

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего профессионального образования

УРАЛЬСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

имени первого Президента России Б. Н. Ельцина

ИНСТИТУТ ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК

Департамент «ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ»

**МОДЕЛИРОВАНИЕ МАГНИТНЫХ ГИСТЕРЕЗИСНЫХ СВОЙСТВ
АНСАМБЛЯ ОБМЕННОСВЯЗАННЫХ ОДНОДОМЕННЫХ ЧАСТИЦ**

Направление подготовки «Нанотехнологии и микросистемная техника»

Магистерская программа «Материалы микро- и наносистемной техники»

Допустить к защите:

Магистерская диссертация

Первый зам. директора ИЕН:
д. ф.-м. н., проф. А. Н. Бабушкин

**Болячкина
Антон Сергеевича**

Нормоконтролер:

Научный руководитель:

д. ф.-м. н., проф. А. Н. Бабушкин

к.ф.-м.н., А. С. Волегов

Екатеринбург
2014

РЕФЕРАТ

В настоящей работе представлены результаты моделирования магнитных гистерезисных свойств ансамбля обменносвязанных однодоменных частиц. Для выполнения компьютерного моделирования разработан пакет компьютерных программ в среде MATLAB, позволяющий моделировать и анализировать предельные и частные петли магнитного гистерезиса для однофазных и многофазных ансамблей с различными типами магнитной анизотропии, упорядочением фаз, спецификацией взаимодействия между ними, а также при параметрической зависимости микроскопических констант от температуры. Все это реализовано в рамках модели однодоменных нанокристаллитов, имеющих однородную намагниченность, процесс изменения которой осуществляются за счет когерентного вращения. Разработан алгоритм параллельного расчета, позволяющий основные арифметические и логические операции выполнять на графических ускорителях. Вычислительная сложность последнего соответствует $O(\log(N))$, против сложности $O(N)$ аналогичных программ, вычисляющих на центральном процессоре.

В приближении слабой обменной связи аналитически установлены выражения для продольной и поперечной магнитной восприимчивости изотропного взаимодействующего ансамбля в состоянии остаточной намагниченности. На их основе разработана экспериментальная методика определения константы межзеренного обменного взаимодействия и эффективной константы одноосной магнитной анизотропии изотропных нанокристаллических постоянных магнитов. Показан рост продольной и поперечной магнитной восприимчивости для состояний остаточной намагниченности, сформированными отрицательными внешними магнитными полями, соответствующими необратимому процессу перемангничивания ансамбля. Равенство продольной и поперечной магнитной восприимчивости достигается при релаксационной коэрцитивной силе. Показано качественное соответствие полученных численных результатов соответствующим экспериментальным данным для системы Nd-Fe-B.

Выполнен количественный анализ кривых $\delta m(H)$ изотропного ансамбля однодоменных одноосных зерен в приближении слабой обменной связи между ними. Впервые установлены выражения, связывающее максимальное значение $\delta m(H)$ с микроскопическими параметрами ансамбля для двумерного и трехмерного случаев. Данные выражения служат основой для независимой оценки снизу константы межзеренного обменного взаимодействия изотропных нанокристаллических постоянных магнитов.

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	4
1 ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР.....	5
1.1 Классические модели магнитного гистерезиса	5
1.1.1 Модель Стонера-Вольфарта	5
1.1.2 Модель Джайлса-Атертона.....	7
1.1.3 Модель Глобуса	8
1.1.4 Модель Прейзаха	9
1.2 Обменносвязанный ансамбль Стонера-Вольфарта	10
1.2.1 Приближение среднего поля	11
1.2.1 Микроскопическое описание	12
1.3 Анализ взаимодействий в ансамбле Стонера-Вольфарта.....	15
1.3.1 Методы графиков Хенкеля и $\delta m(H)$	15
1.3.2 Продольная магнитная восприимчивость	19
1.4 Интерметаллид $Nd_2Fe_{14}V$ – объект моделирования	21
2 ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ	23
3 МЕТОДИКА РАСЧЕТА.....	25
3.1 Среда разработки	25
3.2 Структура моделируемого ансамбля	26
3.3 Численный и визуальный анализ ансамбля	30
3.5 Алгоритмы поиска минимума энергии	31
3.5.1 Варьирование положения вектора намагниченности	32
3.5.2 Расчет с применением CPU	34
3.5.3 Расчет с применением GPU	36
4 РЕЗУЛЬТАТЫ ИХ ОБСУЖДЕНИЕ	38
4.1 Моделирование ансамбля невзаимодействующих зерен	38
4.2 Слабое межзеренное обменное взаимодействие	43
4.2.1 Эффект усиления остаточной намагниченности.....	43
4.2.2 Магнитная восприимчивость	45
4.2.3 Графики Хенкеля и $\delta m(H)$	54
4.2.4 Температурные зависимости остаточной намагниченности.....	58
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	62
БЛАГОДАРНОСТИ	64
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.....	65

ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ

СК – система координат

СПП – спонтанный спин-переориентационный переход

T_{sr} – температура спонтанного спин-переориентационного перехода

FOMP – first order magnetization process (индуцированный спин-переориентационный переход)

ОЛН – ось легкого намагничивания

ОТН – ось трудного намагничивания

КОЛН – конус осей легкого намагничивания

ТФ – магнитотвердая фаза

МФ – магнитомягкая фаза

MATLAB – MATrix LABoratory

CPU (central processing unit) – центральный процессор

GPU (graphics processing unit) – графический процессор

ТР – теоретический результат

РР – расчетный результат

H_a – поле магнитной анизотропии

С-В ансамбль – ансамбль Стонера-Вольфарта

M_s – спонтанная намагниченность

J_{IEI} – константа межзеренного обменного взаимодействия

α – параметр взаимодействия (вводится на стр. 12)

γ – параметр среднего поля (стр. 11)

T_C – температура Кюри

K_1 – константа магнитной анизотропии

H_C – коэрцитивная сила

δ_B – ширина доменной стенки Блоха

R_{sd} – критический размер однодоменности

$M_r(H)$ – изотермическая остаточная намагниченность (isothermal magnetization remanence)

$M_d(H)$ – остаточной намагниченностью перемагничивания (dc demagnetization remanence)

СКВИД – сверхпроводящий квантовый интерферометр Джозефсона

ВВЕДЕНИЕ

Компьютерное моделирование, в частности микромагнитные расчеты, являются важным инструментом в решении как прикладных, так и фундаментальных задач теории магнетизма. Значительный вклад в развитие математического аппарата и методик моделирования в свое время внесли Stoner E., Wohlfarth E., Jiles D., Atherton D., Aharoni A., Kronmüller H., Schrefl T. и многие другие выдающиеся физики. Данное направление вычислительной физики продолжает динамично развиваться. В последние годы микромагнитное моделирование активно используется в исследованиях магнитных свойств наноматериалов, что определяется как интересом к последним, так и тем, что закладываемые в компьютерные модели предположения и допущения в большей степени справедливы именно для них, нежели для микрообъектов [1]. Помимо этого идет активный поиск решения ряда стандартных проблем микромагнитного моделирования, совершенствуются методики и способы расчета в соответствии с успехами в развитии микроэлектроники и процессорной техники [2].

Применение микромагнитного моделирования к исследованию магнитных гистерезисных свойств ансамбля обменносвязанных однодоменных частиц продиктовано интересом к определению зависимости последних от микроструктурных параметров парных взаимодействий, разработке современных экспериментальных методик по определению константы межзеренного обменного взаимодействия на основе анализа данных свойств. Последнее играет ключевую роль в создании новых функциональных материалов на основе обменносвязанных нанокompозитов мягкой и твердой магнитных фаз [3], с которыми связывают наиболее вероятный рост максимального энергетического произведения постоянных магнитов по сравнению с промышленно достигнутым значением $(BH)_{\max}$ около 50 МГсЭ. Как иная альтернатива, также активно рассматривается возможность создания в тех же целях нанокompозитов на основе ферромагнитных и антиферромагнитных фаз [4], для чего выполняется поиск подходящего высокоанизотропного антиферромагнетика ($L1_0$: MnIr $K \approx -20.77 \cdot 10^6$ J/m³, MnPt $K \approx 1.39 \cdot 10^6$ J/m³ [5]). В обоих случаях существенное улучшение магнитных гистерезисных свойств, в сравнении с исходными фазами, достигается за счет обменного взаимодействия между элементами интерфейса нанокompозита.

Все вышесказанное определяет актуальность и прикладное значение проведенного в рамках магистерской диссертации исследования методом компьютерного эксперимента магнитных гистерезисных свойств ансамбля обменносвязанных однодоменных частиц и разработанных методик определения константы межзеренного обменного взаимодействия.

1 ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР

1.1 КЛАССИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ МАГНИТНОГО ГИСТЕРЕЗИСА

Для сильномагнитных веществ (*магнитная восприимчивость* $\chi = \frac{dM}{dH} = [10^2 \div 10^6]$) характерна нелинейная зависимость намагниченности M от внешнего магнитного поля H , так же как и ее неоднозначность, как функции. Данный феномен известен как *магнитный гистерезис* (рис. 1.1). В основном причинами его возникновения могут быть: взаимодействия между доменами; магнитная анизотропия различных типов; задержки на дефектах структуры движения доменных стенок и вращения векторов намагниченности. Ключевыми параметрами петли магнитного гистерезиса являются: *коэрцитивная сила* H_c (внешнее магнитное поле, при котором предварительно намагниченный до технического насыщения образец приобретает нулевую намагниченность) и *остаточная намагниченность* M_r (намагниченность при нулевом магнитном поле предварительно намагниченного до технического насыщения образца).

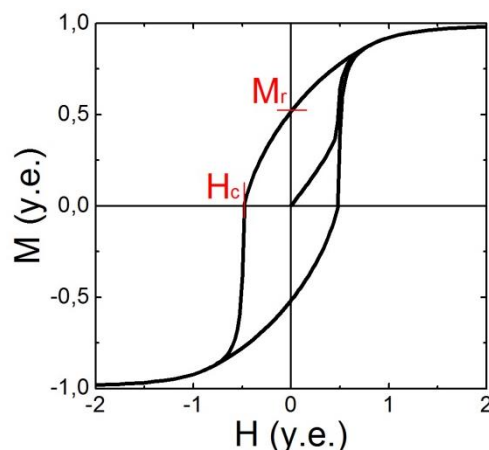


Рисунок 1.1 – Схематический вид петли магнитного гистерезиса с обозначенными коэрцитивной силой H_c и остаточной намагниченностью M_r .

Среди большого разнообразия научных работ, посвященных моделированию магнитного гистерезиса различных материалов, можно выделить четыре сформировавшихся подхода, которые теперь считаются классическими [6]: модель Стонера-Вольфарта, модель Джайлса-Атертона, модель Глобуса и модель Прейзаха.

1.1.1 Модель Стонера-Вольфарта

Классическая модель Стонера-Вольфарта [7] получила наиболее широкое распространение. Она описывает магнитные гистерезисные свойства поликристаллических ферромагнитных материалов, состоящих из невзаимодействующих однодоменных зерен (частиц) с одноосным типом анизотропии. Основное предположение, принимаемое в данной модели – *однородная намагниченность зерен*, что достигается за счет сильного межзатомного обменного взаимодействия в материале в сравнении с энергией анизотропии. Таким образом, для отдельного зерна процесс перемагничивания, осуществляемый за счет вращения вектора намагниченности, не изменяет обменную энергию зерна, меняется лишь энергия анизотропии и энергия Зеемана во внешнем магнитном поле.

Опуская вклад магнитоэластического взаимодействия, для рассматриваемого ансамбля энергия зерна i может быть записана в следующем виде:

$$E_i = -KV \left(\frac{\vec{M}_i \cdot \vec{n}_i}{|\vec{M}_i|} \right)^2 - \vec{M}_i \cdot \vec{H}, \quad (1.1)$$

где K – константа одноосной магнитокристаллической анизотропии, V – объем частицы, \vec{M}_i – магнитный момент i -ой частицы, \vec{n}_i – единичный вектор, сонаправленный с осью легкого намагничивания (ОЛН) i -ой частицы, \vec{H} – внешнее магнитное поле. Разделив выражение (1.1) на величину KV , можно получить выражение в более удобных относительных единицах $\vec{\mu}_i = \vec{M}_i/M_S$, $\vec{h} = \vec{H}/H_a$, где $H_a = 2K/M_S$ поле анизотропии. Тогда приведенную энергию можно переписать в виде:

$$\varepsilon_i = -(\vec{\mu}_i \cdot \vec{n}_i)^2 - 2\vec{\mu}_i \cdot \vec{h}. \quad (1.2)$$

Или же в полярной системе координат (рис. 1.2):

$$\varepsilon_i = \sin^2 \varphi_i - 2h \cdot \cos(\theta_i - \varphi_i) \quad (1.3)$$

Выполняя поиск равновесного положения $\left(\frac{d\varepsilon_i}{d\varphi_i} = 0, \frac{d^2\varepsilon_i}{d\varphi_i^2} > 0 \right)$ вектора намагниченности в зависимости от значения внешнего магнитного поля, можно воспроизвести полностью петлю магнитного гистерезиса отдельной частицы i ансамбля при различных углах ориентации оси легкого намагничивания к внешнему магнитному полю (рис. 1.3, а). Усреднение по всему ансамблю с учетом изотропного распределения осей ОЛН $\rho(\theta) = \sin \theta$ приводит к классической петле магнитного гистерезиса невзаимодействующего ансамбля Стонера-Вольфарта (С-В) со значениями остаточной намагниченности $0.5M_S$ и коэрцитивной силой $0.479H_a$ [7, 8].

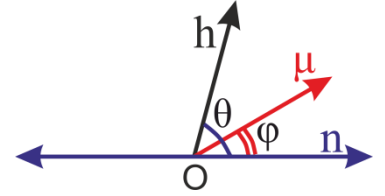


Рисунок 1.2 – Схема взаимной ориентации внешнего магнитного поля h , вектора намагниченности μ , и оси ОЛН n

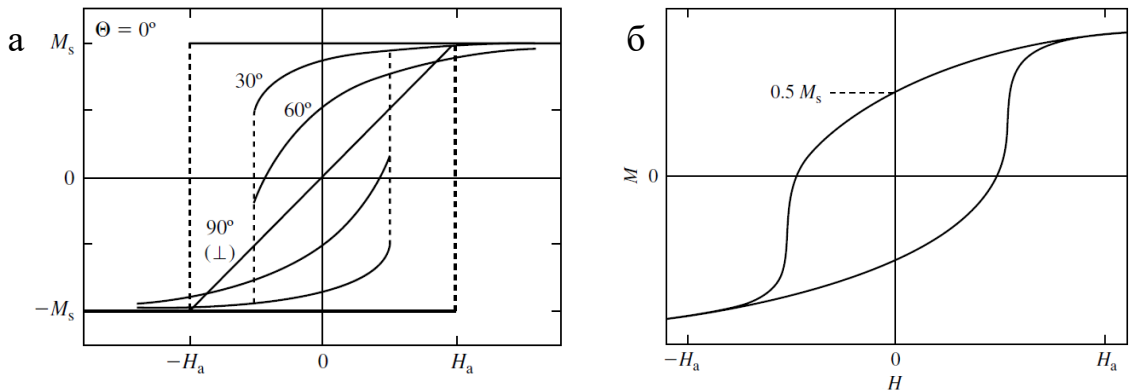


Рисунок 1.3 – (а) петли магнитного гистерезиса одноосных однодоменных частиц при различных углах θ между осью ОЛН и внешним магнитным полем, (б) петля магнитного гистерезиса невзаимодействующего ансамбля Стонера-Вольфарта [8]

Данная модель не ограничивается описанием лишь ферромагнитных материалов, она может быть легко расширена на ферримагнитное упорядочение и другие спиновые структуры, в том числе неколлинеарные с конкурирующим обменным взаимодействием [8]. Также возможен учет межзеренного взаимодействия на микроскопическом уровне [9] или же с использованием приближения среднего поля [10-12]; учет ненулевой температуры ансамбля [12, 13]; учет эффектов задержки вращения векторов намагниченности [6]; рассмотрение ансамбля однодоменных зерен с магнитной анизотропией, отличной от одноосной [14].

Модель Стонера-Вольфарта наиболее успешно применяется для анализа высококоэрцитивных материалов, в частности изотропных постоянных магнитов ($\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$, SmCo_5 , Fe-Pt и др.). Тем не менее, следует отметить ограничения при ее использовании: магнитостатическое взаимодействие и неоднородности структуры могут привести к значительным отклонениям наблюдаемых магнитных гистерезисных свойств от предсказываемых моделью. Так коэрцитивная сила на эксперименте достигает обычно значений 10 – 40 % от коэрцитивной силы ансамбля Стонера Вольфарта. Последнее является сутью парадокса Брауна.

1.1.2 Модель Джайлса-Атертона

Модель Джайлса-Атертона создана в попытке количественного описания петель магнитного гистерезиса изотропных поликристаллических материалов, состоящих из многодоменных частиц [15]. Соответственно, процесс перемагничивания в данной модели осуществляется преимущественно за счет движения доменных стенок. Для феноменологического описания зависимости $M(H)$ авторы воспользовались модифицированной функцией Ланжевена:

$$M = M_s \left[\coth \left(\frac{H + \gamma M}{a} \right) - \left(\frac{a}{H + \gamma M} \right) \right] = M_s \cdot L \left(\frac{H_{eff}}{a} \right), \quad (1.4)$$

где α – параметр среднего поля, интегрально характеризующий обменное взаимодействие между доменами, a – некоторый параметр, имеющий размерность магнитного поля и $H_{eff} \stackrel{\text{def}}{=} H + \gamma M$ эффективное магнитное поле. На рисунке 1.4 а представлен характерный вид петли магнитного гистерезиса при определенных параметрах, видно, что процесс перемагничивания, в силу сильного взаимодействия между доменами, происходит резко, с практически вертикальным наклоном кривой $M(H)$ вблизи коэрцитивной силы. Для описания более сглаженных экспериментальных петель гистерезиса Джайлс и Атертон ввели равномерное по объему моделируемого материала распределение центров пиннинга доменной стенки (концентрация центров n) с одинаковой плотностью энергии ε_p . С учетом

этого, опуская математические выкладки [6], предельная петля магнитного гистерезиса определяется выражением:

$$\begin{cases} M_+ = L\left(\frac{H_{eff}}{a}\right) + kL^{(1)}\left(\frac{H_{eff}}{a}\right) + k^2L^{(2)}\left(\frac{H_{eff}}{a}\right) + kL^{(1)}\left(\frac{\max(H_{eff})}{a}\right), & (H \uparrow) \\ M_- = L\left(\frac{H_{eff}}{a}\right) - kL^{(1)}\left(\frac{H_{eff}}{a}\right) + k^2L^{(2)}\left(\frac{H_{eff}}{a}\right) - kL^{(1)}\left(\frac{\max(H_{eff})}{a}\right), & (H \downarrow) \end{cases} \quad (1.5)$$

где $k \stackrel{\text{def}}{=} \frac{n\varepsilon p}{2M_s}$, $L^{(1)}$ и $L^{(2)}$ соответственно первая и вторая производные функции Ланжевена. На рисунке 1.4 б представлена петля магнитного гистерезиса на основе данного выражения при определенных параметрах.

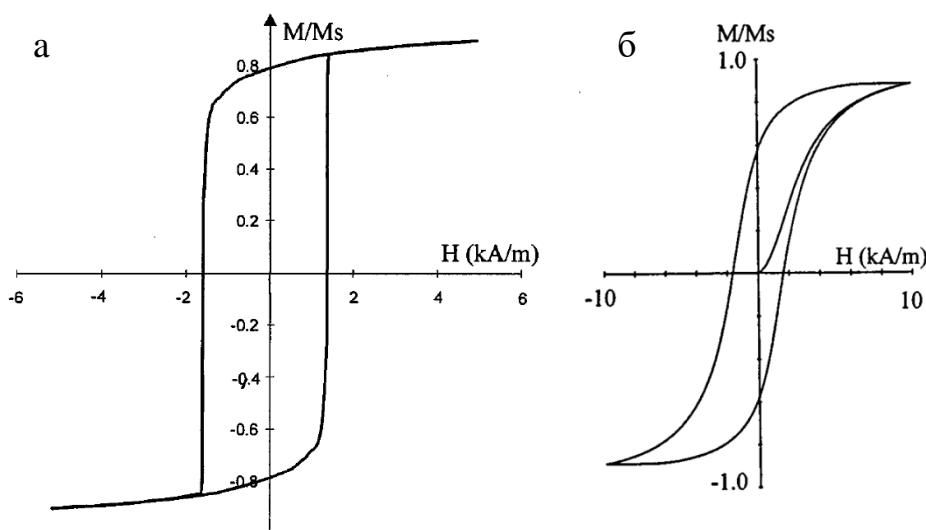


Рисунок 1.4 – Петли магнитного гистерезиса модели Джайлса-Атертона (а) в соответствии с формулой 1.4 ($M_s = 1.6 \cdot \text{МА/м}$, $a = 1100 \text{ А/м}$, $\gamma = 4 \cdot 10^{-3}$) и (б) при учете пиннинга доменных стенок по выражению 1.5 ($M_s = 1.7 \cdot \text{МА/м}$, $a = 1 \text{ кА/м}$, $\gamma = 10^{-3}$, $k = 2 \text{ кА/м}$)

Модель магнитного гистерезиса Джайлса-Атертона активно используется для анализа процессов намагничивания и перемагничивания ферритов [16], электротехнической сталей [17, 18] и в других случаях, когда преобладающим механизмом является смещение доменных стенок.

1.1.3 Модель Глобуса

В 1976 году Глобус [19] предположил, что в поликристаллическом магнитомягком материале в форме кольца, состоящем из бездефектных зерен, (рис 1.5, а) наблюдается радиальное распределение 180° доменных стенок. Допустив, что в среднем только одна доменная стенка приходится на зерно, Глобус перешел к модельному описанию образца в виде усредненного сферического кристаллита, в котором присутствуют два несимметричных домена (рис 1.5, б). Таким образом,

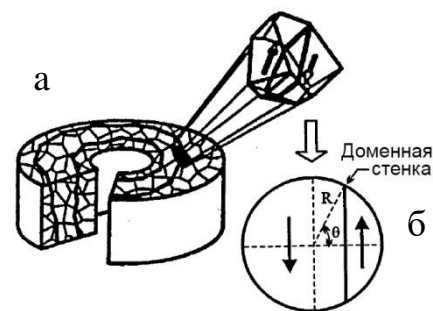


Рисунок 1.5 – Схема взаимной ориентации внешнего магнитного поля h , вектора намагниченности μ , и оси ОЛН n

процесс перемагничивания осуществляется за счет движения доменной стенки внутри зерна с учетом пиннинга на его границах. Он может быть описан как комбинация обратимого и необратимого процесса намагничивания. Первый связан с изгибом доменной стенки под действием внешнего магнитного поля, и вклад в намагниченность от этого процесса определяется выражением:

$$M_{rev} = \frac{3}{4} M_S^2 \frac{R}{\gamma} H, \quad (1.6)$$

где R – радиус зерна, γ – плотность энергии доменной стенки. Необратимое перемагничивание заключается в движении доменной стенки, вклад в намагниченность от данного процесса определяется системой:

$$\begin{cases} H = \frac{f + \gamma \cos \theta}{M_S R \sin^2 \theta} \\ M_{irr} = \frac{1}{2} M_S \cos \theta (2 + \sin^2 \theta) \end{cases}, \quad (1.7)$$

Преимущество данной простой модели при описании магнитных гистерезисных свойств магнитомягких материалов заключается в наличии плотности энергии доменной стенки, как параметра. В этом заключается одно из отличий от модели Джайлса-Атертона. Другое отличие состоит в разном распределении центров пиннинга доменной стенки – задержку отвечают только границы зерен, а неравномерное распределение центров пиннинга по объему, как в предыдущей модели. Тем не менее, узкая область магнитных полей, для которых справедливо модельное представление Глобуса, отсутствие принципиальной возможности учесть взаимодействие между зёрнами – все это сильно ограничивает область применения рассматриваемой модели [6].

