Если оси в слоях 1 и 3 отклонить на угол  $\gamma < \pi/2$  в противоположные направления от плоскости слоев (при сохранении проекций осей на плоскость слоев), то после охлаждения системы суммарный вектор намагниченности  $m_1 + m_2 + m_3$  будет по-прежнему направлен по вектору  $\mathbf{m}_{2}$  (рис. 8*d*), но он уменьшится из-за уменьшения суммы  $m_1 + m_3$ , которая стремится к нулевому вектору при  $\gamma \rightarrow \pi/2$ .

Полученные в третьем случае результаты подтверждают предположение о том, что в многослойной системе ТН может быть обусловлено исключительно обменным взаимодействием и возрастает с увеличением степени дисперсности образцов, что согласуется с результатами экспериментальных исследований [3].

Таким образом, проведенное теоретическое исследование показывает, что механизм модели А.А. Зайцева – А.С. Лилеева, т.е. ориентации намагниченности в слоях с малой анизотропией по направлению намагниченности высокоанизотропных слоев из-за их магнитостатического взаимодействия, в многослойной стохастической системе не реализуется.

Однако вывод о том, что магнитостатические поля препятствуют намагничиванию нельзя переносить на любые системы. Моделирование термического намагничивания в монокристалле стержневидной формы с поперечной ориентацией легкой оси показывает, что магнитостатическое поле способствует термическому намагничиванию, ориентируя поле **m** в продольном направлении. В данном случае рассматривались длинные монокристаллические призмы  $Nd_2Fe_{14}B$  с квадратными поперечными сечениями  $D \times D$ . Оси Ох и Оу коорди-

натной системы ортогональны граням призмы, а ось Oz ортогональна сечению, а ось легкого намагничивания направлена по оси Ox.

В начальном состоянии (при комнатной температуре) векторы намагниченности **m** выбирались случайно ориентированными и лежащими в плоскости поперечного сечения. Случайная ориентация векторов намагниченности моделировала размагничивание образца высокочастотным внешним полем, действующим в плоскости поперечного сечения монокристалла. При этом некоторые случайные выборки поля **m** приводили в однородно намагниченное по оси Ox состояние (стабильное), другие – в слабо намагниченное по оси Oz двухдоменное (метастабильное) состояние, которое использовалось в качестве начального для цикла нагревание-охлаждение (рис. 9). Повышение температуры образца моделировалось уменьшением констант анизотропии  $K_1$  и  $K_2$ , которое проводилось путем их умножения на температурный коэффициент  $K_T$  при неизменных прочих параметрах системы. В показанном на рис. 9 процессе нагреваниеохлаждение монокристалла Nd<sub>2</sub>Fe<sub>14</sub>B коэффициент  $K_T$  уменьшался при нагревании от 1 до 0.085, а затем при охлаждении увеличивался до 1.

Нагревание образца размером D = 21.1 нм приводит к росту вектора намагниченности монокристалла  $\bar{\mathbf{m}} = \iint_{D} \mathbf{m} \, dx dy$  в продольном направлении, который при  $\mathbf{K}_T = 0.138$  скачком возрастает до насыщения ( $\bar{m} = |\bar{\mathbf{m}}| = 1$ ) и поворачивается на 90<sup>0</sup> к оси Ох. При дальнейшем нагревании (до  $\mathbf{K}_T = 0.085$ ) вектор намагниченности вновь поворачивается к продольному направлению. Охлаждение монокристалла (увеличение  $\mathbf{K}_T$  от 0.085 до 0.138) проходит по соответствующему участку кривой нагревания, т.е. сопровождается поворотом вектора  $\mathbf{m}$  к оси Ох с сохранением магнитного насыщения. При дальнейшем охлаждении (до  $\mathbf{K}_T = 1$ ) вектор  $\bar{\mathbf{m}}$  не изменяется.