1.1.4 Модель Прейзаха

Согласно модели Прейзаха [20] весь материал делится на малые независимые друг от друга частицы, каждой из которых присваивается смещенная прямоугольная петля магнитного гистерезиса с индивидуальными параметрами a , b (рис. 1.6). При внешнем магнитном поле $H = a$ происходит перемагничивание частицы от значения намагниченности $-m$ до $+m$, обратный процесс происходит при значении поля b , при этом всегда принимается условие $a \geq b$. В данной

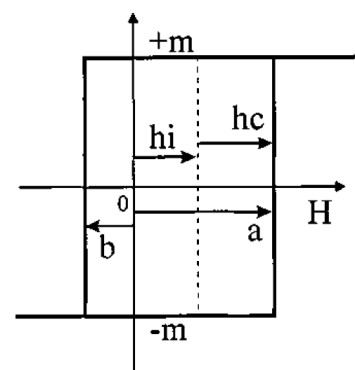


Рисунок 1.6 – Петля магнитного гистерезиса отдельной частицы модели Прейзаха

несимметричности формально, без уточнения физического механизма, закладывается влияние соседних зерен. Также для описания отдельной петли магнитного гистерезиса обычно вводят поле смещения $h_i = \frac{a-b}{2}$ и коэрцитивную силу $h_c = \frac{a+b}{2}$ (рис. 1.6).

Функция распределения параметров $p(a, b)$ (или $p(h_i, h_c)$) принимается внутренней характеристикой материала и в большинстве случаев определяется из экспериментальных данных. Зная функцию распределения, с применением диаграмм Прейзаха, восстанавливают петлю магнитного гистерезиса моделируемого материала (более детально процедура описана в [6]). Примером функции $p(h_i, h_c)$, способной описать эксперимент [21], может служить нормальное распределение:

$$p(h_i, h_c) = \frac{M_s}{2\pi\sigma_i\sigma_c} \exp\left[-\frac{(h_c - \langle h_c \rangle)^2}{2\sigma_c^2}\right] \exp\left[-\frac{h_i^2}{2\sigma_i^2}\right] \quad (1.8)$$

где $\langle h_c \rangle$ – усредненное значение коэрцитивной силы, σ_c^2 и σ_i^2 – соответствующие дисперсии распределений коэрцитивной силы h_c и поля смещения h_i .

Тем не менее, в классическом виде модель Прейзаха имеет определенные недостатки: на основе эксперимента для материала могут быть определены несколько функций $p(h_i, h_c)$ (неоднозначность), начальная магнитная восприимчивость, равная нулю и др. Часть недостатков снимается при помощи введения функции распределения, зависящей от намагниченности материала $h_i = \gamma M$ – динамическая модель Прейзаха [17]. Это и многие другие дополнения в конечном итоге позволяют выполнять эффективное моделирование магнитных гистерезисных свойств систем магнитной записи информации и прочих тонкопленочных образцов [18, 19].

1.2 ОБМЕННОСВЯЗАННЫЙ АНСАМБЛЬ СТОНЕРА-ВОЛЬФАРТА

Среди четырех классических моделей магнитного гистерезиса в данной магистерской диссертации выделяется одна – модель Стонера-Вольфарта. В силу направленности работы на компьютерное моделирование наноструктурированных магнитотвердых материалов, процесс намагничивания и перемагничивания которых происходит главным образом за счет вращения векторов намагниченности, что отвечает выбранной модели. При этом основной интерес представляет ее расширение на случай ансамбля обменносвязанных частиц. Изначально последнее было реализовано в рамках приближения среднего поля, что является интегральным учетом межзеренного обменного взаимодействия [10-12]. Более поздние работы, ориентируясь на возросшие вычислительные возможности, предпочитают выполнять моделирование на микроскопическом уровне в рамках парного взаимодействия, что обеспечивает лучшее соответствие экспериментальным наблюдениям [9]. Рассмотрим подробнее оба подхода.

1.2.1 Приближение среднего поля

По аналогии с феноменологической теорией молекулярного поля Вейса, взаимодействие частиц ансамбля Стонера-Вольфарта в приближении среднего поля закладывается в дополнительный вклад к внешнему магнитному полю, пропорциональном намагниченности ансамбля. Таким образом, эффективное магнитное поле может быть записано в виде: $H_{eff} \stackrel{\text{def}}{=} H + \gamma M$ [10]. В силу изотропного распределения ОЛН намагниченность ансамбля сонаправлена эффективному полю, что позволяет вычислить с использованием введенных ранее обозначений (рис. 1.2) величину намагниченности в зависимости от внешнего магнитного поля на основе выражения:

$$M = \int_0^\pi M_s \cos[\theta - \varphi(\theta, H + \gamma M)] \sin \theta \, d\theta. \quad (1.9)$$

Как видно, выражение является самосогласованным и не может быть решено аналитически, лишь с применением численных методов.

Приведем пример результатов компьютерного моделирования магнитного гистерезиса взаимодействующего ансамбля Стонера-Вольфарта в приближении среднего поля (рис. 1.7). Анализируя их, можно отметить рост остаточной намагниченности с увеличением параметра среднего поля, в чем заключается экспериментально наблюдаемый *эффект усиления остаточной намагниченности*. При этом в рамках данного приближения коэрцитивная сила неизменна, что уже не соответствует эксперименту: увеличение вклада взаимодействия в энергию (в сравнении с энергией магнитной анизотропии) приводит к снижению коэрцитивной силы, вплоть до нуля в предельном переходе. Последнее является существенным недостатком данного приближения.

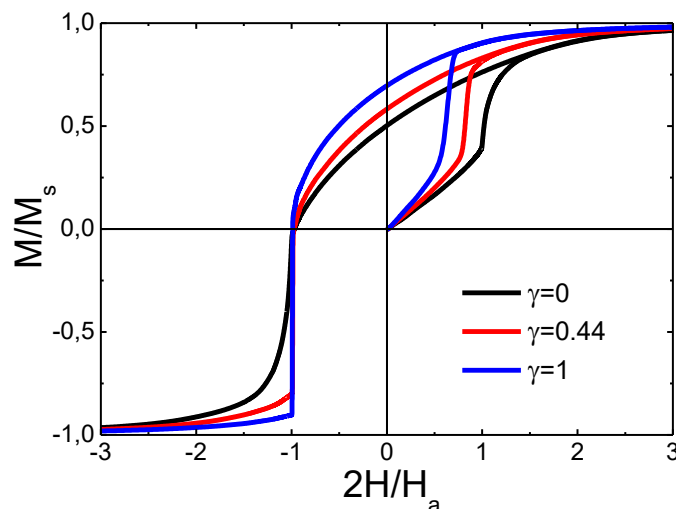


Рисунок 1.7 – Петли магнитного гистерезиса взаимодействующего ансамбля Стонера-Вольфарта при различных параметрах среднего поля γ

1.2.1 Микроскопическое описание

Обменное взаимодействие между соседними зернами ансамбля Стонера-Вольфарта может быть учтено на микроскопическом уровне в рамках прямого обменного взаимодействия Гайзенберговского типа, обобщаемого на масштаб зерен при помощи односпинового приближения (single-spin approximation, [9]). Таким образом, энергия межзеренного обменного взаимодействия граничащих частиц i и j может быть записана в виде:

$$E_{IEI} = -J_{IEI}S_{ij}(\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j), \quad (1.10)$$

где J_{IEI} – константа межзеренного обменного взаимодействия, S_{ij} – площадь контакта между зернами i и j , $\vec{\mu}_{i,j}$ – как и ранее, приведенные магнитные моменты зерен i и j . Для идеального интерфейса между зернами (бездефектное сочленение атомных плоскостей) может быть легко установлена связь между константой межзеренного обменного взаимодействия J_{IEI} и константой обмена объемного материала J : $J_{IEI} = J/a^2$, где a – усредненное значение межатомного расстояния [9, 25]. Однако критическое влияние дефектов границы на практике приводит к снижению константы межзеренного обменного взаимодействия более чем на порядок от данной величины в идеализированном случае [26]. Таким образом, значение J/a^2 может рассматриваться как оценочный верхний предел для константы межзеренного обменного взаимодействия $J_{IEI} \ll J/a^2$. Также отметим, что различная взаимная ориентация атомных плоскостей соседних зерен влияет на величину и даже знак константы межзеренного обменного взаимодействия между ними [26]. Фактически, это приводит к определенному распределению значений константы межзеренного обменного взаимодействия в материале, что подтверждается экспериментально на основе результатов ферромагнитного резонанса для двухслойных пленок α -Fe(100)/Nd₂Fe₁₄B(001) [27]. В большинстве случаев при моделировании обменносвязанного ансамбля константа межзеренного обменного взаимодействия принимается неизменной, как усредненное значение по всевозможным ориентациям.

Теперь, добавляя к энергии вида (1.1) третий вклад от парного межзеренного обменного взаимодействия в соответствии с формулой (1.10), для отдельного зерна i взаимодействующего ансамбля Стонера-Вольфарта энергия примет вид:

$$E_i = -KV(\vec{\mu}_i \cdot \vec{n}_i)^2 - M_S V(\vec{\mu}_i \cdot \vec{H}) - J_{IEI}S \sum_{j=1}^N \vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j, \quad (1.11)$$

где N – число соседних зерен. Как и ранее, выполняя нормирование на величину KV , перейдем к относительным единицам и введем параметр взаимодействия $\alpha = \frac{J_{IEI}S}{KV}$.

Это позволяет представить приведенную энергию выражением:

$$\varepsilon_i = -(\vec{\mu}_i \cdot \vec{n}_i)^2 - 2(\vec{\mu}_i \cdot \vec{h}) - \alpha \sum_{j=1}^N \vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j, \quad (1.12)$$

Для данного вида энергии (1.12), исследуя магнитные гистерезисные свойства ансамбля, выделяют два предельных случая для рассмотрения: случай сильной и слабой обменной связи [25]. Предел сильной обменной связи ($\alpha \gg 1$) для изотропного распределения осей ОЛН приводит к формированию областей размером ξ со сниженной эффективной константой анизотропии порядка K/\sqrt{N} (N – число зерен, входящих в область). Здесь ξ – корреляционная длина обменной связи, оцениваемая скейлинговым соотношением $R \left(\frac{\delta_B}{R}\right)^{\frac{4}{4-d}}$, где d – размерность ансамбля, δ_B – ширина доменной стенки Блоха. Коэрцитивная сила для рассматриваемой системы будет сильно снижаться по сравнению с таковой ансамбля невзаимодействующих зерен:

$$H_c \sim \frac{2K}{M_s} \left(\frac{R}{\delta_B}\right)^{\frac{2d}{4-d}}. \quad (1.13)$$

Предел сильной обменной связи, более известный как модель случайной анизотропии, активно используется для описания магнитных свойств современных нанокристаллических магнитомягких материалов.

Для описания магнитных гистерезисных свойств магнитотвердых материалов чаще всего справедлив предел слабой обменной связи ($\alpha \ll 1$). В таком случае коэрцитивная сила с увеличением параметра взаимодействия уменьшается незначительно, при этом рост остаточной намагниченности может быть продемонстрирован аналитическим путем. Для этого рассмотрим ансамбль однодоменных частиц с изотропным распределением осей легкого намагничивания в рамках данного приближения. Поиск равновесного положения вектора намагниченности отдельного зерна i , энергия которого задается формулой 1.12 при $h = 0$, осуществим в сферической системе координат (рис. 1.8) в предположении слабого отклонения намагниченности от оси ОЛН.

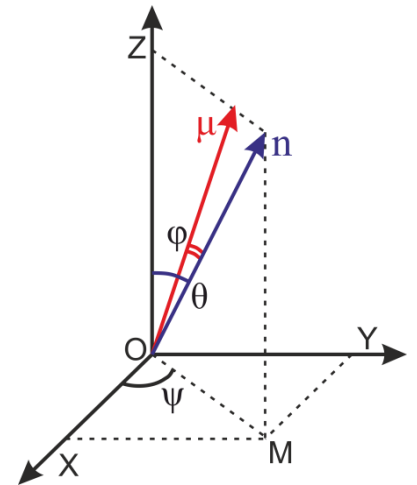


Рисунок 1.8 – Схема взаимной ориентации вектора намагниченности μ , и оси ОЛН n

Так, в сферической системе координат (СК) (рис. 1.8) вектора $\vec{\mu}_i$ и \vec{n}_i можно представить в виде:

$$\begin{aligned} n_{x(i)} &= \sin \theta_i \cdot \cos \psi_i & \mu_{x(i)} &= \sin(\theta_i - \varphi_i) \cdot \cos \psi_i \\ n_{y(i)} &= \sin \theta_i \cdot \sin \psi_i & \mu_{y(i)} &= \sin(\theta_i - \varphi_i) \cdot \sin \psi_i \\ n_{z(i)} &= \cos \theta_i & \mu_{z(i)} &= \cos(\theta_i - \varphi_i) \end{aligned} \quad (1.14)$$

В силу симметрии задачи относительно оси OZ, предполагается малое смещение только вдоль зенитного угла θ_i . Также, руководствуясь соображениями симметрии и малым смещением векторов намагниченности, выполним усреднение по ансамблю скалярного произведения $\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j$:

$$\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} (\vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j) \rho(\theta_j) \rho(\psi_j) d\psi_j d\theta_j = \left[\rho(\psi_j) = \frac{1}{2\pi}; \rho(\theta_j) = \sin(\theta_j) \right] = \\ & = \int_0^{2\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} [\sin(\theta_i - \varphi_i) \sin \varphi_i \sin(\theta_j - \varphi_j) \sin \varphi_j + \sin(\theta_i - \varphi_i) \cos \varphi_i \sin(\theta_j - \varphi_j) \cos \varphi_j + \\ & + \cos(\theta_i - \varphi_i) \cos(\theta_j - \varphi_j)] \frac{\sin \theta_j}{2\pi} d\psi_j d\theta_j = \int_0^{\frac{\pi}{2}} [\cos(\theta_i - \varphi_i) \cos(\theta_j - \varphi_j)] \sin \theta_j d\theta_j \approx \\ & \approx \cos(\theta_i - \varphi_i) \int_0^{\frac{\pi}{2}} \cos \theta_j \sin \theta_j d\theta_j = \frac{1}{2} \cos(\theta_i - \varphi_i). \end{aligned} \quad (1.15)$$

Таким образом, с учетом выполненного усреднения и подстановки сферических координат энергия отдельного зерна ансамбля в состоянии остаточной намагниченности может быть переписана следующим образом:

$$\varepsilon = \sin^2(\varphi) - \frac{\alpha N}{2} \cos(\theta - \varphi) \approx [\varphi \ll 1] \approx \varphi^2 - \frac{\alpha N}{2} (\cos \theta + \varphi \cdot \sin \theta). \quad (1.16)$$

Далее выполним поиск равновесного положения вектора намагниченности зерна:

$$\frac{d\varepsilon}{d\varphi} = 2\varphi - \frac{\alpha N}{2} \sin \theta = 0. \quad (1.17)$$

$$\varphi = \frac{\alpha N}{4} \sin \theta. \quad (1.18)$$

Проведем анализ полученного выражения 1.18 для угла отклонения вектора намагниченности от ОЛН. В отсутствие обменного взаимодействия ($\alpha = 0$), нет отклонений; при сонаправленности ОЛН направлению намагниченности ансамбля ($\theta = 0$) отклонение также отсутствует, но при ориентации $\theta = \frac{\pi}{2}$ оно максимально. Все это соответствует качественным представлениям для данной системы.

Теперь на основе выражения 1.17 вычислим значение остаточной намагниченности:

$$\begin{aligned} \mu_r &= \int_0^{\frac{\pi}{2}} \mu_{z(i)} \sin \theta \, d\theta = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \cos(\theta - \varphi) \sin \theta \, d\theta \approx \int_0^{\frac{\pi}{2}} (\cos \theta + \varphi \cdot \sin \theta) \sin \theta \, d\theta = \\ &= \int_0^{\frac{\pi}{2}} \cos \theta \sin \theta \, d\theta + \frac{\alpha N}{4} \int_0^{\frac{\pi}{2}} (1 - \cos^2 \theta) \sin \theta \, d\theta = \boxed{\frac{1}{2} + \frac{\alpha N}{6}} \end{aligned} \quad (1.19)$$

Полученная формула 1.19 демонстрирует линейный рост с увеличением параметра взаимодействия остаточной намагниченности по отношению к таковой для невзаимодействующего ансамбля Стонера-Вольфарта. В дальнейших главах диссертации соотношение (1.19) и в целом приближение слабой обменной связи будет активно использоваться при анализе результатов.

1.3 АНАЛИЗ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В АНСАМБЛЕ СТОНЕРА-ВОЛЬФАРТА

После рассмотрения модельных представлений о взаимодействующем ансамбле Стонера-Вольфарта и некоторых соотношений, уделим внимание экспериментальным методикам, которые с опорой на данные представления, способны провести качественный анализ взаимодействия частиц, а в некоторых случаях и количественный. Наиболее широкое распространение получили построения графиков Хенкеля и $\delta m(H)$ [29-42]. Также можно выделить анализ полевых зависимостей продольной магнитной восприимчивости [43-46], изначально направленный на определение поля анизотропии, но с дополнением расчетов к эксперименту, способный определить степень текстуры ансамбля и параметр среднего поля.

1.3.1 Методы графиков Хенкеля и $\delta m(H)$

Соотношения *изотермической остаточной намагниченности* (isothermal magnetization remanence) $M_r(H)$ и *остаточной намагниченностью перемагничивания* (dc demagnetization remanence) $M_d(H)$, дают возможность провести анализ взаимодействий в исследуемой среде. Данные полевые зависимости измеряются схожим образом, но отправной точкой к измерениям служат разные начальные состояния. Для измерений $M_r(H)$ образец (ансамбль частиц) намагничивается из терморазмагниченного состояния в положительном направлении (условно принятом) небольшим внешним магнитным полем H_I , после чего поле снимается и измеряется значение остаточной намагниченности $M_r(H_I)$ (рис. 1.9, 1). Далее прикладывается и вновь снимается уже большее внешнее магнитное поле, и снова измеряется значение остаточной намагниченности образца. Описанная последовательность действий повторяется до тех пор, пока образец не достигнет состояния технического насыщения (рис. 1.9, серые линии). Зависимость $M_d(H)$ измеряется аналогичным образом с тем лишь отличием, что

начальным является намагниченное до технического насыщения состояние и прикладывается обратное по отношению к принятому направлению внешнее магнитное поле (рис. 1.9, 2). Вольфартом было показано [28], что при нулевой температуре для ансамбля невзаимодействующих однодоменных частиц, обладающих одноосной магнитокристаллической анизотропией, выполняется следующее соотношение:

$$m_d(H) = 1 - 2m_r(H), \quad (1.20)$$

где величины m_d и m_r являются соответствующими остаточными намагниченностями $M_d(H)$ и $M_r(H)$, приведенными к намагниченности насыщения $M_r(\infty)$ (рис.1.9, 3). Им же были обозначены возможные причины отклонения от прямолинейного закона, среди которых: межчастичное взаимодействие, наличие суперпарамагнитных частиц, многодоменное состояние, отличная от одноосной анизотропия и некогерентное вращение векторов намагниченности. Первым был Хенкель [29], кто предложил строить зависимости $m_d(m_r)$, которые наглядно демонстрировали какие-либо отклонения от закона (1.20). В качестве примера, построение графиков Хенкеля приведено на рисунке 1.10. Далее Келли с соавторами для количественного описания отклонений ввел величину [30]:

$$\delta m(H) = m_d(H) - [1 - 2m_r(H)]. \quad (1.21)$$

Характерные примеры графиков $\delta m(H)$ также представлены: рисунках 1.11 (а,б), 1.12.

Экспериментальные исследования. Построения графиков Хенкеля и графиков $\delta m(H)$ нашли широкое применение в экспериментальных работах. Так, в статье [31] P. Gaunt, G. Hadjipanayis и D. Ng явно показали, что многодоменное состояние может не являться причиной отклонения от прямолинейного закона (1.20), если при намагничивании и перемагничивании доменные стенки взаимодействуют с одинаковой плотностью и распределением центров пиннинга. К.-Н. Muller *et al.* [32] использовал методику построения графиков Хенкеля для анализа межзеренного взаимодействия в постоянных магнитах системы Nd-Fe-B при различных степенях текстуры и составах образцов. Графики Хенкеля и $\delta m(H)$ также активно апробировались экспериментально на пленочных структурах [30, 33, 35] и даже в ряде случаев на ансамблях с отличной от одноосной типом

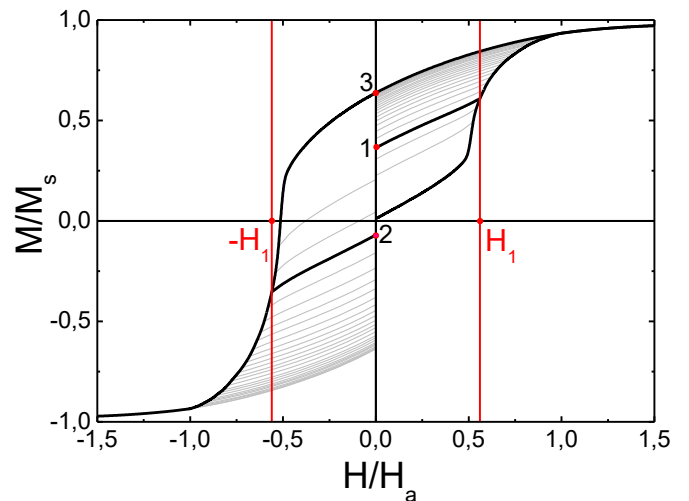


Рисунок 1.9 – Схематическое описание к измерению кривых остаточной намагниченности: (1) $M_r(H_1)$, (2) $M_d(H_1)$, (3) $M_r(\infty)$

магнитокристаллической анизотропии [34]. Значительный вклад в методику применения графиков $\delta m(H)$ внесла работа X.-D. Che и H.N. Bertram [35], в которой экспериментальные результаты с образцами BaFe, тонкими пленками CoNiCr и двуслойными пленками CoCrTa были проанализированы с применением численных методов расчета феноменологической модели, которая строилась на введении самосогласованного поля взаимодействия вида $f(M) = \gamma M + \beta(1 - M^2)$. Было получено хорошее качественное соответствие численных результатов с экспериментом, определены параметры среднего поля.

Построения графиков Хенкеля и графиков $\delta m(H)$ нашли широкое применение при анализе взаимодействий в нанокompозитах на основе магнитомягкой и магнитотвердой фаз. Так, в экспериментальной работе T. Ohkubo *et al.* [36], посвященной исследованию влияния легирующих элементов Ti и C на микроструктуру и магнитные свойства сплава Nd₉Fe₇₇B₁₄, метод Хенкеля применялся для качественной демонстрации «слабой обменной связи» между зернами фазы Nd₂Fe₁₄B. Какие-либо количественные оценки на его основе не выполнялись. В другой работе [37], целью которой авторы N.V. Rama Rao, R. Gopalan *et al.* ставили получение и исследование нанокompозитных магнитов состава SmCo₅ + x wt% Fe (x = 0, 5 и 10), метод Хенкеля также использовался для качественного сравнения взаимодействий в образцах с различной массовой долей железа.

Следует отметить на примере данных работ, что предпринимаются попытки интерпретировать при помощи метода Хенкеля взаимодействия в системе, заведомо более сложной, чем закладывалось в модель Стонера-Вольфарта. Учет ненулевой температуры, различие магнитных характеристик для компонентов многофазной системы или же даже расширение построений Хенкеля на случаи отличной от одноосной магнитокристаллической анизотропии – все это предмет дополнительных теоретических и численных исследований.

Компьютерные эксперименты. Geshev *et al.* [38, 39] провели методом компьютерного моделирования исследование, направленное на определение кривых Хенкеля для случаев трехосной и четырехосной магнитокристаллической анизотропии, а также учитывая влияние вторых констант кубической анизотропии. Было продемонстрировано положительное отклонение от линейной зависимости (1.20) для данных случаев (рис. 1.10). Позднее Garcia-Otera *et al.* [40] помимо исследования влияния кубической анизотропии на графики Хенкеля, также в своей комплексной работе учли влияние температуры и магнитоэстатического взаимодействия

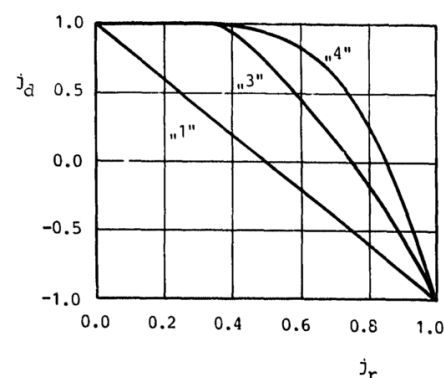


Рисунок 1.10 – Численно построенные графики Хенкеля одноосного “1”, трехосного “3” и четырехосного “4” ансамблей однодоменных частиц [38]

элементов ансамбля. Моделируя методом Монте-Карло, для ансамблей из 250 и 64 частиц при отсутствии парного взаимодействия и наличия взаимодействия в рамках диполь-дипольного приближения соответственно, помимо аналогичных результатов касательно влияния кубической анизотропии, были показаны возможные отклонения от линейного закона для ансамбля вблизи температуры блокировки, а также указано всегда отрицательное смещение графиков Хенкеля за счет магнитоэлектронного взаимодействия при условии изотропности ансамбля.

Для случая наноккомпозитов Hong-wei Zhang *et al.* [41] акцентировал внимание на изучении влияния на общий вид графиков $\delta M(H)$ различий в константах обменного взаимодействия и магнитокристаллической анизотропии двух фаз: зерен магнитотвердой фазы, отделенных друг от друга прослойкой магнитомягкой фазы. Моделируя методом конечных элементов, было качественно установлено, что с уменьшением константы обменного взаимодействия для магнитомягкой фазы (A_{layer}) по отношению к таковой для магнитотвердой фазы (A_{core}) наблюдается снижение пика δM , в то время как при аналогичном изменении констант магнитокристаллической анизотропии (K_{layer} и K_{core} соответственно) изменяется ширина пика, но не его максимальное значение (рис. 1.11).

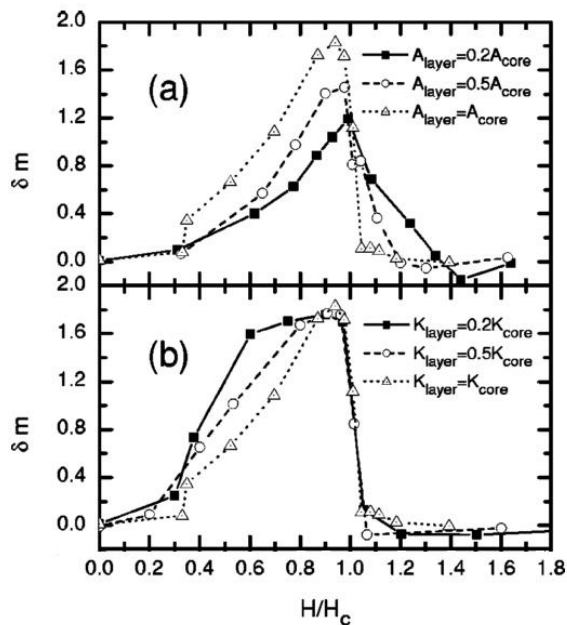


Рисунок 1.11 – Изменения графиков Хенкеля при варьировании констант обменного взаимодействия и магнитокристаллической анизотропии магнитотвердой и магнитомягкой фаз

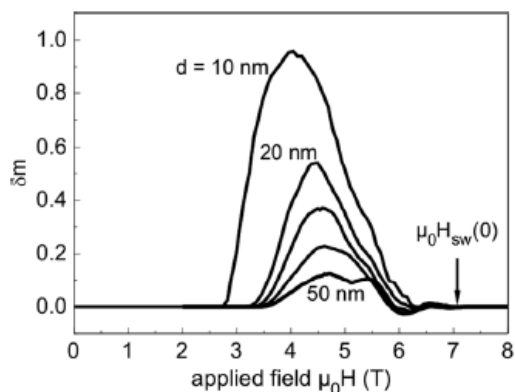


Рисунок 1.12 – Кривые $\delta m(H)$ текстурированного ансамбля обменно связанных зерен с нормальным распределением ОЛН (дисперсия 10°) [42]

Резюмируя результаты предыдущих исследований, следует отметить их качественный характер в большинстве случаев. В согласии с этим выводом находится недавняя работа V. Neu *et al.* [42], которая была направлена уже преимущественно на количественный анализ, в рамках закладываемой модели, зависимостей $\delta M(H)$ для текстурированных обменно связанных ансамблей одноосных однодоменных частиц. Были построены и проанализированы при варьировании размера частиц соответствующие зависимости (рис. 1.12).

1.3.2 Поперечная магнитная восприимчивость

Измерение поперечной магнитной восприимчивости в зависимости от магнитного поля является распространенной экспериментальной методикой определения поля анизотропии образцов, которые могут быть описаны в рамках модели Стонера-Вольфарта [43, 45, 46]. Так, при значении внешнего магнитного поля, равном полю анизотропии, должен наблюдаться пик поперечной магнитной восприимчивости (рис. 1.13). Это было впервые показано Aharoni [44] при рассмотрении задачи равновесного положения векторов намагниченности невзаимодействующего изотропного ансамбля однодоменных зерен с одноосной магнитной анизотропией во внешних магнитных полях h_{dc} и перпендикулярном ему малом h_{ac} . Для отдельного зерна со сферическими координатами ОЛН (θ_K, φ_K) и найденной из условия равновесия ориентацией вектора намагниченности (θ_M, φ_M) продольная магнитная восприимчивость принимает вид:

$$\chi_{\perp}(\theta_K, \varphi_K) = \frac{3}{2} \chi_0 \left[\cos^2 \varphi_K \frac{\cos^2 \theta_M}{h_{dc} \cos \theta_M + \cos 2(\theta_M - \theta_K)} + \sin^2 \varphi_K \frac{\sin(\theta_K - \theta_M)}{h_{dc} \sin \theta_M} \right], \quad (1.22)$$

где $\chi_0 = M_s^2/3K$ – начальная магнитная восприимчивость ансамбля Стонера-Вольфарта, $h_{dc} = HM_s/2K$ – как и ранее, приведенное внешнее магнитное поле. Тогда продольная магнитная восприимчивость изотропного ансамбля будет определяться интегралом:

$$\chi_{\perp} = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \chi_{\perp}(\theta_K, \varphi_K) \sin \theta_K d\theta_K. \quad (1.23)$$

Значение поля анизотропии исследуемого образца не единственное, что может быть определено по методике измерения полевых зависимостей поперечной магнитной восприимчивости. R. Matarranz *et al.* провели численные исследования влияния на данные зависимости различных отклонений рассматриваемого ансамбля от модельного изотропного ансамбля Стонера-Вольфарта: наличие текстуры ОЛН (вводилось в рамках нормального распределения с дисперсиями соответствующих углов в сферической СК: $\sigma_{\theta}^2, \sigma_{\varphi}^2$), взаимодействие зерен в приближении среднего поля ($H_{eff} \stackrel{\text{def}}{=} H + \gamma M$), а также логнормальное распределение константы магнитной анизотропии (с дисперсией σ^2). На рисунках 1.13 а-в продемонстрирована эволюция полевых зависимостей поперечной магнитной восприимчивости при последовательном «подключении» данных факторов. Наличие текстуры зерен невзаимодействующего ансамбля Стонера-Вольфарта не меняет положение пика поперечной восприимчивости, но приводит к изменению его формы (рис. 1.13, а), смещение пика в сторону меньших магнитных полей с незначительным изменением формы происходит с увеличением параметра среднего поля γ (рис. 1.13, б),

также небольшое смещение и размытие пиков влечет уширение распределения константы магнитокристаллической анизотропии зерен (рис. 1.13, в).

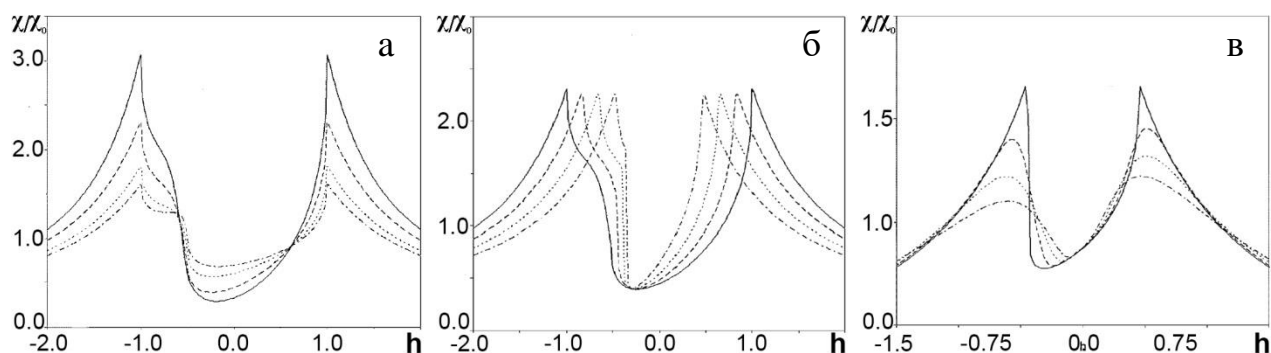


Рисунок 1.13 – Расчетные зависимости поперечной магнитной восприимчивости от внешнего магнитного поля для случаев: (а) $\sigma_\phi = 0.5, \sigma = 0, \gamma = 0$ при варьировании σ_θ : сплошная линия 0.3, ---- 0.5, 1, -.-.- 100; (б) $\sigma_\phi = \sigma_\theta = 0.5, \sigma = 0$ при варьировании γ : сплошная линия 0, ---- 0.2, 0.4, -.-.- 0.6; (в) $\sigma_\phi = \sigma_\theta = 1, \gamma = 0.6$ при варьировании σ : сплошная линия 0, ---- 0.2, 0.4, -.-.- 0.6 [43]

Таким образом, численная аппроксимация экспериментальных данных, предложенная в работе [43] может определить параметры нормального распределения ОЛН, логнормального распределения константы одноосной магнитной анизотропии и главное – интегральной характеристики взаимодействия зерен γ в рамках приближения среднего поля. На рисунке 1.14 представлен пример данной аппроксимации с определенными на ее основе параметрами отожжённой тонкой пленки Fe-Co-V. Явным недостатком представленного метода является большое количество входных параметров для аппроксимации, что может отдалить от физически верного результата. Необходимость распределения σ_ϕ кажется сомнительной, так как выбором СК вдоль оси текстурирования может обеспечить изотропное распределение и тем самым уже на один уменьшить число параметров аппроксимации.

Отдельно отметим работу, которую выполнил Zimmermann [45]. Он был первым, кто провел измерения поперечной магнитной восприимчивости в различных состояниях остаточной намагниченности, тем самым обеспечив большую «чувствительность» при

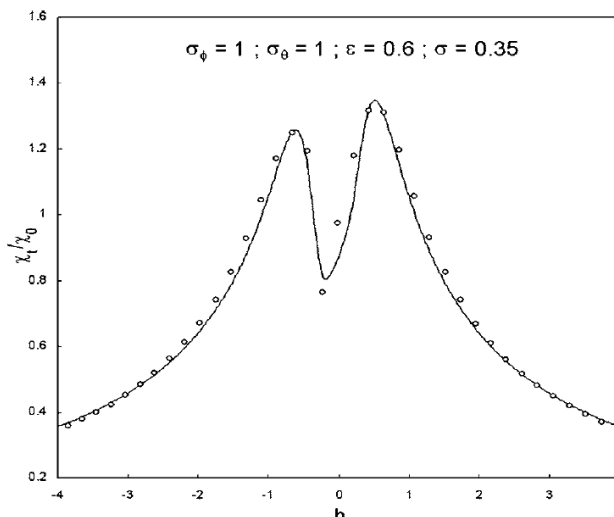


Рисунок 1.14 – Измеренная полевая зависимость поперечной магнитной восприимчивости отожжённой тонкой пленки Fe-Co-V (точки) и ее численная аппроксимация (сплошная линия) [43]

анализе необратимых процессов перемагничивания, в сравнении с методом Хенкеля. Автор указал на потенциальную возможность анализа взаимодействий на основе данной методики.

1.4 ИНТЕРМЕТАЛЛИД $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ – ОБЪЕКТ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Среди ряда магнитотвердых соединений на протяжении последних тридцати лет особую роль для технических приложений и научных исследований играет высокоанизотропный ферримагнетик $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$. Этот интерметаллид имеет тетрагональную кристаллическую структуру, соответствующую пространственной группе $\text{P4}_2/\text{mmm}$, с параметрами ячейки $a = 0,88$ нм и $c = 1,21$ нм (рис. 1.15). С учетом этого энергия магнитокристаллической анизотропии отдельно взятого кристаллита $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ i будет описываться в общем случае выражением:

$$E_i^A = K_1 \sin^2 \theta_i + (K_2 + K'_2 \cos 4\varphi_i) \sin^4 \theta_i + (K_3 + K'_3 \cos 4\varphi_i) \sin^6 \theta_i, \quad (1.24)$$

где θ_i – отклонение вектора намагниченности от направления $[001]$ кристаллита, φ_i – угол отклонения проекции на базисную плоскость кристаллита от направления $[100]$. Набор из пяти констант анизотропии $\{K_1, K_2, K'_2, K_3, K'_3\}$ является минимально необходимым для описания одновременно индуцированных спин-переориентационных переходов (FOMP – first order magnetization process) и спонтанного спин-переориентационного перехода (СПП) [47]. Последний происходит при смене знака с положительного на отрицательный константы K_1 при температуре около 135 К, что приводит к переходу от одноосного типа анизотропии к конусу четырех осей легкого намагничивания с

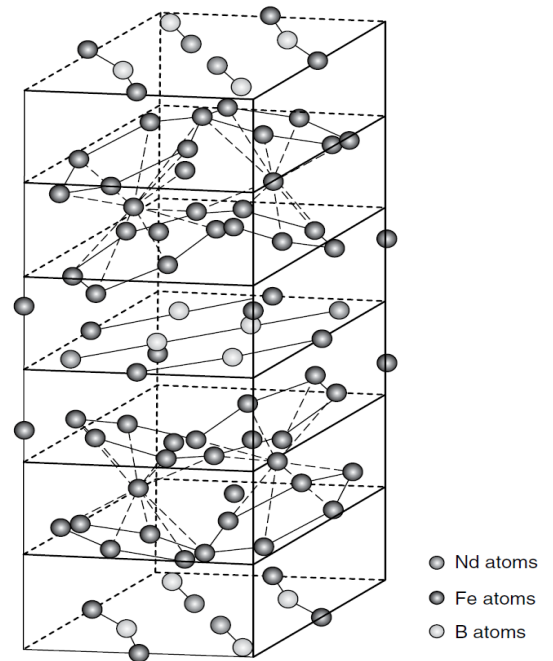


Рисунок 1.15 – Кристаллическая структура $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$

углом раствора $\theta_c = \arcsin \sqrt{\frac{|K_1|}{2K_2}}$ относительно направления $[001]$. Тем не менее, при температурах вблизи комнатной часто описание магнитной анизотропии интерметаллида выполняют в рамках одноосной анизотропии с константой K_1 , так как вклад в энергию от констант более высоких порядков становится незначителен.

Наличие спонтанного спин-переориентационного перехода (СПП) в области низких температур приводит к ограничению в практическом использовании соединения; так, в космической отрасли взамен используют $\text{Pr}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$, не имеющего СПП, но обладающего меньшим максимальным энергетическим произведением или SmCo_5 . С научной же точки зрения СПП может быть инструментом к исследованию парных взаимодействий в $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$.

Основные магнитные свойства $Nd_2Fe_{14}B$ в сравнении с иными высокоанизотропными соединениями приведены в таблице 1.1 [48], из которой видно, что $Nd_2Fe_{14}B$ имеет наибольшее значение спонтанной намагниченности, а также сравнительно высокое значение константы одноосной магнитокристаллической анизотропии. Указанные фундаментальные магнитные свойства позволили даже в серийном производстве получать на основе данной фазы постоянные магниты с величиной максимального энергетического произведения BH_{max} до 50 МГсЭ. Экспериментально достигнута величина $BH_{max} = 59,6$ МГсЭ, что очень близко к теоретическому пределу.

Высокоанизотропная фаза	A (пДж/м)	K_1 (МДж/м ³)	M_s (Т)	δ_B (нм)	R_{sd} (нм)	T_c (°С)
$Nd_2Fe_{14}B$	7.7	4.9	1.61	3.9	107	310
$SmCo_5$	22.0	17.0	1.05	3.6	764	727
$BaFe_{12}O_{19}$	6.1	0.33	0.48	14	290	723

Таблица 1.1 – Сравнение константы обменной жесткости A, магнитокристаллической анизотропии K_1 , спонтанной намагниченности M_s , ширины доменной стенки Блоха δ_B , радиуса однодоменности R_{sd} и температуры Кюри T_c соединений $Nd_2Fe_{14}B$, $SmCo_5$ и феррита $BaFe_{12}O_{19}$ [48]

Одним из наиболее эффективных лабораторных методов получения наночастиц $Nd_2Fe_{14}B$ для последующего спекания в массивный изотропный образец является высокоэнергетический шаровой помол в присутствии органических поверхностно активных веществ (обычно смесь олеиновой кислоты $(CH_3(CH_2)_7CH=CH(CH_2)_7COOH)$ и гептана $CH_3(CH_2)_5CH_3$) [3, 49, 50]. Преимущества данного метода – узкое распределение по размеру получаемых наночастиц с характерным диаметром менее 5 нм (рис. 1.16) и высокая степень их кристаллического порядка. Это позволяет на основе наночастиц получить

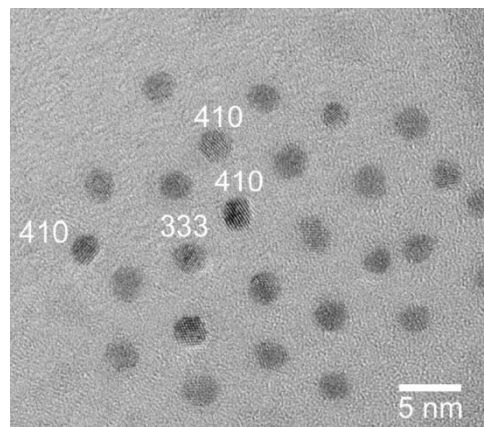


Рисунок 1.16 – Высокоразрешающая просвечивающая электронная микроскопия наночастиц $Nd_2Fe_{14}B$, полученных высокоэнергетическим шаровым помолом [50]

образец также с узким и потенциально контролируемым распределением зерен по размеру, а также при размере зерен от 5 и менее 107 нм полностью удовлетворять условию абсолютной однодоменности. Ввиду этого можно с полным основанием рассматривать нанокристаллические образцы $Nd_2Fe_{14}B$ в рамках модели взаимодействующего ансамбля Стонера-Вольфарта в приближении слабой обменной связи и выполнять на его основе экспериментальную верификацию результатов компьютерного моделирования.

2 ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ

Исходя из проведенного анализа литературных данных, можно сделать несколько выводов. Во-первых, существует очень малое число работ, направленных на оценку константы межзеренного обменного взаимодействия в магнитных средах. При этом в большинстве случаев рассматриваются пленочные образцы [27], а не объемные нанокристаллические. Вместе с тем именно для последних, данная проблема стоит остро в связи с развитием идей о создании нанокompозитных постоянных магнитов на основе фаз разнородной магнитной твердости [3, 4]. Во-вторых, нынешнее использование методики построения графиков Хенкеля и кривых $\delta m(H)$, которые потенциально могут выполнять количественные оценки параметра межзеренного обменного взаимодействия нанокристаллических сред, ограничивается в основном, качественными суждениями о роде взаимодействия между частицами в исследуемой системе [31-34, 36, 37]. В ряде работ численными методами продемонстрировано количественное определение параметров на основе аппроксимации экспериментальных данных компьютерной моделью [35, 42], но каких-либо аналитических выражений для описания характеристик $\delta m(H)$ до сих пор нет. В-третьих, подобные типы аппроксимации существуют и для полевых зависимостей поперечной магнитной восприимчивости, но данная методика способна характеризовать взаимодействия только в рамках теории среднего поля [43, 44]. Есть работы, в которых указывается возможность определения межзеренного обменного взаимодействия на основе поперечной магнитной восприимчивости, измеренной в состояниях остаточной намагниченности по методике кривых возврата [45], но ее реализации нет.

Исходя из вышесказанного, были сформулированы основные цели настоящей магистерской диссертации:

1. разработка компьютерных программ по моделированию магнитных гистерезисных свойств ансамбля обменносвязанных однодоменных частиц;
2. разработка методов определения константы межзеренного обменного взаимодействия на основе анализа графиков Хенкеля и кривых $\delta m(H)$, а также на основе измерения продольной и поперечной магнитной восприимчивостей. В случае успешной разработки, выполнение верификации результатов при помощи компьютерного и натурального экспериментов.

Для достижения указанных целей были поставлены и решались следующие задачи:

- 1) выбор и изучения среды программирования, в которой создание целевых программ должно быть наиболее рационально, а также изучение современных возможностей параллельного программирования, в том числе с использованием графических вычислителей;
- 2) создание пакета программ, который включал бы в себя помимо требуемых расчетов, генерацию различных типов ансамблей, возможности по их визуализации и анализу получаемых результатов вычислений;
- 3) используя микроскопические параметры $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$, определение границы применимости приближения слабой обменной связи, для дальнейшего проведения компьютерных экспериментов в рамках последнего;
- 4) в рамках приближения слабой обменной связи проведение аналитического анализа продольной и поперечной магнитной восприимчивости изотропного ансамбля однодоменных зерен в состоянии остаточной намагниченности;
- 5) выполнение компьютерного эксперимента по верификации результатов предыдущего пункта, а также по исследованию зависимости продольной и поперечной магнитной восприимчивости обменносвязанного изотропного ансамбля в зависимости от его состояния остаточной намагниченности;
- 6) в рамках приближения слабой обменной связи проведение компьютерного моделирования зависимостей $\delta m(H)$ изотропного ансамбля, варьируя параметр взаимодействия и установление взаимосвязи характерных параметров кривых с микроскопическими константами;
- 7) выполнение сопоставления результатов моделирования с экспериментальными данными.

3 МЕТОДИКА РАСЧЕТА

Основным инструментом выполнения поставленных целей и задач данной научно-исследовательской работы является компьютерный эксперимент, направленный на микромагнитный расчет гистерезисных свойств ансамблей однодоменных частиц. Для его реализации был написан ряд программ в среде разработки MATLAB. В соответствии с заложенными функциями их можно разделить на три группы:

- программы, генерирующие структуру и параметры ансамбля зерен;
- основные программы, выполняющие требуемые расчеты с подгружаемой в их рабочую память структурой ансамбля;
- вспомогательные программы, ответственные за численный и графический анализ проведенных вычислений.

3.1 СРЕДА РАЗРАБОТКИ

MATLAB (“MATrix LABoratory”) представляет собой пакет прикладных программ для решения задач технических вычислений на основе одноименного языка программирования. Область решаемых данным программным обеспечением задач крайне разнообразна, можно отметить такие разделы, как: символьные вычисления, нечеткая логика, работа с базами данных, системы управления, цифровая обработка сигналов, а также широкий класс научных и математических пакетов. Функциональность MATLAB в приведенных примерах расширяется дополнительными наборами инструментов (toolboxes), что позволяет существенно сократить время на разработку приложений, используя заложенные возможности, как основу.

Непосредственно язык программирования MATLAB является высокоуровневым интерпретируемым языком программирования, включающим основанные на матрицах структуры данных, широкий спектр функций, интегрированную среду разработки, объектно-ориентированные возможности и интерфейсы к программам, написанным на других языках программирования.

Особенностью среды MATLAB являются ее широкие возможности по работе с матрицами, а также развитые пакеты параллельного программирования как с использованием центральных процессоров компьютера (CPU), так и графических вычислителей (GPU). Это послужило главным критерием для выбора MATLAB в качестве среды разработки программ по моделированию магнитных гистерезисных свойств ансамблей взаимодействующих однодоменных частиц.