Таким образом, в результате цикла нагревание-охлаждение монокристалл переходит в стабильное состояние однородной намагниченности по оси Ох. Повторение цикла приводит только к повороту вектора  $\bar{\mathbf{m}}$ . Данный поворот объясняется тем, что при низкой температуре из-за высокой анизотропии энергетически выгодна ориентация намагниченности вдоль легкой оси (оси Ох). Нагревание приводит к понижению анизотропии и намагниченность поворачивается к продольному направлению, в котором минимальна магнитостатическая энергия системы.



Рис. 9. Изменение величины намагниченности монокристалла  $\overline{m} = |\overline{\mathbf{m}}|$  в цикле нагреваниеохлаждение, размер монокристалла D = 21.1 нм. Справа показана проекция начального состояния поля намагниченности **m** на сетку  $21 \times 21$  в плоскости поперечного сечения.

Для монокристалла меньшего размера с D = 12 нм возможно одно равновесное состояние – однодоменное. Поэтому цикл нагревание-охлаждение приводит только к повороту вектора  $\overline{\mathbf{m}}$  без изменения его величины. В монокристалле большего размера с D = 24.1 нм кривая намагничивания при нагревании аналогична показанной на рис. 9, однако при охлаждении монокристалл возвращается в исходное двухдоменное метастабильное состояние, т.е. размагничивается. Для рассматриваемого монокристалла эффект термического намагничивания возможен в некотором диапазоне размеров между D = 12 нм и D = 24.1 нм.

Таким образом, проведенное в главе исследование эффекта термического намагничивания в различных многослойных системах, а также длинных монокристаллических призмах позволило уточнить общие представления о микромагнитном поведении дисперсных поликристаллических сплавов высокоанизотропных магнетиков и теоретически обосновать возможность нового механизма эффекта термического намагничивания в них, отличного от механизма моделей А.А. Зайцева – А.С. Лилеева и Р. Шумана – Л. Яна.

В заключении приведены общие итоги исследования, сформулированы выводы.

#### ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Разработаны две методики расчёта магнитостатического потенциала многослойной стохастической системы: 1) путем решения дифференциального уравнения; 2) путем вычисления значения магнитостатического потенциала, создаваемого объемными и поверхностными магнитными источниками по интегральной формуле.

2. Разработана методика численной минимизации функционала свободной энергии многослойной стохастической системы, впервые учитывающая возникновение и влияние магнитостатических полей рассеяния.

3. Впервые проведено теоретическое исследование микромагнитных свойств многослойных стохастических систем с некомпланарным распределением осей легкого намагничивания в слоях, учитывающее возникновение и влияние магнитостатических полей;

4. В протяженных системах, состоящих из 50 и более слоев, наблюдается формирование «доменов обменного взаимодействия», объединяющих большие группы слоев со случайной ориентацией осей легкого намагничивания, характерный размер ДОВ зависит от толщины слоев, увеличиваясь с уменьшением последней. Выявлено, что влияние магнитостатических полей рассеяния приводит к уменьшению размера ДОВ, а также величины остаточной намагниченности и коэрцитивной силы.

5. На модели многослойной стохастической системы в рамках теории микромагнетизма обоснована возможность нового механизма эффекта термического намагничивания в быстрозакаленных поликристаллических сплавах, отличного от механизма моделей А.А. Зайцева – А.С. Лилеева и Р. Шумана – Л. Яна. Обоснована возможность объяснения эффекта термического намагничивания в структурно-изотропных быстрозакаленных сплавах только обменным взаимодействием по границам кристаллитов.

6. Магнитостатическое поле, возникающее из-за некомпланарности осей легкого намагничивания, приводит к уменьшению эффекта ТН, однако для монокристалла стержневидной формы с поперечной ориентацией легкой оси магнитостатическое поле способствует термическому намагничиванию.

7. Выявлено, что исключение обменного и магнитостатического взаимодействия в многослойной стохастической системе приводит к исчезновению эффекта ТН. В этом случае при повышении температуры намагниченность в

системе слоев с различными значениями коэффициентов анизотропии может возникать лишь в некотором температурном промежутке.