3.2 СТРУКТУРА МОДЕЛИРУЕМОГО АНСАМБЛЯ

В программах по инициализации структуры и параметров ансамбля частиц заложены достаточно широкие возможности. Всего написано четыре программы, отвечающих за это, оформленных в качестве независимых функций. Две из них (cub2d_str; hex2d_str) предназначены для создания структуры двумерного взаимодействующего ансамбля Стонера-Вольфарта, то есть в ходе расчета вращение векторов намагниченности зерен осуществляется в плоскости. При этом в данных программах ансамбль реализован в виде плотносочлененной периодической структуры зерен в форме квадратов (рис. 3.1, в) и гексагонов (рис. 3.1, г) соответственно. Последнее позволяет анализировать влияние количества соседних зерен (N) на результат вычислений при прочих равных условиях. Другие две программы (cub3d_str; hex3d_str) генерируют трехмерные структуры ансамблей на основе кубов (рис. 3.1, б) и ромбододекаэдров (рис. 3.1, а). В качестве характерного размера моделируемой системы во всех случаях выступает расстояние между центрами соседних зерен (d). Отметим при этом, что при неизменном расстоянии между зернами d произведение параметра взаимодействия α на количество соседей N также не меняется: $\frac{4J_{IEI}}{dK}$ и $\frac{6J_{IEI}}{dK}$ для 2D и 3D случаев соответственно. Все описанные структуры ансамблей схематически, с указанием геометрических параметров, представлены на рисунке 3.1.

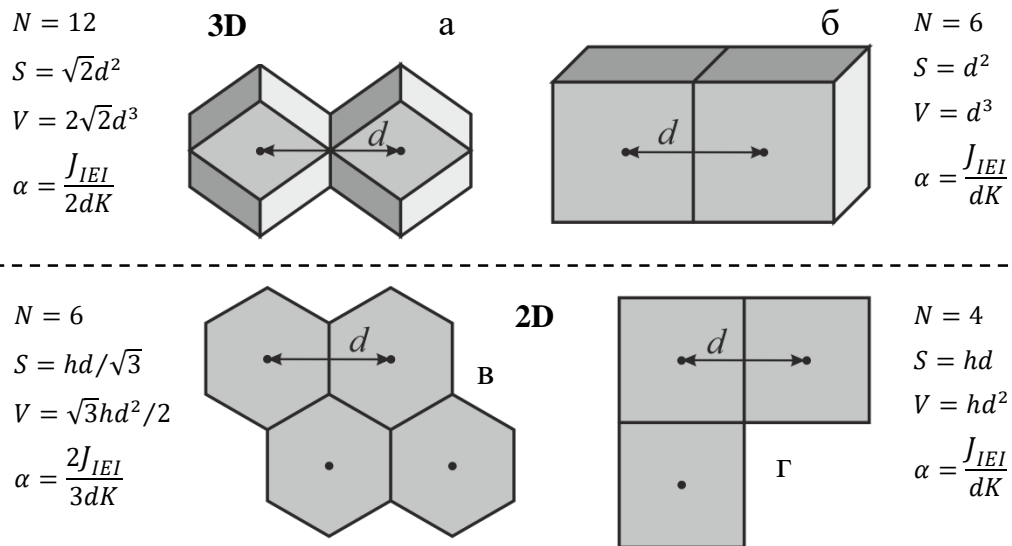


Рисунок 3.1 – Схематическое представление двумерных и трехмерных структур ансамблей, состоящих из ромбододекаэдров (3D, а), кубов (3D, б), гексагонов (2D, в) и квадратов (2D, г) с указанием геометрических параметров в зависимости от расстояния между центрами зерен d : N – число соседей, S – площадь контакта соседних зерен, V – объем зерна, α – параметр взаимодействия

Помимо геометрических параметров, включающих площадь, объем и координаты в декартовой системе координат, для каждого зерна ансамбля программами определяется список индексов соседних зерен в их общем массиве с учетом *периодических граничных условий*. Так как в ходе расчетов координаты зерен полагаются неизменными, то определенный единожды список неизменен для ансамбля и используется в течение всего процесса моделирования, что оптимизирует процедуру вычисления энергии парных взаимодействий.

Во всех четырех программах после этапа инициализации геометрии ансамбля идет блок, определяющий магнитные характеристики отдельных зерен. Они включают в себя: спонтанную намагниченность M_s , константы межзеренного обменного взаимодействия J_{IEI} , константы магнитокристаллической анизотропии $\{K_1, K_2, K'_2, K_3, K'_3\}$, ориентации векторов, определяющих ОЛН и ОТН. В данной процедуре заложены возможности создания нескольких типов ансамблей: однофазные ансамбли, многофазные ансамбли, деление ансамблей зерен на области.

Однофазный ансамбль. В этом случае все зерна имеют одно значение спонтанной намагниченности, один набор констант магнитокристаллической анизотропии, также как и одну константу межзеренного обменного взаимодействия. Для расчетов ансамбля зерен $Nd_2Fe_{14}B$ при комнатной температуре используется набор констант таблицы 1.1 [48]: $M_s=1282$ Гс, $K=49$ Мэрг/см³, константа межзеренного обменного взаимодействия по порядку величины принята равной $J_{IEI}=5$ эрг/см² [28]. При температурах ниже комнатной, для исследования влияния межзеренного обменного взаимодействия на изменения намагниченности ансамбля при спин-

переориентационном переходе, запись магнитокристаллической энергии представляется в виде ряда (1.24) с использованием экспериментальных зависимостей от температуры констант $\{K_1, K_2, K'_2, K_3, K'_3\}$ в интервале от 5 К до 240 К (рис. 3.2) [47]. Точками на рисунке обозначены экспериментальные данные, любые промежуточные значения констант извлекались при помощи сплайн-интерполяции на их основе.

Зависимость спонтанной намагниченности от температуры задавалась полиномом: $M_s = 1472.1 - 0.272 \cdot T - 0.00128 \cdot T^2$. Во всех случаях влияние температуры учитывается только, как параметрическое; термические

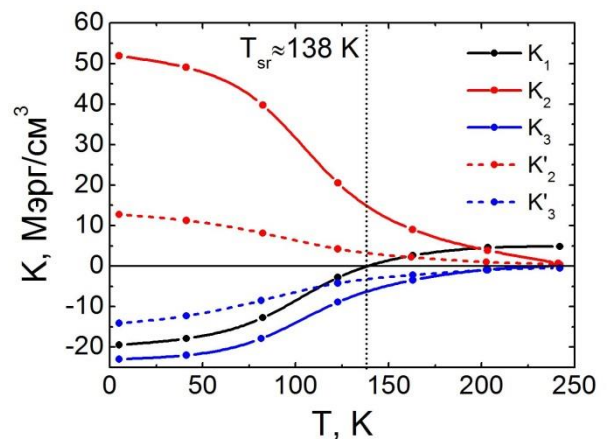


Рисунок 3.2 – Температурные зависимости констант магнитокристаллической анизотропии интерметаллида $Nd_2Fe_{14}B$ с указанной температурой СПП [47]

флуктуации вектора намагниченности опускаются в силу высоких значений констант магнитной анизотропии.

Присвоение направлений ОЛН для зерен осуществляется матрично в сферической системе координат. Так, для генерации изотропного распределения направлений в пространстве достаточно задать равномерное распределение по азимутальному углу (ψ) и распределение по арккосинусу для зенитного угла (θ). Последнее связано с тем, что если установить равномерное распределение и для зенитного угла (интуитивное желание), то формируется выделенное направление вдоль оси Z . Действительно, если разбить сферу на равные секторы по углам ψ и θ , то в каждый сектор в соответствии с равномерным распределением будет входить одинаковое число векторов ОЛН (рис. 3.3), однако площади секторов ближе к полюсам уменьшаются по закону синуса, что приводит к повышению плотности векторов вдоль оси Z .



Рисунок 3.3 – Визуализация деления сферы на секторы

Для генерации направлений $[100]$ в базисной плоскости зерен (ОТН), использовалась специальная процедура. Для каждого зерна применялся поворот его ОЛН, который совмещал ее с осью Z системы координат ансамбля. В новой СК, в плоскости, нормальной к ОЛН, создавался единичный вектор в соответствии с равномерным распределением по направлениям плоскости. После чего преобразование поворота полученного вектора ОТН в исходную систему координат давало его компоненты.

Меняя виды функций распределений для азимутального и зенитного углов ОЛН легко можно перейти от изотропного ансамбля к текстурированному относительно заданного пользователем направления с распределением относительно него, например, по нормальному закону.

Именно однофазному ансамблю зерен посвящена большая часть настоящей магистерской диссертации, так как определение магнитных свойств отдельно взятых фаз, в частности межзеренного обменного взаимодействия, является базисом для исследования многофазных систем и прогнозирования их свойств.

Многофазный ансамбль. Заложена возможность, позволяющая все зерна ансамбля разделить на несколько фаз, что задается соответствующим числовым индексом. Деление может быть выполнено как упорядоченно, например, для формирования интерфейса строго чередующихся зерен различных фаз, так и в качестве случайной выборки. В последнем случае процентное соотношение фаз устанавливается пользователем. Для примера на рисунке 3.4 а представлен вид двухфазного двумерного ансамбля зерен в форме гексагонов с

соотношением фаз 1:1. Для каждой фазы могут быть заданы индивидуальные магнитные характеристики, в том числе специфицируется парное межзеренное обменное взаимодействие в соответствии с числом фаз (для двухфазного ансамбля это будет набор констант $J_{IEI}^{(1-1)}$, $J_{IEI}^{(1-2)}$, $J_{IEI}^{(2-2)}$). Все это позволяет выполнять расчеты магнитных гистерезисных свойств нанокompозитных систем, состоящих из магнитомягкой фазы (МФ) и магнитотвердой фазы (ТФ). На рисунке 3.4 б представлены приведенные петли магнитного гистерезиса магнитомягкой фазы α -Fe и магнитотвердой фазы $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$, а также петля магнитного гистерезиса нанокompозита на их основе с соотношением фаз 1:1. Вычисленное максимальное энергетическое произведение нанокompозита превышает в два раза такое для фазы $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$, что и определяет стабильный научный интерес к материалам данного рода [3]

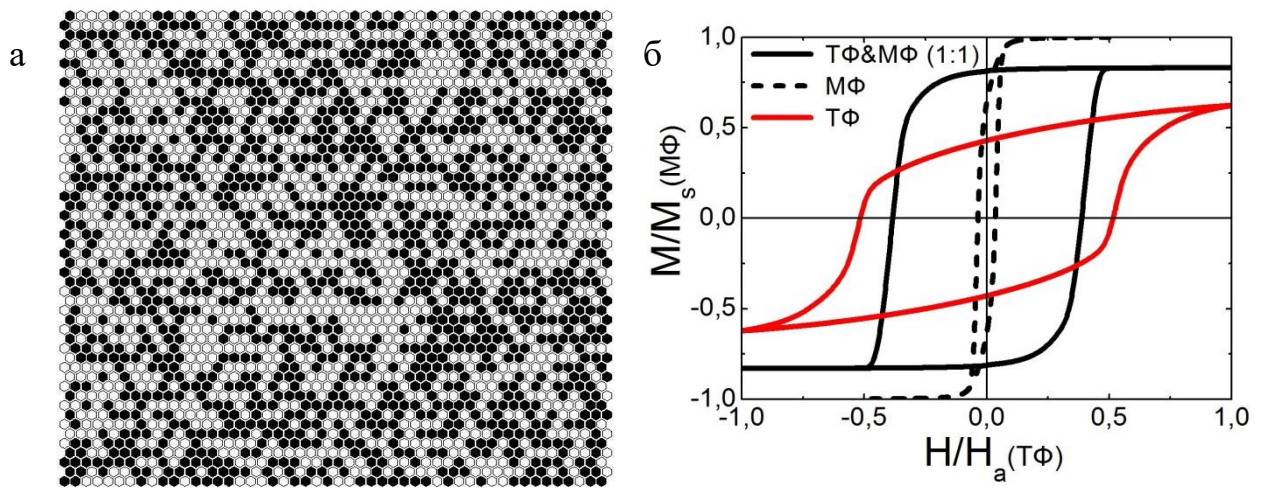


Рисунок 3.4 – (а) Двумерный ансамбль зерен в форме гексагонов ТФ $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ и МФ α -Fe, присвоение индексов фаз выполнено в случайном порядке в соотношении 1:1, (б) приведенные петли магнитного гистерезиса отдельных вышеупомянутых фаз и нанокompозита на их основе

Ансамбль, разделенный на области. В основе разбиения ансамбля на отдельные области, лежит построение двух- и трехмерной диаграмм Вороного. С математической точки зрения диаграмма Вороного конечного множества точек S в пространстве представляет такое разбиение пространства, при котором каждая область этого разбиения образует множество точек, более близких к одному из элементов множества S , чем к любому другому элементу множества [51]. Математический аппарат построения диаграммы Вороного в общем многомерном случае уже заложен в функционал MATLAB, однако развит и представлен в качестве триангуляции Делоне (связь между ними взаимно-однозначная). Из вышесказанного следует, что разбиение на области определяет массив точек S , распределенный по исходному ансамблю. Это может быть как случайное распределение по объему ансамбля, так и специфические распределения, вплоть до полной упорядоченности точек, а значит и областей. На рисунке 3.5 представлен пример триангуляции, а также

диаграмма Вороного произвольного множества точек, распределенных по двумерному ансамблю гексагонов случайным образом и соответствующее деление ансамбля на области. Индексы, отвечающие за принадлежность зерна к той или иной области ансамбля, сохраняются, и в программах на их основе присваиваются индивидуальные магнитные характеристики не отдельным зернам, как в предыдущем случае, а областям. Такая возможность позволяет, к примеру, создать ансамбль частиц, где в качестве зерен рассматриваются именно области. Может быть установлено пользователем единое направление осей легкого намагничивания внутри каждой области, но изотропное среди них, сильное межчастичное обменное взаимодействие внутри области, а также намного более слабое обменное взаимодействие на границах зерен. Данный ансамбль частиц позволяет снять главное предположение модели Стонера-Вольфарта – однородную намагниченность внутри зерен и на основе микромагнитных расчетов проанализировать результаты, к которым приводит отсутствие данного ограничения.

В целом данный тип ансамбля способен более точно воспроизвести структуру реальных объектов, но является более сложным для анализа и требует больших вычислительных мощностей.

3.3 ЧИСЛЕННЫЙ И ВИЗУЛЬНЫЙ АНАЛИЗ АНСАМБЛЯ

Использование встроенных возможностей MATLAB по анимации и графической обработке данных позволяет проводить наглядный и информативный анализ моделируемых объектов. В частности, написаны программы по анимации вращения магнитных моментов зерен в ходе процессов намагничивания и перемагничивания ансамбля. Это может быть как двух- или трехмерная анимированная модель векторов намагниченности зерен (рис. 3.6, а), так и отдельные сечения ансамбля. В последнем случае можно спроецировать на плоскость сечения, либо все зерна ансамбля, либо только те, что принадлежат плоскости. Если же интерес представляют не тангенциальные по отношению к плоскости компоненты векторов, а нормальные, то можно прибегнуть к другому типу визуализации – сопоставлению области значений проекций $[-1;1]$ определенной цветовой гамме.

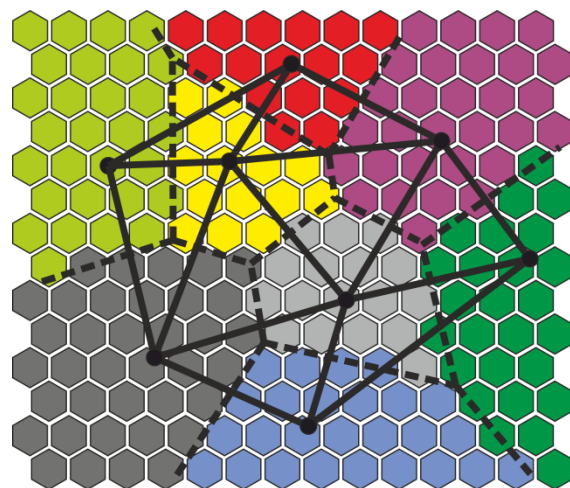


Рисунок 3.5 – Схематическое пояснение к построению триангуляции Делоне (сплошные линии) и диаграммы Вороного (пунктирные линии) произвольного множества точек, распределенных по двумерному ансамблю гексагонов и соответствующее деление ансамбля на области.

Также стоит отметить широкие возможности по комбинированию анимации. К примеру, к анимации процесса перемагничивания можно добавить сопряженный график петли гистерезиса, на которой будет отмечаться положение данного кадра. В целом возможности по визуализации и анимации достаточно гибкие.

Так как при большом числе элементов ансамбля визуальный анализ расположения векторов намагниченности или же контроль соответствия структуры ансамбля желаемым параметрам затруднителен, то основным инструментом для этого служит построение распределений по углам сферической СК основных векторов. Показателен случай изотропного ансамбля: теоретическое распределение зенитного угла векторов ОЛН должно удовлетворять закону синуса. На рисунке 3.6 б наглядно показано соответствие теоретическому распределению структуры изотропного ансамбля, состоящего из 1,000,000 зерен, который был сгенерирован описанными выше программами. Также приведена иная «дефектная» структура, отличающаяся от требуемого распределения. Структура ОЛН в последней создавалась в декартовой системе координат, посредством равномерного распределения проекций во всех трех измерениях, затем вектора нормировались на единицу. Видны характерные пики плотности вероятности в районе 55° и 125° , что соответствует направлениям на углы куба.

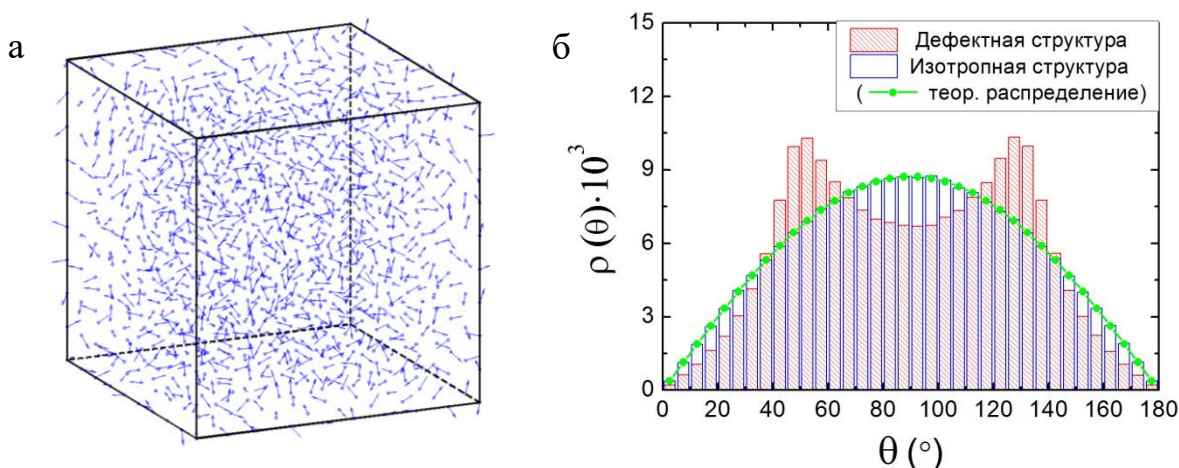


Рисунок 3.6 – (а) Визуализация изотропной структуры ОЛН ансамбля из 1000 элементов; (б) сравнение распределений зенитного угла θ структур различной текстуры с теоретическим распределением изотропного ансамбля

3.5 АЛГОРИТМЫ ПОИСКА МИНИМУМА ЭНЕРГИИ

Можно выделить два принципиальных способа построения алгоритма минимизации энергии ансамбля, каждый из которых в силу своих особенностей имеет определенные преимущества и недостатки. Но прежде чем перейти к их обсуждению, необходимо рассмотреть предлагаемый механизм варьирования положения векторов намагниченности, что является базисом обоих алгоритмов.

3.5.1 Варьирование положения вектора намагниченности

Рассмотрим отдельное зерно i – необходимо выполнить численный поиск локального минимума его энергии, которая в самом общем случае для всех рассмотренных ансамблей задается выражением:

$$E_i = E_i^A - M_{S_i} V(\vec{\mu}_i \cdot \vec{H}) - S \sum_{j=1}^N J_{IEI}^{(i-j)} \vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_{ij} \quad (3.1)$$

где E_i^A – энергия магнитной анизотропии, представленная в виде ряда (1.24) или в виде выражения $-K_i V(\vec{\mu}_i \cdot \vec{n}_i)^2$ для одноосного приближения в зависимости от типа ансамбля и вычислений. Самым надежным способом осуществить поиск, является пошаговое изменение ориентации приведенного вектора намагниченности зерна $\vec{\mu}_i$ с некоторым дискретом (далее варьирование). С учетом симметрии, варьирование формализовано в сферической системе координат, тогда положение вектора намагниченности определяется зенитным

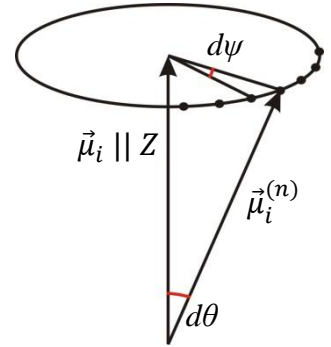


Рисунок 3.7 – Варьирование положения вектора намагниченности

и азимутальным углами (θ, ψ) . В случае произвольных значений последних варьирование требует привлечения сложных функциональных зависимостей между θ, ψ и $d\theta, d\psi$. В виду этого применим ко всем характерным векторам зерна (ОЛН, ОТН, $\vec{H}, \vec{\mu}_{ij}$) операцию поворота СК, совмещающую вектор намагниченности $\vec{\mu}_i$ с осью Z ансамбля. В новой системе координат варьирование вектора намагниченности можно определить векторами $\vec{\mu}_i^{(n)}$ вида $(d\theta, \psi_n)$, где ψ_n является массивом углов, отстоящих друг от друга на дискрет $d\psi$ (рис. 3.7). Значения малых углов $d\theta$ и $d\psi$ задаются пользователем и являются параметрами точности данной расчетной задачи. Из массива векторов $\vec{\mu}_i^{(n)}$ необходимо выбрать тот вектор, которому соответствует минимальное значение энергии зерна. Именно этот вектор и рассматривается, как потенциально новое положение вектора намагниченности, для чего выполняется сравнение соответствующей ему энергии со значением энергии состояния зерна до операции варьирования: если энергия меньше, то происходит переприсвоение вектора намагниченности и повторное выполнение всех операций, если же больше – зерно находится в состоянии локального минимума энергии. Описанный выше алгоритм варьирования приведен в блок-схеме на рисунке 3.8.