# Основное содержание результатов исследования отражено в следующих публикациях автора:

Публикации в ведущих рецензируемых научных журналах, рекомендованных перечнем ВАК РФ

1. Манаков, Н. А. О возможном механизме термического намагничивания быстрозакаленных сплавов высокоанизотропных магнетиков [Текст] / Н. А. Манаков, М. В. Плетнёва, Ю. В. Толстобров // ФММ. – 2005. – Т. 99, № 1. – С. 14-17.

2. Плетнёва, М. В. К вопросу о роли магнитостатического взаимодействия в эффекте термического намагничивания мелкокристаллических сплавов высокоанизотропных магнетиков [Текст] / М. В. Плетнёва, Ю. В. Толстобров, Н. А. Манаков // Письма в ЖТФ. – 2005. – Т. 31, вып. 19. – С. 84-87.

3. Манаков, Н. А. Термическое намагничивание высокоанизотропных магнетиков [Текст] / Н. А. Манаков, М. В. Плетнёва, Ю. В. Толстобров // Вестник ОГУ. – 2006. – Т. 2, № 1. – С. 76-80.

4. Толстобров, Ю. В. Эффект термического намагничивания в высокоанизотропном монокристалле [Текст] / Ю. В. Толстобров, Н. А. Манаков, М. В. Плетнёва // Письма в ЖТФ. – 2006. – Т. 32, вып. 8. – С. 10-13.

5. Плетнёва, М. В. Роль обменного и магнитостатического взаимодействий в эффекте термического намагничивания мелкокристаллических сплавов высокоанизотропных магнетиков [Текст] / М. В. Плетнёва, Н. А. Манаков, Ю. В. Толстобров // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2007. – Т. 50, № 8. – С. 8-16.

### Публикации в других изданиях:

6. Плетнёва, М. В. Численное моделирование распределения намагниченности многослойной стохастической системы с некомпланарными осями легкого намагничивания [Текст] / М. В. Плетнёва, Ю. В. Толстобров, Н. А. Манаков // Информационные технологии в экономике, науке и образовании: Материалы 2-ой Всерос. научно-практич. конф. (Бийск, 19-20 апр. 2001 г.). – Бийск : НИЦ БТИ АлтГТУ, 2001. – С. 112-114.

7. Манаков, Н. А. К вопросу о численном микромагнитном моделировании гистерезисных свойств дисперсных поликристаллических сплавов высокоани-

зотропных магнетиков [Текст] / Н. А. Манаков, М. В. Плетнёва, Ю. В. Толстобров // Информационные технологии в экономике, науке и образовании: Материалы 4-ой Всерос. научно-практич. конф. (Бийск, 22-23 апр. 2004 г.). – Бийск : НИЦ БТИ АлтГТУ, 2004. – С. 117-121.

8. Толстобров, Ю. В. Моделирование эффекта термического намагничивания быстрозакаленных сплавов высокоанизотропных магнетиков [Текст] / Ю. В. Толстобров, М. В. Плетнёва // Измерения, автоматизация и моделирование в промышленности и научных исследованиях: Межвузовский сборник. – Бийск : НИЦ БТИ АлтГТУ, 2004. – С. 68-71.

9. Манаков, Н. А. Численное моделирование микромагнитных свойств многослойных структур [Текст] / Н. А. Манаков, М. В. Плетнёва, М. Д. Старостенков, Ю. В. Толстобров // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2004. – № 2. – С. 96-102.

10. Плетнёва, М. В. Роль обменного и магнитостатического взаимодействий в эффекте термического намагничивания мелкокристаллических сплавов высокоанизотропных магнетиков [Текст] / М. В. Плетнёва // Молодые ученые – науке, технологиям и профессиональному образованию в электронике: Материалы Международной науч.-технич. школы-конф. (Москва, 26-30 сент. 2005 г.). – М.: МИРЭА, 2005. – С. 237-241.

11. Ерёмин, А. М. Численное моделирование гистерезиса одноосного высокоанизотропного магнетика с когерентно и некогерентно связанными магнитными выделениями [Текст] / А. М. Ерёмин, М. В. Плетнёва // Молодые ученые – науке, технологиям и профессиональному образованию в электронике: Материалы Международной научно-технич. школы-конф. (Москва, 26-30 сент. 2005 г.). – М. : МИРЭА, 2005. – С. 199-202.

12. Толстобров, Ю. В. Эффект термического намагничивания в одноосном монокристалле [Текст] / Ю. В. Толстобров, Н. А. Манаков, М. В. Плетнёва // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. – 2005. – Т. 2, № 1. – С. 110-113.

13. Плетнёва, М. В. Влияние различий констант анизотропии в слоях многослойной стохастической системы на эффект термического намагничивания [Текст] / М. В. Плетнёва, Ю. В. Толстобров, Н. А. Манаков // Фундаментальные науки и образование: Материалы Всероссийской научно-практической конференции (Бийск, 3-4 февр. 2006 г.) / Бийский пед. гос. ун-т им. В.М. Шукшина. – Бийск : БПГУ им. В. М. Шукшина, 2006. – С. 108-110. 14. Толстобров, Ю. В. Потенциал магнитостатического поля бесконечно длинного стержня / Ю. В. Толстобров, М. В. Плетнёва, Н. А. Манаков, Е. К. Борзенко // Фундаментальные науки и образование: Материалы Всероссийской научно-практической конференции (Бийск, 3-4 февр. 2006 г.) / Бийский пед. гос. ун-т им. В. М. Шукшина. – Бийск : БПГУ им. В. М. Шукшина, 2006. – С. 102-105.

15. Манаков, Н. А. Термическое намагничивание высокоанизотропных магнетиков [Текст] / Н. А. Манаков, Ю. В. Толстобров, М. В. Плетнёва // Магнитные явления в физикохимии молекулярных систем: Программа и тезисы докладов Российско-Японского семинара (Оренбург, 11 – 12 октября 2006 г.). – Оренбург : ОГУ, 2006. – С. 44.

16. Плетнёва, М. В. Численное моделирование перемагничивания двухслойной обменно-связанной ферромагнитной пленки [Текст] / М. В. Плетнёва, Ю. В. Толстобров, А. М. Ерёмин // Фундаментальные науки и образование: Материалы II Всероссийской научно-практической конференции (Бийск, 30 янв.-4 февр. 2008 г.) / Бийский пед. гос. ун-т им. В. М. Шукшина. – Бийск: БПГУ им. В. М.Шукшина, 2008. – С. 90-93.

## СПИСОК ЦИТИРОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Лифшиц, Б. Г. Эффекты термического намагничивания и реставрации коэрцитивной силы спеченных SmCo<sub>5</sub> магнитов [Текст] / Б. Г. Лифшиц, А. С. Лилеев, В. П. Менушенков // Изв. ВУЗов: Черная металлургия. – 1974. – № 11. – С. 140-141.

2. Lileev, A. S. Thermal remagnetization in permanent magnets [Текст] / A. S. Lileev, V. P. Menushenkov, A. M Gabay // J. Magn. Magn. Mat. – 1992. – Vol. 117, No. 1. – P. 270-274.

3. Манаков, Н. А. Термическое намагничивание быстрозакаленных сплавов высокоанизотропных магнетиков [Текст] / Н. А. Манаков // Физика магнитных материалов. – Иркутск, 1993 – С. 42-45.

4. Schumann, R. Theory of thermal remagnetization of permanent magnets [Текст] / R. Schumann, L. Jahn // J. Magn. Magn. Mater. – 2001. – Vol. 232, No. 3. – P. 231-243.

5. Браун, У. Ф. Микромагнетизм [Текст] / У. Ф. Браун. – М. : Наука, 1979. – 159 с.

6. Манаков, Н. А. Численное моделирование процессов перемагничивания изотропных микрокристаллических сплавов высокоанизотропных магнетиков в одномерном приближении [Текст] / Н. А. Манаков, М. А. Почернин // ФММ. – 1991. – № 6. – С. 199-201.

7. Иванов, А. А. Структура намагниченности стохастического магнетика [Текст] / А. А. Иванов, Г. О. Патрушев // ФММ. – 1998. – Т. 86, № 4. – С. 5-12.