Генерирование массива векторов $\vec{\mu}_i^{(n)}$, а далее выбор минимального по энергии из них – не самый рациональный метод, что особенно актуально при вычислениях с высокой точностью или большим числом частиц. Такой способ универсален, он не требует никаких предположений об особенностях зависимости энергии от азимутального угла, но в рамках моделируемой задачи ряд предположений является справедливым. А именно, при варьировании минимум энергии будет единственным. Для демонстрации этого представлен

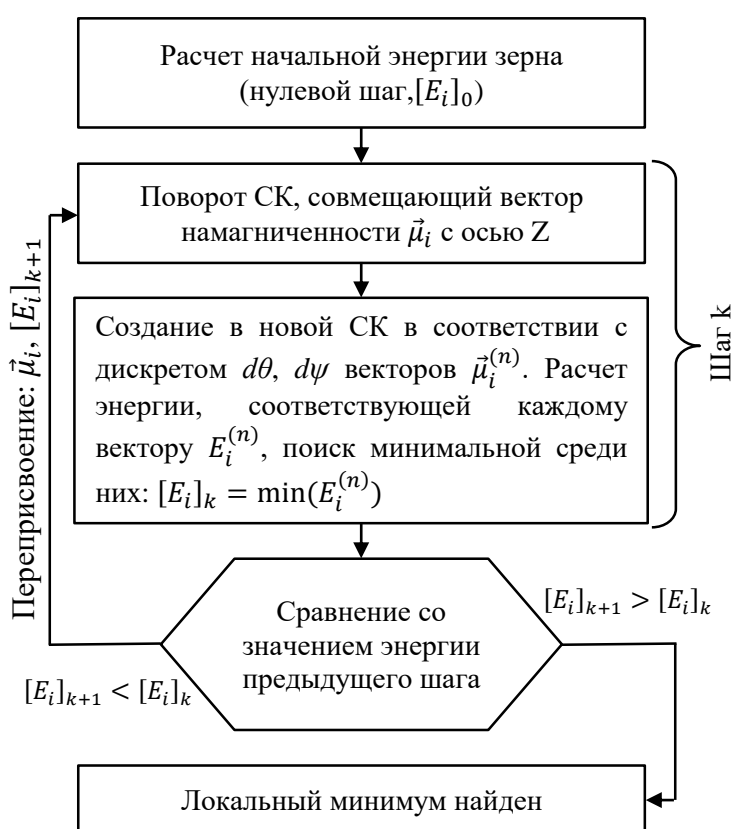


Рисунок 3.8 – Блок-схема алгоритма по варьированию положения вектора намагниченности частицы

график зависимости приведенной энергии векторов $\vec{\mu}_i^{(n)}$ от азимутального угла ψ для зерна с произвольно сгенерированными параметрами (рис. 3.9 а). Отчасти это достигается за счет локальности операции варьирования. Если рассмотреть энергию зерна при всех возможных положениях вектора намагниченности, то видно, что особенности зависимости $E(\theta, \psi)$ (два минимума, обозначенных синим, рис. 3.9 б) достаточно сильно разнесены в сферическом пространстве, локально же положение минимума при варьировании детерминировано. Учет данного факта, позволяет успешно использовать метод дихотомии вместо генерирования массивов $\vec{\mu}_i^{(n)}$ для поиска вектора с минимальной энергией на каждом шаге варьирования.

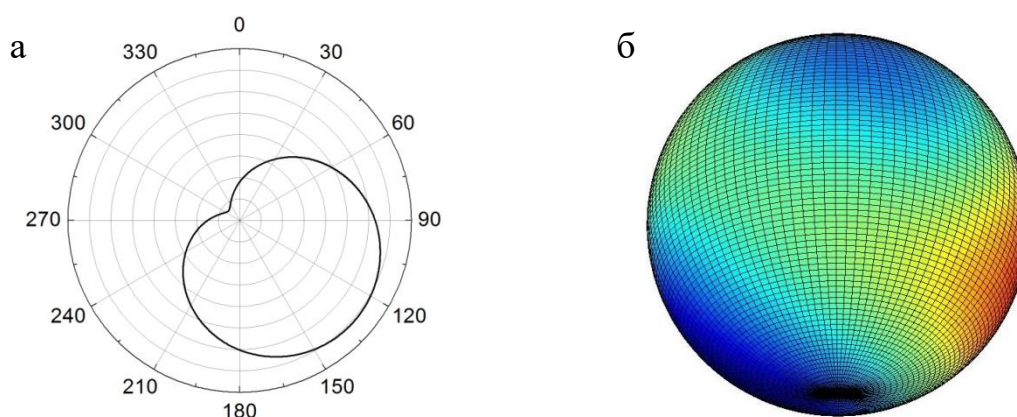


Рисунок 3.9 – (а) Зависимость приведенной энергии вариационного вектора от азимутального угла; (б) зависимость приведенной энергии от сферических координат для отдельно взятого зерна ансамбля

Теперь, когда алгоритм поиска локального минимума энергии для отдельно взятого зерна определен, необходимо согласовать минимизацию энергии для всего ансамбля в целом. И здесь возникают две принципиальные возможности, о которых было сказано ранее.

3.5.2 Расчет с применением CPU

Первая возможность заключается в последовательной минимизации энергии всех зерен ансамбля. При этом на каждом шаге выполняется синхронизация найденного положения вектора намагниченности зерна i с общим массивом векторов намагниченности ансамбля. Благодаря этому рассчитанное значение вектора $\vec{\mu}_i$ может участвовать в вычислении минимума энергии соседних зерен (в случае, если между ними имеется взаимодействие). Важно учесть, что минимизация последовательная, следовательно, переход от рассчитанного зерна i к соседнему и вычисление его равновесного состояния приводят к накоплению погрешности, связанной со смещением минимума энергии зерна i в силу парных взаимодействий. Для того чтобы снизить уровень накапливаемой погрешности до приемлемого, реализуются повторные расчеты ансамбля.

В качестве критерия прекращения повторных расчетов ансамбля выступает уровень дискриминации (DL), устанавливаемый пользователем. До каждого итерационного шага варьирования положений всех векторов намагниченности k вычисляется начальная энергия ансамбля E_k и энергия ансамбля после минимизации E_{k+1} . В случае если их процентная разница меньше установленного уровня дискриминации $\frac{E_k - E_{k+1}}{|E_k|} \cdot 100 < DL$, то полагается достижение ансамблем равновесного состояния при данном внешнем магнитном поле. Пример характерной зависимости энергии ансамбля от числа выполненных итераций представлен на рисунке 3.10. Как видно из графика, после 60-70 итераций минимизации, энергия ансамбля перестает значительно меняться, стремясь к постоянному значению. Большинство представленных в работе расчетов выполнено с уровнем дискриминации меньше, либо равным 10^{-4} %.

Необходимость столь низкого уровня дискриминации продиктована тем, что процесс необратимого вращения векторов намагничивания отдельно взятой небольшой группы зерен, для которой достигнуто критическое поле, происходит с небольшим изменением энергии на фоне

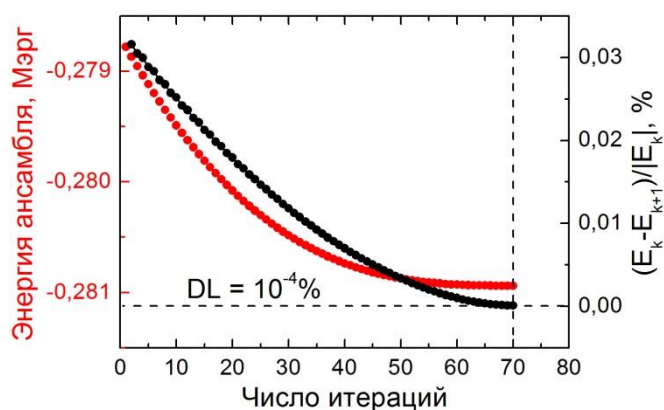


Рисунок 3.10 – Характерная зависимость энергии и соответствующего относительного изменения энергии от числа итерации повторных расчетов

энергии всего ансамбля в целом. В связи с этим, иным способом формализации условия прекращения повторных расчетов может выступать анализ разницы энергий не всего ансамбля, а отдельных зерен $E_k^{(i)} - E_{k+1}^{(i)}$ и выбор максимальной разницы среди них. Именно это значение и предлагается сравнивать с уровнем дискриминации $\max\left(\frac{E_k^{(i)} - E_{k+1}^{(i)}}{|E_k^{(i)}|}\right) \cdot 100 < DL$ в качестве более избирательной альтернативы.

Отметим также, что при необратимом вращении векторов намагниченности достигается максимальное количество итераций перерасчета взаимодействующего ансамбля зерен, как это продемонстрировано на рисунке 3.11.

Еще одна особенность, связанная с последовательной минимизацией энергии зерен ансамбля, заключается в организации самой последовательности обращения к элементам ансамбля. Если расчет зерен осуществлять в виде «сканирования»

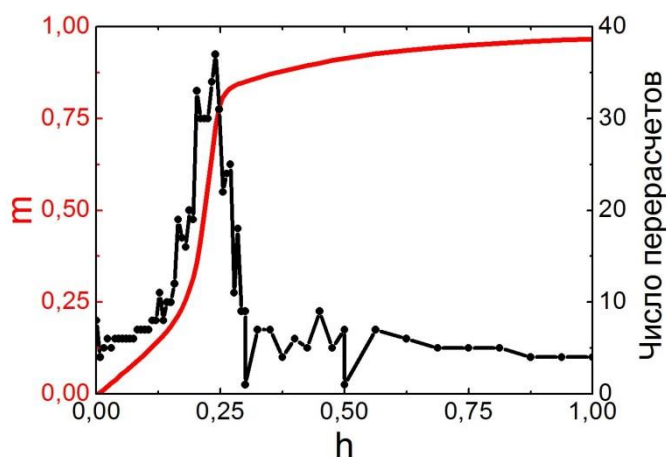


Рисунок 3.11 – Кривая намагничивания ансамбля взаимодействующих зерен и соответствующее число повторных расчетов в зависимости от внешнего магнитного поля

ансамбля (рис. 3.12), то это может создать выделенные направления намагничивания. В приведенном примере таковым будет являться направление [100]. Данный факт может сказаться на общности результата вычислений (особенно при наличии сильного парного взаимодействия в системе). По всей видимости, оптимальным будет стохастическое обращение к зернам ансамбля, что является гарантом отсутствия выделенных направлений. Также данный способ закладывает возможности для корректного распараллеливания расчета на CPU: можно реализовать одновременное стохастическое обращение к нескольким зернам,

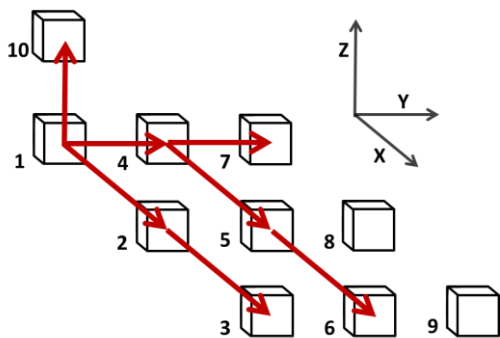


Рисунок 3.12 – Пример последовательной минимизации энергии зерен (порядок пронумерован)

по числу задействованных процессоров.

По описанному выше методу поиска равновесного состояния ансамбля с использованием ресурсов CPU работают написанные программы: `sub2d_clc`, `hex2d_clc`, `sub3d_clc`, `hex3d_clc`, а также соответствующие расширения `_hen` и `_tem`, помимо `_clc`.

3.5.3 Расчет с применением GPU

Рассмотрим вторую возможность вычисления минимума энергии ансамбля. Если в предыдущем случае последовательно варьировалось положение векторов намагниченности отдельных зерен вплоть до достижения ими локального минимума энергии, то теперь предлагается варьировать положения векторов намагниченности большой группы зерен одновременно. Механизм варьирования при этом в общих чертах остается прежним: формализованный на основе матричных операций, он применим как для отдельных переменных, так и для их массивов. Поясним последнее на примере операции поворота СК, для каждого зерна совмещающей вектор намагниченности с осью Z ансамбля и вычисляющей координаты ОЛН в новой СК:

```
alfa=(M.Z>=0).*(-atan(M.Y./abs(M.Z))). . . .
      +(M.Z<0).* (atan(M.Y./abs(M.Z))-pi);
beta=atan(M.X./sqrt(M.Y.^2 + M.Z.^2));

EArot.X=cos(beta).*EA.X - sin(beta).* (EA.Z. . . .
      .*cos(alfa)- EA.Y.*sin(alfa));
EArot.Y=cos(alfa).*EA.Y + sin(alfa).*EA.Z;
EArot.Z=sin(beta).*EA.X + cos(beta).* (EA.Z. . . .
      .*cos(alfa)- EA.Y.*sin(alfa));
```

В качестве входных переменных выполняются между их соответствующими элементами. Главное преимущество, которое обеспечивает подобная формализация программного кода в среде MATLAB: его универсальность, адаптация к высокопроизводительным вычислениям с использованием GPU требует меньших усилий по сравнению с другими средами разработки. Отметим при этом, что последнее справедливо, если изначально код создавался с учетом ограничений и специфики параллельных вычислений.

Кратко опишем процедуру параллельного варьирования векторов намагниченности зерен. Весь ансамбль в случайном порядке делится на определенное малое число областей. На вход к выполнению алгоритма, представленного на рисунке 3.8, теперь поступает не отдельное зерно, а массив зерен соответствующий выбранной кодом области (области перебираются последовательно). При этом алгоритм выполняет лишь одну итерацию, то есть, лишь немного сместив вектора намагниченности в сторону их локального минимума энергии. Деление ансамбля на малое число областей, а не расчет ансамбля целиком; варьирование лишь в пределах одной итерации, а не градиентный спуск вплоть до минимума энергии отдельной области – все это задействовано для обеспечения лучшей сходимости ансамбля к его равновесной конфигурации векторов намагниченности. В

противном случае, при определенных условиях, последнее может и не достигаться. Все вычисления описанной процедуры действий при этом теперь выполняются на GPU.

Главным вопросом, который встает перед разработчиками приложений для GPU-вычислений, всегда стоит соответствие результатов параллельных расчетов тем, которые получены ранее для CPU. Различия неизбежны в виду описанных выше особенностей, но часто они укладываются в пределы допустимой погрешности расчета.

На рисунке 3.13 представлено моделирование тестовой задачи намагничивания из терморазмагниченного

состояния ансамбля взаимодействующих зерен, выполненное программой hex3d_clc с применением CPU и hex3d_gru_clc с расчетами на GPU. Разница между кривыми в процентном отношении также представлена на графике. Как видно, различие в пределах 5% наблюдается лишь в районе магнитных полей, соответствующих необратимому вращению векторов намагниченности, во всем остальном интервале разница существенно меньше. Уменьшение шага изменения внешнего магнитного поля в данной области способно снизить разницу $\frac{m_{GPU} - m_{CPU}}{m_{CPU}}$ до необходимого соответствия результатов.

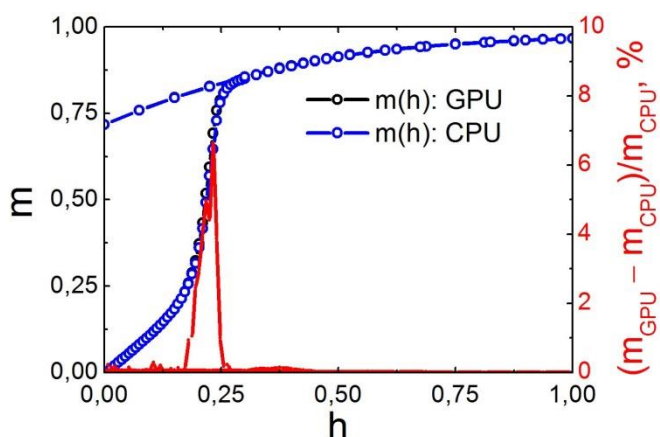


Рисунок 3.13 – Вычисление тестовой задачи намагничивания ансамбля зерен программами hex3d_clc и hex3d_gru_clc, а также сравнение полученных результатов

В заключении, проанализируем ускорение расчетов, которое достигается при использовании GPU. Был выполнен расчет все той же тестовой задачи при изменении числа элементов ансамбля. График времени расчета от числа элементов представлен на рисунке 3.14 в логарифмических координатах. Видно, что при малом числе элементов ансамбля быстрее выполняется программа hex3d_clc для CPU, но ее вычислительная сложность соответствует закону $O(N)$. При малом числе элементов ансамбля

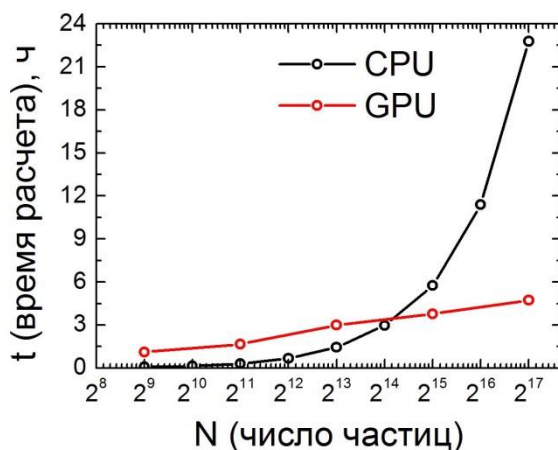


Рисунок 3.14 – Зависимости времени расчета от числа элементов ансамбля для CPU и GPU вычислений

основное время расчета на GPU затрачивается на отсылку и сбор данных с видеокарты, что снижает эффективность. Однако вычислительная сложность hex3d_gru_clc $O(\ln(N))$, что обеспечивает существенное ускорение при ансамблях более 16,000 частиц.

4 РЕЗУЛЬТАТЫ ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

4.1 МОДЕЛИРОВАНИЕ АНСАМБЛЯ НЕВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ ЗЕРЕН

Петли магнитного гистерезиса. Перед началом моделирования магнитных гистерезисных свойств обменносвязанных систем целесообразно провести вычисления невзаимодействующих однодоменных ансамблей. Это позволит верифицировать разработанную методику расчета на основе известных параметров ансамбля Стонера-Вольфарта (глава 1.1.1). Одним из них является значение приведенной остаточной намагниченности $\mu_r = 0.5$, которому в пределах погрешности расчеты удовлетворяют (рис. 4.1, а).

Рассмотрим и дадим описание кривой намагничивания и предельной кривой перемагничивания ансамбля частиц $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ в случае отсутствия взаимодействия между ними и при полном наборе констант $\{K_1, K_2, K'_2, K_3, K'_3\}$. Как отмечалось в главе 1.4 для системы Nd-Fe-B характерен спонтанный спин-переориентационный переход при температуре $T_{sr} \approx 135$ К, что приводит к смене типа анизотропии от одноосного к конусу четырех осей легкого намагничивания (КОЛН). На рисунке 4.1 представлен вид соответствующих кривых для обоих случаев: (а) при температуре $T = 200$ К $> T_{sr}$ и (б) при температуре $T = 50$ К $< T_{sr}$ (здесь и далее, если это специально не оговорено, результаты представлены для случая 3D). Так как процесс перемагничивания зерен для качественного рассмотрения изменения положений магнитных моментов не отличается от процесса намагничивания, то ограничимся анализом только последнего.

При температуре 200 К намагничивание ансамбля можно условно разделить на два этапа. Первый этап соответствует обратимому изменению ориентации векторов намагниченности под действием внешнего магнитного поля, при «выключении» которого ансамбль перейдет в начальное состояние. На втором этапе происходит необратимое перемагничивание отдельных зерен ансамбля вплоть до достижения насыщения.

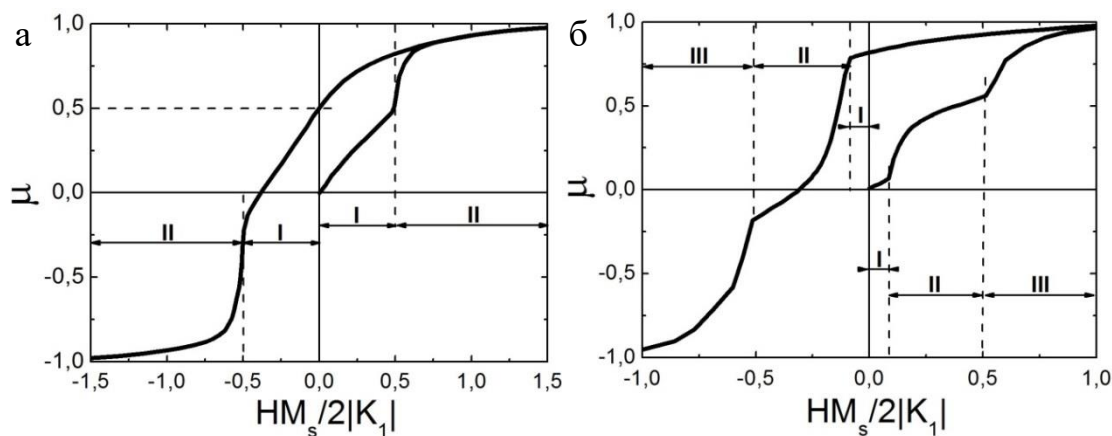


Рисунок 4.1 – Кривые намагничивания и предельные кривые перемагничивания ансамбля однодоменных невзаимодействующих зерен при температурах (а) $T=200$ К и (б) $T=50$ К

При температуре 50 К на кривой намагничивания можно выделить уже три характерных этапа. Первый этап связан с обратимым отклонением векторов намагниченности от занимаемых ранее положений в пределах поверхности КОЛН. Данный этап отсутствовал бы в случае пренебрежения константами K'_2 и K'_3 в формуле 1.24, то есть при отсутствии анизотропии в базисной плоскости кристаллитов. Это привело бы к намагничиванию ансамбля сразу со второго этапа, на котором происходит необратимое вращение вектора намагниченности зерен по поверхности КОЛН. При достижении достаточного по величине магнитного поля становится возможным выход вектора намагниченности из КОЛН и дальнейшее намагничивание ансамбля вплоть до насыщения – третий этап (также необратим).

Магнитная восприимчивость. Рассмотрим магнитную восприимчивость ансамбля невзаимодействующих однодоменных частиц $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ с изотропным распределением ОЛН ($T > T_{Sr}$) в терморазмагниченном состоянии. Для отдельно взятой частицы, решая аналитически задачу поиска равновесного положения вектора намагниченности в слабом внешнем магнитном поле (дифференцирование выражения 1.3 при $h \ll 1$), можно получить следующую формулу [31]:

$$\chi(\theta) = \frac{M_S^2 \cdot \sin^2 \theta}{2K}, \quad (4.1)$$

где, в согласии с предыдущими обозначениями, M_S – спонтанная намагниченность, θ – угол между ОЛН и внешним магнитным полем, K – константа магнитной анизотропии (K_1 , вклады более высокого порядка в энергию магнитной анизотропии здесь опускаются).

Магнитная восприимчивость невзаимодействующего ансамбля является суммой восприимчивостей его зерен. Для изотропного ансамбля в терморазмагниченном состоянии плотности распределения зенитного и азимутального углов ОЛН равны соответственно $\rho(\theta) = \frac{\sin \theta}{2}$ и $\rho(\psi) = \frac{1}{2\pi}$. В таком случае магнитная восприимчивость ансамбля будет равняться:

$$\chi_0 = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \chi(\theta) \rho(\theta) \rho(\psi) d\psi d\theta = \frac{M_S^2}{4K} \int_0^{\pi} \sin^3 \theta d\theta = \frac{M_S^2}{3K} \quad (4.2)$$

При подстановке величин спонтанной намагниченности и константы магнитной анизотропии при комнатной температуре (таблица 1.1) получим значение магнитной восприимчивости изотропного ансамбля невзаимодействующих зерен $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$, равное 0.0112. Отметим при этом, что магнитная восприимчивость в данном случае не зависит от направления, вдоль которого она вычисляется и магнитного состояния ансамбля. Таким образом, в состоянии остаточной намагниченности восприимчивость изотропного

невзаимодействующего ансамбля однодоменных частиц: $\chi_{\parallel} = \chi_{\perp} = \chi_0$. Проверка данных фактов служит еще одним критерием для тестирования корректности вычислений.

Температурные зависимости остаточной намагниченности. Рассмотрим температурную зависимость остаточной намагниченности изотропного ансамбля невзаимодействующих однодоменных частиц в приближении бесконечно малого внешнего магнитного поля. Для описания изменений намагниченности ансамбля, к которому приводит спонтанный спин-переориентационный фазовый переход, воспользуемся не полным набором констант ряда (1.24), а лишь тремя $\{K_1, K_2, K'_2\}$. Напомним, что наличие константы K'_2 обеспечивает учет магнитной анизотропии в базисной плоскости зерна. Выполнив поиск минимума энергии магнитной анизотропии $E_i^A = K_1 \sin^2 \theta_i + (K_2 + K'_2 \cos 4\varphi_i) \sin^4 \theta_i$, можно прийти к следующему выражению для угла раствора конуса четырех осей легкого намагничивания относительно направления \vec{n} :

$$\theta_c = \arcsin \sqrt{\frac{|K_1|}{2(K_2 - K'_2)}} \quad (4.3)$$

Рассмотрим теперь произвольное зерно ансамбля (рис. 4.2) с координатами (θ, ψ) его ОЛН (\vec{n}) в сферической системе координат, связанной с вектором остаточной намагниченности ансамбля: $\vec{\mu}_r \uparrow \uparrow Z$ (назовем ее исходной). В отсутствие внешних магнитных полей при некоторой температуре T , ниже T_{sr} , вектор намагниченности зерна займет одно произвольно выбранное из четырех положений на поверхности КОЛН с углом раствора θ_c . В случае, если во время СПП приложено бесконечно малое внешнее магнитное поле $\delta \vec{H}$, сонаправленное вектору остаточной намагниченности ансамбля $\vec{\mu}_r$, то из четырех вариантов будет выбран тот, который наиболее выгоден с точки зрения энергии Зеемана, то есть с ориентацией наиболее близкой к оси Z . Таким образом, усредняя по всем зернам с зенитным углом

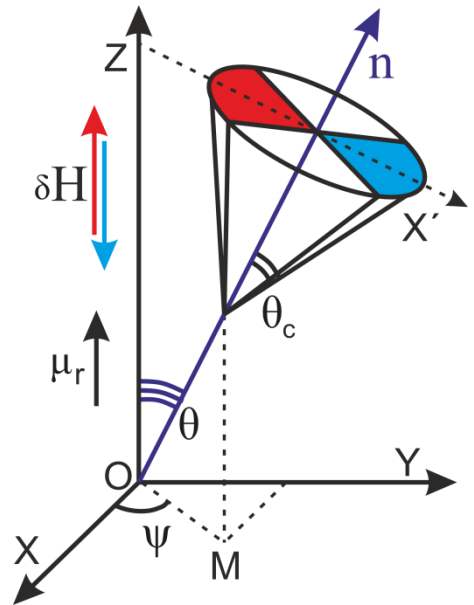


Рисунок 4.2 – Схема взаимной ориентации вектора остаточной намагниченности μ_r , бесконечно малого внешнего магнитного поля, ОЛН n и соответствующего ей конуса осей после СПП

θ , мы приходим к равномерному распределению векторов намагниченности в интервале азимутальных углов $\psi \in \left[\frac{5}{4}\pi, \frac{7}{4}\pi \right]$ в системе координат, связанной с вектором ОЛН ($\vec{n} \uparrow Z$) (область обозначена красным на рис. 4.2). В данной (собственной) системе координат вектор намагниченности имеет следующие компоненты:

$$\begin{aligned}
\mu'_x &= \sin \theta_c \cdot \cos \psi' \\
\mu'_y &= \sin \theta_c \cdot \sin \psi' \\
\mu'_z &= \cos \theta_c
\end{aligned} \tag{4.4}$$

В силу симметрии задачи относительно оси Z исходной СК, можно исключить из рассмотрения азимутальный угол ОЛН, приняв $\psi = 0$. Тогда операция поворота собственной СК, совмещающая вектор \vec{n} с осью Z , примет упрощенный вид. После поворота, компоненты вектора намагниченности в исходной системе координат будут определяться:

$$\begin{aligned}
\mu_x &= \mu'_z \sin \theta + \mu'_x \sin \theta = \cos \theta_c \sin \theta + \sin \theta_c \cos \psi' \sin \theta \\
\mu_y &= \mu'_y = \sin \theta_c \sin \psi' \\
\mu_z &= \mu'_z \cos \theta - \mu'_x \sin \theta = \cos \theta_c \cos \theta - \sin \theta_c \cos \psi' \sin \theta
\end{aligned} \tag{4.5}$$

С учетом изотропного распределения ОЛН ансамбля, остаточная намагниченность при температуре ниже T_{sr} и в присутствии бесконечно малого положительного внешнего магнитного поля $\delta \vec{H}$ будет определяться интегралом:

$$\begin{aligned}
\mu_r &= \frac{2}{\pi} \int_{\frac{5\pi}{4}}^{\frac{7\pi}{4}} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \mu_z \sin \theta d\psi' d\theta = \frac{2}{\pi} \int_{-\frac{\pi}{4}}^{\frac{\pi}{4}} \int_0^{\frac{\pi}{2}} (\cos \theta_c \cos \theta + \sin \theta_c \cos \psi' \sin \theta) \sin \theta d\psi' d\theta = \\
&= \frac{1}{2} \cos \theta_c + \frac{\sqrt{2}}{2} \sin \theta_c
\end{aligned} \tag{4.6}$$

Подставляя в данную формулу выражение (4.3), а также выполнив описанную выше последовательность действий для случаев бесконечно малого отрицательного внешнего магнитного поля и его отсутствия, приходим к следующему результату:

$\mu_r^+ = \frac{1}{2} \left[\sqrt{1 - \frac{ K_1(T) }{2(K_2(T) - K_2'(T))}} + \sqrt{\frac{ K_1(T) }{(K_2(T) - K_2'(T))}} \right]$	$\delta \vec{H} \uparrow \uparrow \vec{\mu}_r$	(4.7)
$\mu_r^0 = \frac{1}{2} \sqrt{1 - \frac{ K_1(T) }{2(K_2(T) - K_2'(T))}}$	$\vec{H} = 0$	(4.8)
$\mu_r^- = \frac{1}{2} \left[\sqrt{1 - \frac{ K_1(T) }{2(K_2(T) - K_2'(T))}} - \sqrt{\frac{ K_1(T) }{(K_2(T) - K_2'(T))}} \right]$	$\delta \vec{H} \uparrow \downarrow \vec{\mu}_r$	(4.9)

Таким образом, для ансамбля невзаимодействующих однодоменных частиц температурные зависимости приведенной остаточной намагниченности в слабых магнитных полях полностью определяются температурными зависимостями констант магнитной анизотропии и могут быть выражены формулами (4.7-4.9). Согласно им, при $T < T_{sr}$ и в отсутствие внешнего магнитного поля будет наблюдаться незначительное снижение остаточной намагниченности, в то время как при бесконечно малом положительном

(отрицательном) внешнем магнитном поле происходит значительный рост (падение) данной величины.

Сравним выполненные теоретические выкладки с результатами компьютерного моделирования. Расчет был выполнен для ансамбля 32,768 не взаимодействующих частиц при внешних магнитных полях H по модулю равных 1 кЭ ($H \ll H_a|_{T=240K} \approx 65$ кЭ) и в их отсутствии. Использовались температурные зависимости набора констант $\{K_1, K_2, K'_2\}$ (рис. 3.2), при этом значение спонтанной намагниченности принималось неизменным. Результаты вычислений представлены на рисунке 4.3 сплошными линиями, точками для сравнения обозначены зависимости, соответствующие формулам 4.7-4.9. Основное расхождение между ними наблюдается в районе температуры спонтанного спин-переориентационного перехода, что объясняется сильным снижением энергии анизотропии в данной точке ($K_1 = 0$ при T_{sr}). Это приводит к тому, что внешнее магнитное поле в 1 кЭ становится достаточным для заметных отклонений вектора намагниченности от ОЛН и положений в КОЛН – приближение бесконечно слабого внешнего магнитного поля не удовлетворяется. Во всем остальном температурном интервале имеется хорошее согласие между численными и аналитическими результатами. К примеру, расчетное снижение приведенной остаточной намагниченности рассматриваемого ансамбля в отсутствие внешнего магнитного поля от значения 0.5 (рис.4.3, зеленый пунктир) в пределах погрешности соответствует теоретическим предсказаниям.

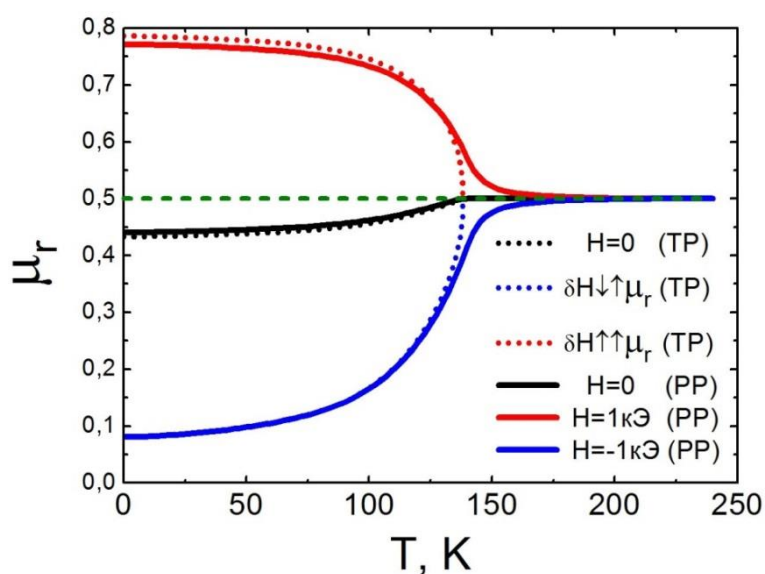


Рисунок 4.3 – Расчетные (сплошные линии) и теоретические (точки) температурные зависимости приведенной остаточной намагниченности. Для всех случаев направления внешнего магнитного поля относительно намагниченности ансамбля и его величина указаны на графике; зеленым пунктиром обозначено значение приведенной остаточной намагниченности, равное 0.5

4.2 СЛАБОЕ МЕЖЗЕРЕННОЕ ОБМЕННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

4.2.1 Эффект усиления остаточной намагниченности

Межзеренное обменное взаимодействие в ансамбле однодоменных частиц приводит к эффекту усиления остаточной намагниченности, который схематически представлен на рисунке 4.4. Взаимодействующие обменно связанные вектора намагниченности (красные)

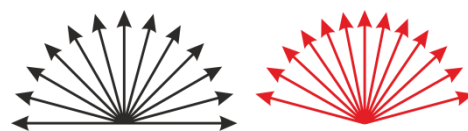


Рисунок 4.4 – Схематическое пояснение к эффекту усиления остаточной намагниченности

смещаются от ориентации соответствующих им ОЛН к направлению остаточной намагниченности. В главе 1.2.1 была продемонстрирована формула 1.19, которая в рамках приближения слабой обменной связи для изотропного ансамбля устанавливает зависимость между приведенной остаточной намагниченностью и параметром взаимодействия $\alpha = \frac{J_{IEI}S}{KV}$:

$$\mu_r = \frac{1}{2} + \frac{\alpha N}{6} \quad (4.10)$$

Был выполнен компьютерный эксперимент по построению петель магнитного гистерезиса и определению остаточной намагниченности изотропного ансамбля 32,768 однодоменных зерен $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ при варьировании параметра взаимодействия. С этой целью был выбран ряд характерных размеров зерен $d = \{51.0, 25.5, 17.0, 12.7, 10.2, 8.5, 7.3 \mid \text{нм}\}$, что обеспечивает равномерное возрастание параметра взаимодействия $\alpha = \{0.01, 0.02, 0.03, 0.04, 0.05, 0.06, 0.07\}$ и одновременно удовлетворяет интервалу выше размера суперпарамагнетизма и ниже критического размера однодоменности (таблица 1.1). Таким образом, предположение о перемагничивании ансамбля за счет когерентного вращения векторов намагниченности справедливо. На рисунке 4.5, а направление возрастания параметра взаимодействия среди серии кривых намагничивания и предельных кривых перемагничивания обозначено красной стрелкой. Видно, что с увеличением параметра взаимодействия уменьшаются критические магнитные поля начала необратимого процесса перемагничивания, а также растет приведенное значение остаточной намагниченности μ_r . Для наглядного анализа последняя зависимость построена отдельно и представлена на рисунке 4.5, б. На нем, красная прямая линия проведена в соответствии с выражением 4.10. При параметрах взаимодействия $(1 \div 3) \cdot 10^{-2}$ отклонения от теоретической прямой укладываются в пределы расчетной погрешности. При параметрах взаимодействия выше данных значений наблюдается тренд в сторону увеличения приведенной остаточной намагниченности по отношению к прогнозируемой формулой 4.10 величине.

Для демонстрации того, что это не связано с погрешностью вычислений, для $\alpha = 0.07$ было выполнено четыре расчета для отличных ансамблей одинакового размера. Результаты расчета приведенной остаточной

$\mu_{r(i)}$	$\langle \mu_r \rangle$	$(\mu_{r(i)} - \langle \mu_r \rangle)^2$	S	$\Delta \mu_r$
0.650	0.6513	$1.56 \cdot 10^{-6}$	$1.5 \cdot 10^{-3}$	0.005
0.652		$5.62 \cdot 10^{-7}$		
0.648		$1.06 \cdot 10^{-5}$		
0.655		$1.41 \cdot 10^{-5}$		

Таблица 4.1 – Выборка приведенных остаточных намагниченностей, вычисленное среднее значение и его погрешность ($t_\alpha = 3.2, \alpha = 0.95$)

намагниченности для них и вычисленная погрешность среднего значения указаны в таблице 4.1. Данная погрешность связана с конечным числом элементов ансамбля и, как следствие из этого, небольшими отклонениями от изотропного распределения ОЛН. Погрешность, связанная с дискретом шага варьирования ($d\theta, d\psi$) и уровнем дискриминации на порядок меньше (для расчета использовались параметры: $d\theta=d\psi=10^{-3}\pi, DL=10^{-4}\%$). Вычисленная общая погрешность для соответствующей точки обозначена штрихами на рисунке 4.5, б. Видно, что отклонение не укладывается в рамки погрешности. Это говорит о том, что параметр взаимодействия велик и не соответствует в полной мере приближению слабой обменной связи. По-видимому, критерий слабой обменной связи следует формулировать в виде $\frac{\alpha N}{2} \ll 1$, а не как ранее $\alpha \ll 1$.

Таким образом, на основании данного компьютерного эксперимента, для моделирования системы частиц Nd-Fe-B в рамках слабой обменной связи был сужен ряд параметров взаимодействия до значений $(1 \div 3) \cdot 10^{-2}$. Это соответствует размерам зерен 17-51 нм при принятой константе межзеренного обменного взаимодействия $J_{IEI}=5$ эрг/см².

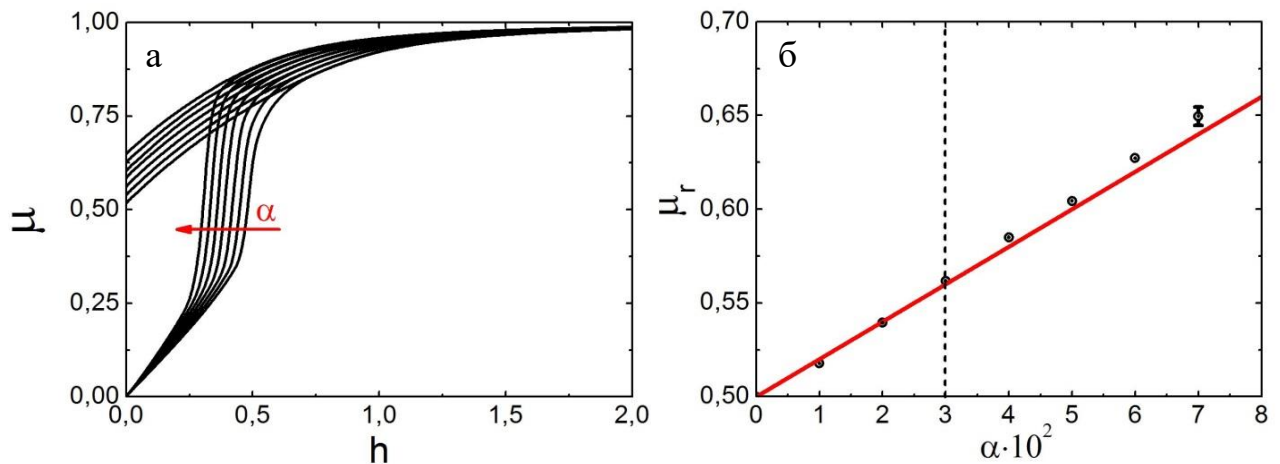


Рисунок 4.5 – (а) Кривые намагничивания и предельные кривые перемагничивания ансамбля зерен Nd₂Fe₁₄B, рассчитанные с разным значением параметра межзеренного обменного взаимодействия; (б) схема механизма усиления остаточной намагниченности

4.2.2 Магнитная восприимчивость

Продольная магнитная восприимчивость.

Найдем аналитически выражение для продольной магнитной восприимчивости ансамбля с изотропным распределением ОЛН однодоменных одноосных частиц в состоянии остаточной намагниченности и в приближении слабой обменной связи между частицами ($\frac{\alpha N}{2} \ll 1$). При этом будем пользоваться обозначениями и результатами выкладок главы 1.2.1. В соответствии с ними, в отсутствие внешнего магнитного поля за счет слабой обменной связи между зернами происходит отклонение векторов намагниченности $\vec{\mu}_i$ от осей легкого намагничивания \vec{n}_i на малый угол $\varphi_0 = \frac{\alpha N}{4} \sin \theta$. В силу радиальной симметрии относительно оси Z ($\vec{\mu}_r \parallel Z$), отклонение происходит только в плоскости MOZ, то есть φ_0 является поправкой к азимутальному углу θ .

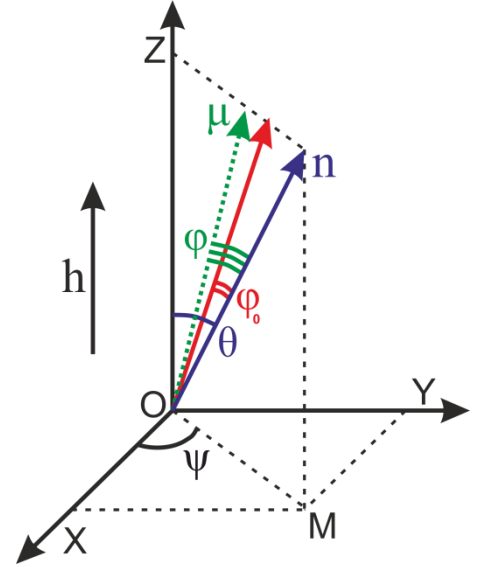


Рисунок 4.6 – Схема взаимной ориентации вектора намагниченности μ , ОЛН n , и малого внешнего магнитного поля h

В сферической СК найдем равновесное положения вектора намагниченности произвольного зерна i , для которого приведенная энергия будет записываться в виде выражения 1.12:

$$\varepsilon_i = -(\vec{\mu}_i \cdot \vec{n}_i)^2 - 2(\vec{\mu}_i \cdot \vec{h}) - \alpha \sum_{j=1}^N \vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j \quad (4.11)$$

Добавление малого внешнего магнитного поля вдоль оси Z ($h \ll \frac{\alpha N}{2}$) не меняет симметрии задачи. А значит, как и ранее (1.15), усредненное по ансамблю значение вклада в энергию от межзеренного обменного взаимодействия в сферической СК примет вид:

$$\langle \alpha \sum_{j=1}^N \vec{\mu}_i \cdot \vec{\mu}_j \rangle = \frac{\alpha N}{2} \cos(\theta_i - \varphi_i) \quad (4.12)$$

Таким образом, с учетом выполненного усреднения и подстановки сферических координат (рис. 4.6) энергия отдельного зерна ансамбля, опуская индексы, может быть переписана следующим образом:

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \sin^2(\varphi) - \left(2h + \frac{\alpha N}{2}\right) \cos(\theta - \varphi) \approx [\varphi \ll 1] \approx \\ &\approx \varphi^2 - \left(2h + \frac{\alpha N}{2}\right) (\cos \theta + \varphi \cdot \sin \theta) \end{aligned} \quad (4.13)$$

В выражении 4.13 выполнено преобразование в соответствии с предположением о слабом отклонении векторов намагниченности от ОЛН: $\varphi \ll 1$. Далее осуществим поиск равновесного положения вектора намагниченности зерна:

$$\frac{d\varepsilon}{d\varphi} = 2\varphi - \left(2h + \frac{\alpha N}{2}\right) \sin \theta = 0. \quad (4.14)$$

$$\varphi = \left(h + \frac{\alpha N}{4}\right) \sin \theta \quad (4.15)$$

Подставляя в выражение 4.15 φ_0 , можно выразить отклонение зенитного угла вектора намагниченности $\Delta\varphi$, вызванное внешним магнитным полем, сонаправленным вектору остаточной намагниченности:

$$\Delta\varphi = \varphi - \varphi_0 = h \sin \theta \quad (4.16)$$

Теперь, имея в распоряжении формулу 4.16, можно вычислить продольную магнитную восприимчивость произвольно взятого зерна с отклонения ОЛН от оси Z на угол θ :

$$\begin{aligned} \chi_{\parallel}(\theta) &= \frac{M_s d\mu_z}{H_a dh} \Big|_{h=0} = \left[\chi_0 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{M_s^2}{3K} \right] = \frac{3}{2} \chi_0 \frac{d \cos(\theta - \varphi)}{dh} \Big|_{h=0} = \frac{3}{2} \chi_0 \sin(\theta - \varphi_0) \sin \theta = \\ &= \frac{3}{2} \chi_0 (\sin^2 \theta - \varphi_0 \cos \theta \sin \theta) = \frac{3}{2} \chi_0 \left(\sin^2 \theta - \frac{\alpha N}{4} \cos \theta \sin^2 \theta \right) \end{aligned} \quad (4.17)$$

Для вычисления продольной восприимчивости всего ансамбля в целом, необходимо выполнить интегрирование с учетом функции распределения ОЛН:

$$\chi_{\parallel} = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \chi_{\parallel}(\theta) \sin \theta \, d\theta = \frac{3}{2} \chi_0 \int_0^{\frac{\pi}{2}} \left(\sin^3 \theta - \frac{\alpha N}{4} \cos \theta \sin^3 \theta \right) d\theta = \chi_0 \left(1 - \frac{3}{32} \alpha N \right) \quad (4.18)$$

$$\boxed{\chi_{\parallel} = \chi_0 \left(1 - \frac{3}{32} \alpha N \right)} \quad (4.19)$$

Таким образом, впервые с применением теории возмущений получено выражение 4.19, связывающее продольную магнитную восприимчивость с параметром взаимодействия α изотропного ансамбля однодоменных одноосных частиц в приближении слабой обменной связи. Видно, что в отсутствии взаимодействия $\chi_{\parallel} = \chi_0$, что находится в согласии с предыдущей главой. С увеличением параметра взаимодействия (что может быть вследствие уменьшения размера зерен, увеличения константы межзеренного обменного взаимодействия или уменьшения константы одноосной магнитной анизотропии) значение продольной магнитной восприимчивости падает в соответствии с линейным законом 4.19.

Поперечная магнитная восприимчивость.

Следующим шагом найдем аналитически выражение для поперечной магнитной восприимчивости рассматриваемого ансамбля в приближении слабой обменной связи между частицами ($\frac{\alpha N}{2} \ll 1$). В данном случае радиальная симметрия относительно оси Z нарушается за счет малого внешнего магнитного поля \vec{h} , выбранного коллинеарным оси X. В качестве основного выступает предположение о том, что данное отклонение незначительно и усреднение 4.12 остается справедливым. Это реализуется тогда, когда межзеренное обменное взаимодействие существенно сильнее внешнего магнитного поля ($h \ll \frac{\alpha N}{2}$), что отвечает постановке задачи.

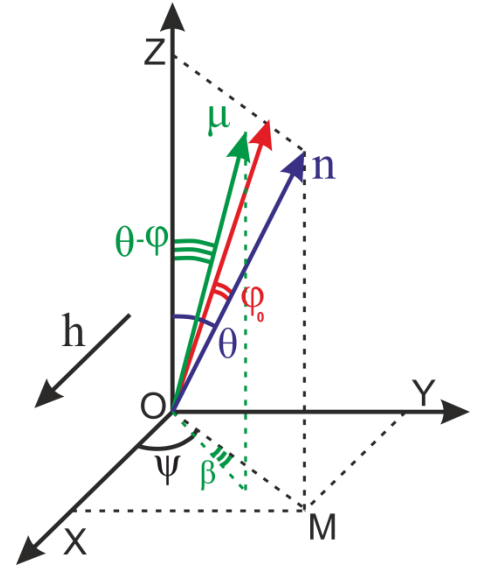


Рисунок 4.7 – Схема взаимной ориентации вектора намагниченности μ , ОЛН n , и малого внешнего магнитного поля h

Для данной задачи в сферической системе координат (рис. 4.7) вектора $\vec{\mu}_i$ и \vec{n}_i произвольно выбранного зерна i можно представить в виде:

$$\begin{aligned} n_{x(i)} &= \sin \theta_i \cdot \cos \psi_i & \mu_{x(i)} &= \sin(\theta_i - \varphi_i) \cdot \cos(\psi_i - \beta_i) \\ n_{y(i)} &= \sin \theta_i \cdot \sin \psi_i & \mu_{y(i)} &= \sin(\theta_i - \varphi_i) \cdot \sin(\psi_i - \beta_i) \\ n_{z(i)} &= \cos \theta_i & \mu_{z(i)} &= \cos(\theta_i - \varphi_i) \end{aligned} \quad (4.20)$$

где φ_i и β_i являются малыми углами отклонения вектора намагниченности $\vec{\mu}_i$ от соответствующих координат ОЛН (θ_i, ψ_i) . Поочередно представим все три слагаемых энергии 4.11 в соответствии с данными сферическими координатами. Энергия анизотропии принимает вид:

$$\begin{aligned} \varepsilon_i^{(A)} &= -(\sin \theta_i \cdot \cos \psi_i \cdot \sin(\theta_i - \varphi_i) \cdot \cos(\psi_i - \beta_i) + \\ &\quad + \sin \theta_i \cdot \sin \psi_i \cdot \sin(\theta_i - \varphi_i) \cdot \sin(\psi_i - \beta_i) + \cos \theta_i \cdot \cos(\theta_i - \varphi_i))^2 = \\ &= -(\sin \theta_i \cdot \sin(\theta_i - \varphi_i) \cdot \cos \beta_i + \cos \theta_i \cdot \cos(\theta_i - \varphi_i))^2 \approx \\ &\approx -(\sin \theta_i \cdot (\sin \theta_i \cos \varphi_i - \cos \theta_i \sin \varphi_i) \cdot (1 - \frac{\beta_i^2}{2}) + \\ &\quad + \cos \theta_i \cdot (\cos \theta_i \cos \varphi_i + \sin \theta_i \sin \varphi_i))^2 \rightarrow \varphi_i^2 + \beta_i^2 \sin^2 \theta_i \end{aligned} \quad (4.21)$$

Теперь энергия Зеемана:

$$\begin{aligned} \varepsilon_i^{(H)} &= -2h \cdot \sin(\theta_i - \varphi_i) \cdot \cos(\psi_i - \beta_i) = \\ &= -2h(\sin \theta_i \cos \psi_i - \varphi_i \cdot \cos \theta_i \cos \psi_i + \beta_i \cdot \sin \theta_i \sin \psi_i) \rightarrow \\ &\rightarrow -2h(\beta_i \cdot \sin \theta_i \sin \psi_i - \varphi_i \cdot \cos \theta_i \cos \psi_i) \end{aligned} \quad (4.22)$$

Как оговаривалось, энергия межзеренного обменного взаимодействия принимается в виде 4.12. Вновь опуская индексы, необходимые лишь для формализации парного взаимодействия, и складывая вместе все три преобразованных вклада (4.21, 4.22, 4.12):

$$\varepsilon = \varphi^2 + \beta^2 \sin^2 \theta - \frac{\alpha N}{2} \varphi \sin \theta - 2h(\beta \cdot \sin \theta \sin \psi - \varphi \cdot \cos \theta \cos \psi) \quad (4.23)$$

Далее вновь необходимо осуществить поиск равновесного положения вектора намагниченности зерна:

$$\begin{cases} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \varphi} = 2\varphi - \frac{\alpha N}{2} \sin \theta - 2h \cos \theta \cos \psi = 0 \\ \frac{\partial \varepsilon}{\partial \beta} = 2\beta \sin^2 \theta - 2h \sin \theta \sin \psi = 0 \end{cases} \quad (4.24)$$

Выполнив простые преобразования системы 4.24 приходим к виду:

$$\begin{cases} \varphi = \frac{\alpha N}{4} \sin \theta + h \cos \theta \cos \psi \\ \beta = h \frac{\sin \psi}{\sin \theta} \end{cases} \quad (4.25)$$

После этого становится возможным вычисление поперечной магнитной восприимчивости рассматриваемого произвольного зерна i :

$$\begin{aligned} \chi_{\perp}(\theta) &= \frac{3}{2} \chi_0 \left. \frac{d\mu_x}{dh} \right|_{h=0} = \frac{3}{2} \chi_0 \left. \frac{d(\sin(\theta - \varphi) \cdot \cos(\psi - \beta))}{dh} \right|_{h=0} = \\ &= \frac{3}{2} \chi_0 \left[\left. \frac{\partial(\sin(\theta - \varphi) \cdot \cos(\psi - \beta))}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial h} \right|_{h=0} + \left. \frac{\partial(\sin(\theta - \varphi) \cdot \cos(\psi - \beta))}{\partial \beta} \frac{\partial \beta}{\partial h} \right|_{h=0} \right] = \\ &= \frac{3}{2} \chi_0 \left[\cos(\theta - \varphi_0) \cos \psi \cdot \left. \frac{\partial \varphi}{\partial h} \right|_{h=0} - \sin(\theta - \varphi_0) \sin \psi \cdot \left. \frac{\partial \beta}{\partial h} \right|_{h=0} \right] \approx \\ &\approx \frac{3}{2} \chi_0 \left[(\cos \theta + \varphi_0 \sin \theta) \cos \theta \cos^2 \psi - (\sin \theta - \varphi_0 \cos \theta) \frac{\sin^2 \psi}{\sin \theta} \right] = \\ &= \frac{3}{2} \chi_0 \left[\left(\cos \theta + \frac{\alpha N}{4} \sin^2 \theta \right) \cos \theta \cos^2 \psi - \left(1 - \frac{\alpha N}{4} \cos \theta \right) \sin^2 \psi \right] \end{aligned} \quad (4.26)$$

Как и ранее, следующим этапом вывода является вычисление поперечной магнитной восприимчивости ансамбля с учетом изотропного распределения осей легкого намагничивания и плоскости симметрии XOZ задачи:

$$\begin{aligned} \chi_{\perp} &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \chi_{\perp}(\theta) \sin \theta d\psi d\theta = \\ &= \frac{3\chi_0}{\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \left[\left(\cos \theta + \frac{\alpha N}{4} \sin^2 \theta \right) \cos \theta \cos^2 \psi - \left(1 - \frac{\alpha N}{4} \cos \theta \right) \sin^2 \psi \right] \sin \theta d\psi d\theta = \end{aligned}$$

$$= \frac{3}{2} \chi_0 \int_0^{\frac{\pi}{2}} \left[\cos^2 \theta \sin \theta + \frac{\alpha N}{4} \cos \theta \sin^3 \theta - \sin \theta + \frac{\alpha N}{4} \cos \theta \sin \theta \right] d\theta = \chi_0 \left(1 + \frac{9}{32} \alpha N \right)$$

$$\boxed{\chi_{\perp} = \chi_0 \left(1 + \frac{9}{32} \alpha N \right)} \quad (4.27)$$

Полученная с применением теории возмущений зависимость 4.27 между поперечной магнитной восприимчивостью и параметром взаимодействия α изотропного ансамбля однодоменных одноосных частиц в приближении слабой обменной связи также до этого нигде не встречалась в научной литературе. Как и в предыдущем случае, в отсутствие взаимодействия $\chi_{\perp} = \chi_0$. С увеличением параметра взаимодействия значение поперечной магнитной восприимчивости растет в соответствии с линейным законом 4.27.

Следствия. На основе выведенных формул 4.19 и 4.27 может быть сформулирована экспериментальная методика определения микроскопических параметров нанокристаллических изотропных образцов, удовлетворяющих приближению слабой обменной связи между их одноосными зернами. В этих целях необходимо измерить четыре физических величины: спонтанную намагниченность M_s (например, определив ее из асимптотического закона приближения намагниченности к насыщению), характерный размер зерен (из микроструктурных исследований), поперечную χ_{\perp} и продольную χ_{\parallel} магнитную восприимчивость в состоянии остаточной намагниченности. Складывая и вычитая с определенными коэффициентами значения двух последних величин, получаем следующую систему:

$$\begin{cases} \chi_{\perp} - \chi_{\parallel} = \frac{3}{8} \chi_0 \alpha N \\ \chi_{\perp} + 3\chi_{\parallel} = 4\chi_0 \end{cases} \quad (4.28)$$

Подставим выражения для параметра взаимодействия $\alpha = \frac{J_{IEI} S}{KV}$ и магнитной восприимчивости невзаимодействующего изотропного ансамбля одноосных зерен $\chi_0 = \frac{M_s^2}{3K}$, а также положим описание поликристаллического образца, как плотноупакованной структуры зерен (рис. 3.1: $N = 12$, $\alpha = \frac{J_{IEI}}{2dK}$). Таким образом, приходим к виду:

$$\begin{cases} \frac{J_{IEI} M_s^2}{dK^2} = \frac{4(\chi_{\perp} - \chi_{\parallel})}{3} \\ \frac{M_s^2}{K} = \frac{3(\chi_{\perp} + 3\chi_{\parallel})}{4} \end{cases} \quad (4.29)$$

Из данной системы можно выразить входящие в нее микроскопические константы, получив искомые выражения:

$$J_{IEI} = \frac{64M_s^2 d(\chi_{\perp} - \chi_{\parallel})}{27(\chi_{\perp} + 3\chi_{\parallel})^2} \quad (4.30)$$

$$K = \frac{4M_s^2}{3(\chi_{\perp} + 3\chi_{\parallel})} \quad (4.31)$$

Формула 4.30 позволяет на основе относительно простых измерений определять константу межзеренного обменного взаимодействия нанокристаллических образцов. Оговорим при этом основные требования к постановке эксперимента и образцам:

1. кристаллиты исследуемого образца должны находиться в однодоменном состоянии, что обеспечивает процесс намагничивания и перемагничивания за счет когерентного вращения векторов намагниченности (ограничение на размер);
2. магнитная анизотропия зерен должна соответствовать одноосному типу, при этом требуется изотропное распределение ОЛН зерен образца;
3. параметры образца должны удовлетворять приближению слабой обменной связи между его зернами: $\frac{3J_{IEI}}{dK} \ll 1$.

Большинство современным изотропных постоянных магнитов удовлетворяют перечисленным требованиям, что наделяет данный метод определения межзеренного обменного взаимодействия универсальностью для класса высокоанизотропных соединений.

Формула 4.31 способна провести оценку эффективной константы одноосной магнитной анизотропии нанокристаллических изотропных постоянных магнитов. Извлекаемая из формулы величина будет включать в себя как магнитокристаллическую анизотропию, так и вклад от поверхностной анизотропии зерен. Таким образом, методика измерения продольной и поперечной магнитной восприимчивости в состоянии остаточной намагниченности может служить новым независимым инструментом для исследования эффекта Нееля. Также существенным преимуществом данного метода выступает слабое влияние структурных дефектов зерен на результаты эксперимента. В сравнение, методика измерения полевых зависимостей поперечной магнитной восприимчивости (глава 1.3.2) или определение поля анизотропии из максимума производной кривой намагничивания (SPD – singular point detection) будут давать сильно заниженные оценки эффективной константы одноосной магнитной анизотропии за счет парадокса Брауна, то есть именно влияния структурных дефектов зерен.

Зависимости χ_{\parallel} и χ_{\perp} от магнитного состояния ансамбля. Ранее подробно были описаны продольная и поперечная магнитные восприимчивости изотропного ансамбля обменносвязанных зерен в состоянии остаточной намагниченности. На основе кривых возврата (рис. 1.9) можно внешним магнитным полем последовательно менять состояние остаточной намагниченности ансамбля и провести исследование соответствующих полевых зависимостей $\chi_{\parallel}(h)$ и $\chi_{\perp}(h)$. Применение аналитических выкладок для их анализа становится затруднительным, поэтому выполним его на основе компьютерного эксперимента. В ходе его постановки выяснилось, что для получения достоверных результатов требуется повышенная точность расчетов, а также использование ансамблей из большого числа взаимодействующих зерен. Последнее необходимо для снижения до приемлемой систематической погрешности отдельно взятого ансамбля, связанной с нестрогим соответствием изотропному распределению ОЛН в силу конечности числа элементов. Таким образом, был выполнен расчет с использованием GPU ансамбля из 262.144 зерен ($64 \times 64 \times 64$) при следующих значениях микроскопических констант ($T = 200$ K): спонтанная намагниченность $M_s = 1375$ Гс; константы магнитокристаллической анизотропии (выражение 1.24) $K_1 = 44.8$ Мэрг/см³, $K_2 = 42.3$ Мэрг/см³, $K_3 = -9.9$ Мэрг/см³, $K'_2 = 10.9$ Мэрг/см³, $K'_3 = -10.1$ Мэрг/см³; характерный размер зерен $d = 25$ нм и константа межзеренного обменного взаимодействия в одном случае была равно нулю (невзаимодействующий ансамбль), а во втором $J_{IEI} = 5$ эрг/см². Результаты расчета представлены на рисунке 4.8.

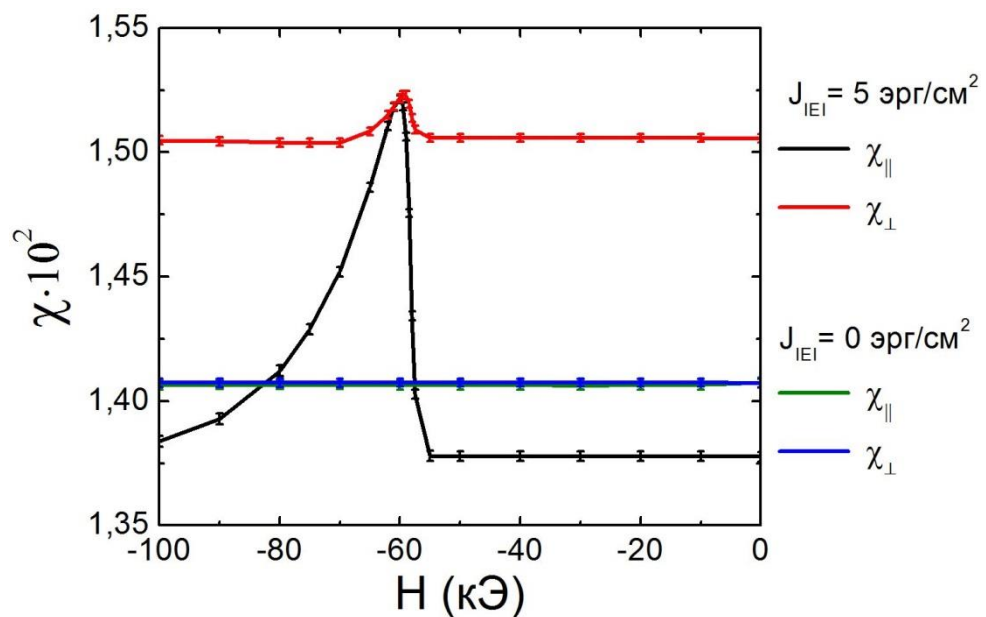


Рисунок 4.8 – Зависимости продольной и поперечной магнитной восприимчивости изотропного ансамбля однодоменных зерен от его магнитного состояния в условия наличия/отсутствия межзеренного обменного взаимодействия

Отметим, что в отсутствие взаимодействия между зёрнами продольная и поперечная магнитная восприимчивости совпадают в пределах погрешности и не зависят от магнитного состояния ансамбля зёрен (синяя и зеленая кривые на рис. 4.8), что соответствует представлениям главы 4.1. Именно достижение данного результата и являлось «репером», для определения необходимого числа частиц ансамбля и точности вычисления.

Расчет был выполнен раньше, чем были получены формулы 4.30 и 4.31, поэтому использовался полный набор констант магнитной анизотропии. Тем не менее, выполним оценочный анализ восприимчивостей в состоянии

	ТР	РР
$\chi_0 \cdot 10^2$	1.406	1.407 ± 0.002
$\chi_{\perp}(0) 10^2$	1.516	1.506 ± 0.002
$\chi_{\parallel}(0) 10^2$	1.369	1.378 ± 0.002

Таблица 4.2 – Сравнение теоретических и расчетных результатов для магнитной восприимчивости невзаимодействующего ансамбля и магнитных восприимчивостей взаимодействующего в состоянии остаточной намагниченности

остаточной намагниченности ($H = 0$ кЭ) с использованием указанных микроскопических констант, ограничившись лишь K_1 для магнитной анизотропии. Теоретические результат (ТР) и результаты расчетов (РР) представлены в таблице 4.2. Из нее видно, что в пределах погрешности магнитная восприимчивость невзаимодействующего ансамбля соответствует предсказываемому значению. Соответствующие восприимчивости для взаимодействующего ансамбля в состоянии остаточной намагниченности не укладываются в пределы погрешности, но незначительно. Это скорее всего связано с использованием полного набора констант магнитной анизотропии.

При внешних магнитных полях меньше коэрцитивной силы процесс перемагничивания взаимодействующего ансамбля происходит обратимо, поэтому кривые возврата формируют одно и то же состояние остаточной намагниченности. В виду этого продольная и поперечная магнитные восприимчивости не претерпевают изменений. При достижении внешних магнитных полей, соответствующих началу необратимого перемагничивания наблюдается рост соответствующих восприимчивостей с достижением

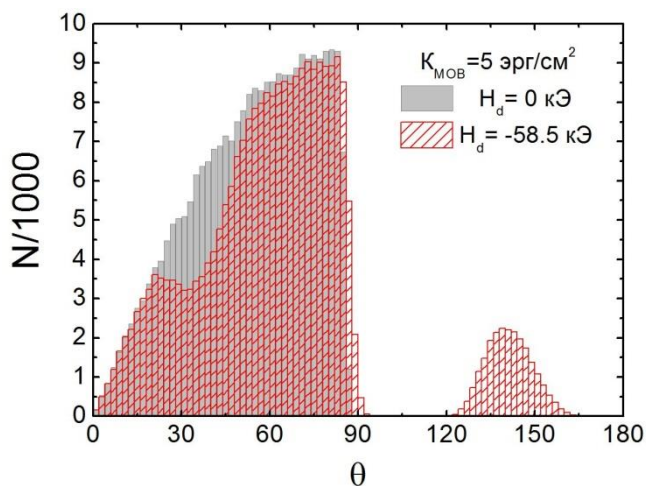


Рисунок 4.9 – Сравнение распределения зенитных углов магнитных моментов ансамбля (относительно вектора остаточной намагниченности) в состоянии остаточной намагниченности и в состоянии, соответствующем полю размагничивания 58.5 кЭ

максимального значения, равного в пределах погрешности для обеих восприимчивостей. Пик продольной и поперечной магнитных восприимчивостей соответствует релаксационной

коэрцитивной силе. Для анализа магнитного состояния, сформированного за счет необратимых процессов перемангничивания, иллюстративны распределения зенитных углов векторов намагниченности ансамбля (рис. 4.9).

По мере увеличения внешнего магнитного поля, соответствующее ему магнитное состояние все больше приближается к исходной конфигурации, но сформированной в интервале углов $[90^\circ; 180^\circ]$. Данный процесс сопровождается постепенным понижением продольной и поперечной магнитных восприимчивостей ансамбля до величины таковой в состоянии остаточной намагниченности.

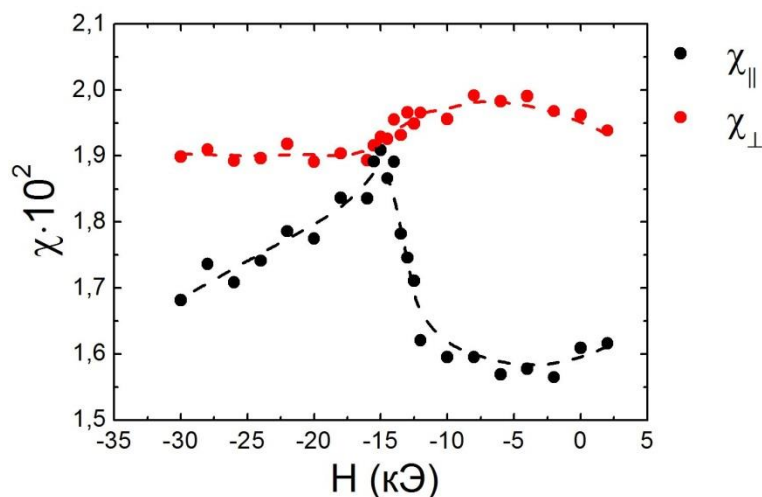


Рисунок 4.10 – экспериментальные зависимости продольной и поперечной магнитной восприимчивости образца MQP-B при $T=200\text{ K}$

На рисунке 4.10 представлены зависимости продольной и поперечной магнитной восприимчивости от размагничивающего поля быстрозакаленного сплава MQP-B при $T = 200\text{ K}$. Измерения проведены с применением опции горизонтальный ротатор магнитоизмерительного комплекса MPMS-XL-7 ЕС на основе СКВИДа. Для минимизации магнитного вклада от площадки ротатора в результате измерений магнитного момента и магнитной восприимчивости образца, вращение площадки осуществляется перекинутой через блок проволокой, имеющей низкий коэффициент термического расширения. Такой механизм не позволяет передавать большой вращательный момент и при перемангничивании остаточного намагниченного образца, имеющего большое значение коэрцитивной силы, последний может быть развернут моментом силы Зеемана. По этой причине масса образца при измерениях на горизонтальном ротаторе не превышала 1,5 мг и образец располагался максимально близко к оси вращения площадки для уменьшения величины вращающего момента при перемангничивании и потокоцепления образца и подводящих проводов градиентометра. Из графика 4.10 видно качественное соответствие экспериментальных данных результатам компьютерного моделирования. Для какого-либо анализа количественного соответствия необходимо снизить погрешность измерения.

4.2.3 Графики Хенкеля и $\delta m(H)$

Углубляя анализ микроскопических параметров обменносвязанных систем на основе их магнитных гистерезисных свойств, применим построения графиков Хенкеля и $\delta m(H)$ к модельному изотропному ансамблю однодоменных зерен $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ в приближении слабой обменной связи между ними. Был выполнен расчет кривых возврата (рис. 1.9 является примером), и на их основе построены полевые зависимости приведенных остаточных намагниченностей $m_r(h)$ и $m_d(h)$ при варьировании параметра взаимодействия в пределах ряда $\alpha = \{0.01, 0.014, 0.018, 0.022, 0.026, 0.03\}$ для ансамбля из 16,000 частиц (для варьирования был выбран скорректированный ранее (глава 4.2.1) ряд расстояний между центрами зерен $d = \{51.0, 36.4, 28.3, 23.2, 19.6, 17.0 \text{ | нм}\}$). Приведенная остаточная намагниченность здесь обозначается как m_r для того, чтобы подчеркнуть ее зависимость от магнитного состояния, сформированного внешним магнитным полем h – используемое ранее обозначение μ_r является приведенной остаточной намагниченностью предельной петли магнитного гистерезиса, то есть при $h \rightarrow \infty$. Полевые зависимости $m_r(h)$ и $m_d(h)$ представлены на рисунке 4.11. Как видно из графиков увеличение параметра взаимодействия приводит к более интенсивному смещению кривой приведенной изотермической остаточной намагниченности в область меньших полей по сравнению с приведенной остаточной намагниченности перемагничивания. Эта асимметрия приводит к формированию положительного пика в соответствии с формулой 1.21: $\delta m(h) = m_d(h) - [1 - 2m_r(h)]$.

Также, выполнив построение кривых Хенкеля $m_d(m_r)$ (рис. 4.12, а), отметим характерное смещение зависимостей в область больших значений относительно линейного закона 1.20. При этом, чем больше параметр взаимодействия – тем больше смещение, которое в пределе стремится к кривой, обозначенной синей линией. Именно эти закономерности лежат в основе использования графиков Хенкеля для качественного анализа взаимодействий в нанокристаллических системах, в частности, для определения наличия межзеренного обменного взаимодействия.

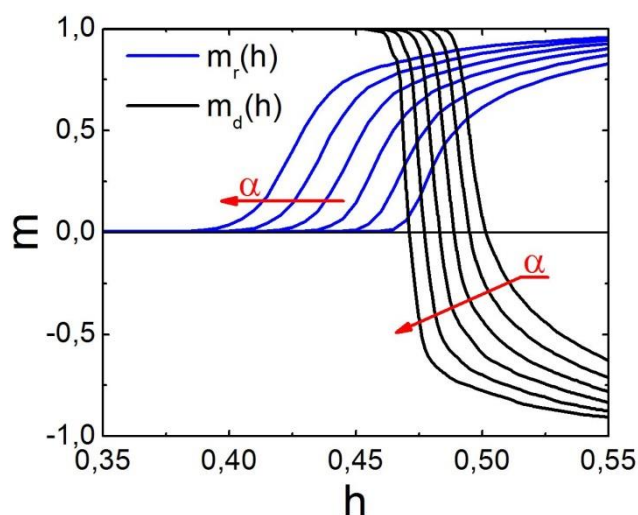


Рисунок 4.11 – Полевые зависимости приведенных остаточных намагниченностей $m_r(h)$ и $m_d(h)$ при варьировании параметра взаимодействия в пределах ряда $\alpha = \{0.01, 0.014, 0.018, 0.022, 0.026, 0.03\}$, стрелкой обозначено направление возрастания параметра взаимодействия среди серии кривых

Для количественного описания отклонений полевых зависимостей приведенных остаточных намагниченностей $m_r(h)$ и $m_d(h)$ изотропной обменносвязанной системы частиц от таковых для ансамбля Стонера-Вольфарта воспользуемся видом графиков $\delta m(h)$ (рис. 4.12, б). Все зависимости $\delta m(h)$ на рисунке демонстрируют положительный пик, максимальное значение которого возрастает с увеличением параметра взаимодействия. При этом соответствующие экстремумам внешние магнитные поля уменьшаются, начиная со значения магнитного поля $0.5H_a$, по закону, близкому к линейному.

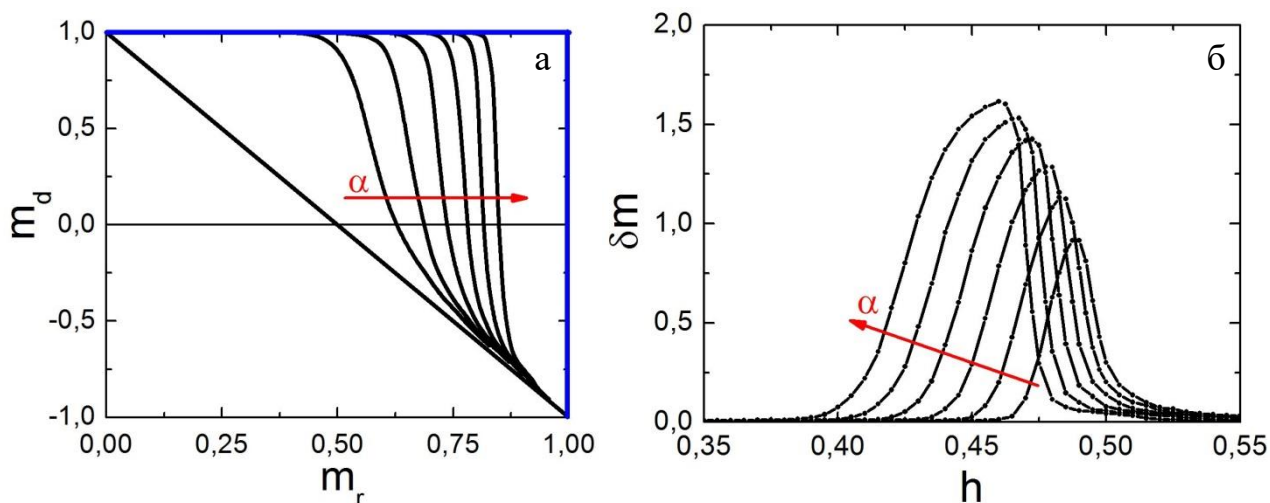


Рисунок 4.12 – (а) Зависимости Хенкеля модельного изотропного ансамбля обменносвязанных однодоменных зерен, и (б) соответствующие им кривые $\delta m(h)$; стрелкой обозначено направление возрастания параметра взаимодействия среди серии кривых в пределах ряда $\alpha = \{0.01, 0.014, 0.018, 0.022, 0.026, 0.03\}$

Для формирования количественных оценок, проанализируем зависимость максимума $\delta m(h)$ от параметра взаимодействия. В отсутствие взаимодействия данная величина должна равняться строго нулю, то есть зависимость должна проходить через точку $(0,0)$. Также в виду приближения слабой обменной связи можно предположить линейную зависимость пика $\delta m(h)$ от параметра взаимодействия, которое выступает в качестве слабого возмущения. На рисунке 4.13, а представлена соответствующая расчетная зависимость. Несмотря на то, что ряд значений параметра взаимодействия отвечает приближению слабой обменной связи (верифицировано на зависимостях магнитной восприимчивости и остаточной намагниченности μ_r от параметра α) линейная зависимость не наблюдается. Ее можно ожидать при дальнейшем уменьшении параметра взаимодействия, но тогда соответствующий характерный размер зерен выйдет за пределы абсолютной однодоменности, что уже не будет соответствовать модели. Поэтому учтем еще одну особенность: для зависимости $\delta m(h)$ от параметра взаимодействия должна существовать асимптота, равная 2. Последнее напрямую следует из подстановки предельного вида графика Хенкеля (рис. 4.12, а – синяя линия) в формулу 1.21 и соответствует уже приближению сильной обменной связи.

Простейшим законом, удовлетворяющим проведенным выше выкладкам, является экспоненциальное выражение:

$$\max(\delta m) = 2 \cdot [1 - e^{-A \cdot \alpha N}] \quad (4.32)$$

где A – численный безразмерный коэффициент. Данный коэффициент не зависит от физических свойств модельной системы, все они заложены в параметр взаимодействия $\alpha = \frac{J_{IEI}S}{KV}$ и только через него влияют на значение максимума $\delta m(h)$. Последнее утверждение было проверено на основе компьютерного эксперимента при последовательном варьировании, помимо характерного размера зерен, константы межзеренного обменного взаимодействия и константы одноосной магнитной анизотропии.

Зависимость $\delta m_{max}(h)$, перестроенная в соответствии с закону 4.32 координаты, представлена на рисунке 4.13, б. Наблюдается очень хорошее соответствие расчетных результатов предложенной формуле. Линейная аппроксимация дает следующую оценку введенного коэффициента пропорциональности: $A = 4.31 \pm 0.03$. При этом имеется незначительное смещение прямой относительно нуля (менее 0.01), которое предположительно обусловлено систематической погрешностью, связанной с конечным числом элементов ансамбля (упоминалась ранее в главе 4.2.1).

Таким образом, в качестве итоговой формулы, которая может обеспечить количественный анализ микроскопических параметров системы однодоменных зерен с изотропным распределением осей легкого намагничивания, выступает следующее выражение:

$$\max(\delta m) = 2 \cdot \left[1 - e^{-\frac{13}{3} \alpha N} \right], \quad 3D \quad (4.33)$$

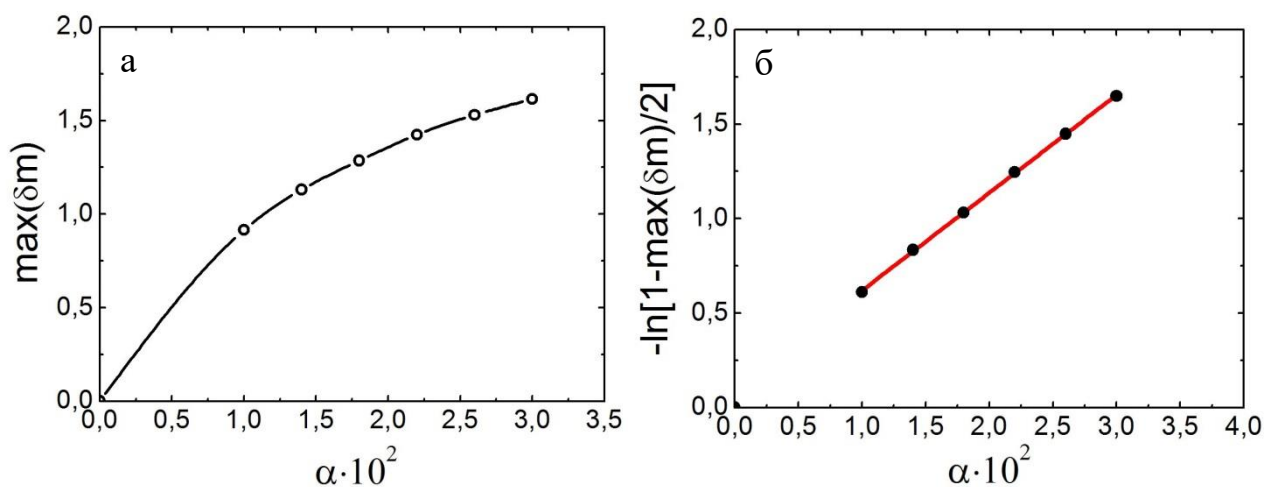


Рисунок 4.13 – (а) Зависимость максимального значения $\delta m(h)$ от параметра взаимодействия; (б) та же зависимость, но перестроенная в соответствии с формулой 4.32

В главе 1.3.1 был выполнен подробный обзор современного состояния использования методики графиков Хенкеля и $\delta m(h)$ для анализа взаимодействующих нанокристаллических систем. Было отмечено, что количественные оценки выполнялись лишь на основе компьютерного моделирования, какие-либо формулы, связывающие характерные значения графиков $\delta m(h)$ с микроскопическими параметрами, в этих целях не предлагались ранее. Тем не менее, вернемся к основным результатам работы Neu V. с соавторами, представленными в соответствующей

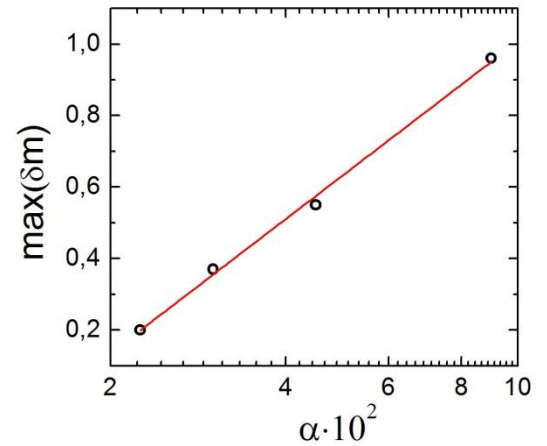


Рисунок 4.14 – Зависимость максимального значения $\delta m(h)$ от параметра взаимодействия в логарифмических координатах [42]

главе на рисунке 1.12. Из рисунка можно извлечь максимальные значения $\delta m(h)$ и, используя выбранные авторами микроскопические параметры ($M_S = 1400$ Гс, $J_{IEI} = 9$ эрг/см², $K_u = 50$ Мэрг/см³ [42]), сопоставить их параметрам взаимодействия (рис. 4.14). Видно, что в логарифмическом масштабе наблюдается линейная зависимость между ними. Прямое сопоставление формуле 4.33 на основе данной работы выполнить невозможно, так как авторами закладывалась немного отличная модель взаимодействующих зерен (предполагалась неоднородность намагниченности зерен вследствие обменного взаимодействия спинов в области их контакта друг другом, по порядку равная ширине доменной стенки Блоха), а также было выбрано текстурированное распределение ОЛН. Тем не менее эта работа может выступать в качестве независимого аргумента в пользу экспоненциального вида закона 4.33.

Двумерный ансамбль зерен. Отдельный интерес представляют вычисления кривых $\delta m(h)$ для двумерных ансамблей. Ограничение вращения векторов намагниченности лишь плоскостью приводит к качественному различию данных зависимостей в сравнении с таковыми трехмерного случая. А именно, отсутствуют пересечения кривых при увеличении параметра взаимодействия (рис. 4.15). Был также выполнен анализ зависимости максимальных значений $\delta m(h)$ от параметра взаимодействия в соответствии с формулой 4.32. Результаты аппроксимации линейным законом в перестроенных координатах представлены на вставке рисунка 4.15. В двумерном случае безразмерный коэффициент равняется $A = 1.98 \pm 0.02$, но при этом наблюдается большее смещение линии относительно нуля. Таким образом, для двумерного случая зависимость принимает вид:

$$\max(\delta m) = 2 \cdot [1 - e^{-2\alpha N}], \quad 2D \quad (4.34)$$

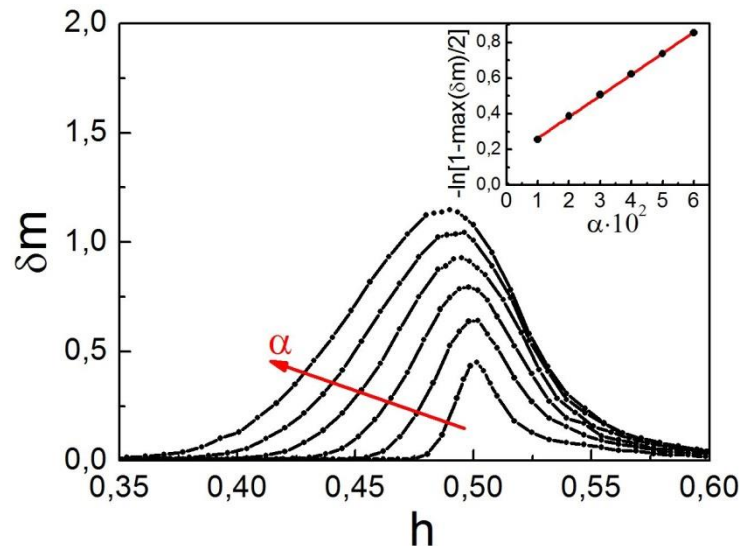


Рисунок 4.15 – Кривые $\delta m(h)$ двумерного ансамбля зерен; стрелкой обозначено направление возрастания параметра взаимодействия среди серии кривых в пределах ряда $\alpha = \{0.01, 0.02, 0.03, 0.04, 0.05, 0.06\}$; на вставке зависимость максимального значения $\delta m(h)$ от параметра взаимодействия в перестроенных координатах в соответствии с формулой 4.32

4.2.4 Температурные зависимости остаточной намагниченности

Ранее в главе 4.1 были получены формулы 4.7-4.9, описывающие температурные зависимости приведенной остаточной намагниченности $\mu_r(T)$ изотропного ансамбля однодоменных частиц в различных случаях. В качестве следующего шага, рассмотрим зависимости $\mu_r(T)$ для обменносвязанной системы частиц. Соответствующие графики были вычислены для характерного размера зерен $d = 25$ нм при трех значениях константы межзеренного обменного взаимодействия: $J_{IEI} = \{5, 10, 15\}$ эрг/см². Параметр взаимодействия α не вводится, так как магнитная анизотропия отлична от одноосной, а характеризующие ее константы меняются с изменением температуры в процессе расчета (рис. 3.2). При каждом значении константы J_{IEI} температурные зависимости приведенной остаточной намагниченности вычислялись при внешнем магнитном поле, проходящем ряд значений (0 ÷ 15) кЭ с шагом в 1 кЭ. При этом его ориентация задвалась противоположно направленной вектору остаточной намагниченности ансамбля. Результаты данных вычислений представлены на рисунке 4.16 а-в.

В первую очередь проанализируем вид температурных зависимостей $\mu_r(T)$ в отсутствие внешнего магнитного поля (соответствующие кривые обозначены на рисунке 4.16 зелеными линиями). При температуре T_{sr} для отдельно взятого зерна происходит выбор одной из четырех ориентации в базисной плоскости. В отсутствие взаимодействия выбор носит случайный характер, но при наличии межзеренного обменного взаимодействия минимальную энергию будет иметь та ориентация, что ближе к направлению остаточной намагниченности ансамбля.

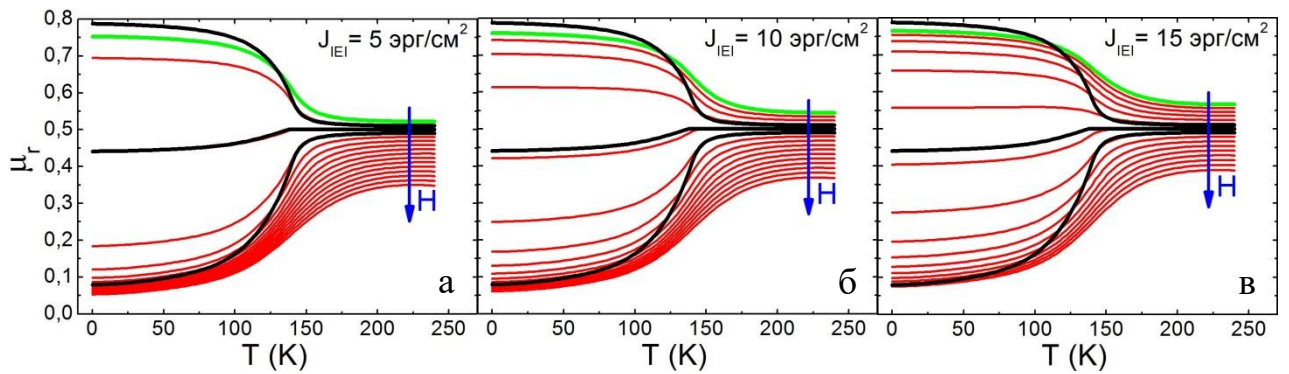


Рисунок 4.16 – Температурные зависимости приведенной остаточной намагниченности изотропного ансамбля обменносвязанных однодоменных частиц при константе межзеренного обменного взаимодействия: (а) $J_{IEI} = 5$ эрг/см², (б) $J_{IEI} = 10$ эрг/см², (в) $J_{IEI} = 15$ эрг/см²; красными кривыми обозначены результаты вычислений при внешнем магнитном поле, принимающем ряд значений (1 ÷ 15) кЭ с шагом в 1 кЭ, среди серии кривых направление возрастания магнитного поля в пределах ряда обозначено синей стрелкой; зеленым обозначены кривые приведенной остаточной намагниченности в отсутствие внешнего магнитного поля

На качественном уровне механизм схож с тем, что описан в главе 4.1 для случая положительного бесконечно малого внешнего магнитного поля (красный сектор рисунка 4.2), однако при этом в базисной плоскости формируется отличное от равномерного распределение, которое зависит от зенитного угла ОЛН θ . В подтверждение этому служит рисунок 4.17, на котором представлена усредненная по всем зенитным углам плотность распределения угла ψ проекций вектора намагниченности на базисную плоскость зерна, а также равномерное распределение в случае малого положительного магнитного поля $\delta\vec{H}$ для невзаимодействующего ансамбля зерен. Из рисунка видно, что значение константы межзеренного обменного взаимодействия практически не влияет на вид распределения, важен лишь факт парного взаимодействия для его формирования. В частности этим объясняются схожие зависимости приведенной остаточной намагниченности в отсутствие внешних магнитных полей при низких температурах (рис. 4.16, зеленые линии). По всей видимости, точный вид распределения $\rho(\psi)$ может быть установлен аналитически на основе решения задачи поиска равновесного положения векторов намагниченности при температуре T_{sr} .

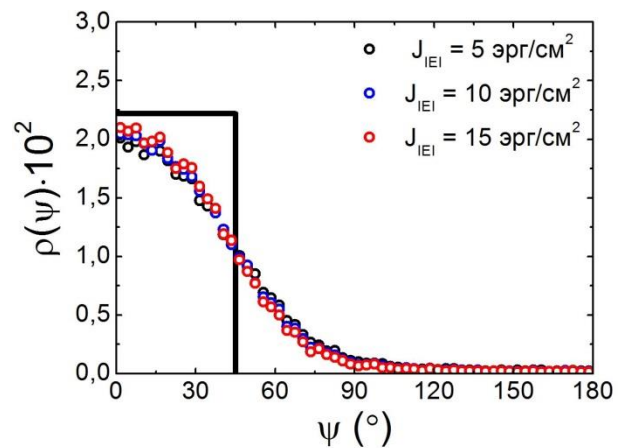


Рисунок 4.17 – Усредненные плотности распределения угла ψ проекций векторов намагниченности на базисную плоскость при различных константах межзеренного обменного взаимодействия J_{IEI} ; черной линией обозначено соответствующее равномерное распределение для невзаимодействующего ансамбля в бесконечно слабом положительном внешнем магнитном поле

На рисунке 4.16 красные кривые демонстрируют зависимость приведенной остаточной намагниченности уже в присутствии внешнего магнитного поля, направленного противоположно вектору остаточной намагниченности. Подобные вычисления преследуют идею, сформулированную в работе [52], согласно которой внешнее магнитное поле в такой конфигурации конкурирует с межзеренным обменным взаимодействием в формировании распределения в базисной плоскости. При определенных значениях внешнего магнитного поля вклады становятся равнозначными и вид температурной кривой приведенной остаточной намагниченности, предполагается, будет соответствовать таковой для невзаимодействующего ансамбля зерен при бесконечно малом отрицательном внешнем магнитном поле («реперная» кривая). Именно для верификации данной идеи и был поставлен компьютерный эксперимент (рис. 4.16 а-в). Для детального анализа результатов были построены при низких температурах (формально при $T = 0$ К; чем ниже температура – тем больше константы анизотропии и меньше отклонения векторов намагниченности от поверхности КОЛН) зависимости приведенной остаточной намагниченности, энергии Зеемана и энергии межзеренного обменного взаимодействия, а также их сумма в зависимости от величины приложенного внешнего магнитного поля. Результаты для двух значений константы межзеренного обменного взаимодействия представлены на рисунке 4.18 а, б.

Для ансамбля со значением константы $J_{IEI} = 5$ эрг/см² при внешнем магнитном поле 5 кЭ энергия межзеренного обменного взаимодействия сравнивается с энергией Зеемана, при этом практически реализуется совпадение с «реперной» кривой (рис. 4.16, а). Тем не менее, строго формульного соответствия между энергиями установить не удастся: коэффициенты пропорциональности между ними зависят от вида функций распределения, а те в свою очередь, сохраняют свой сложный характер при данном внешнем магнитном поле.

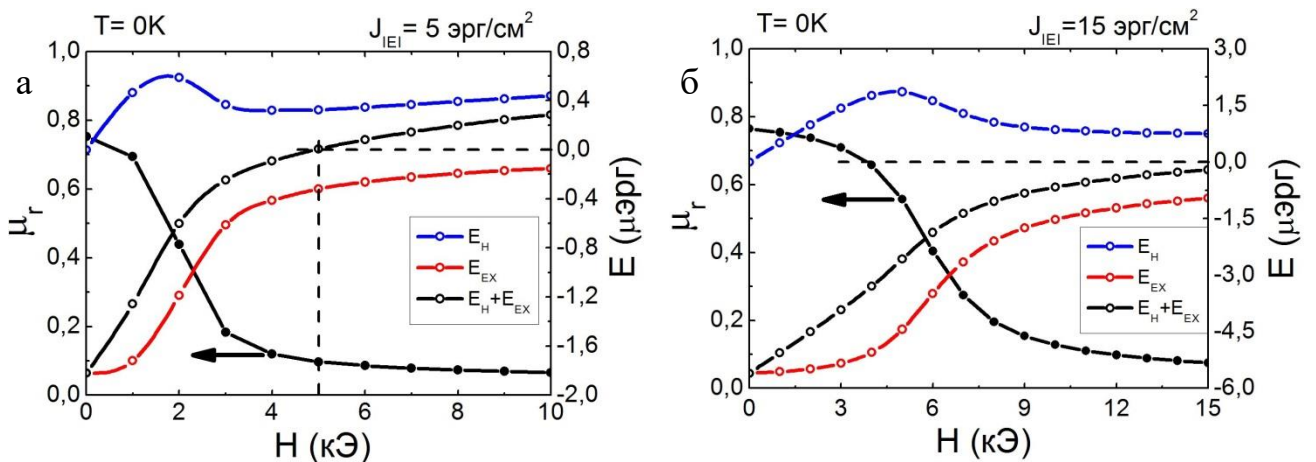


Рисунок 4.18 – Зависимости приведенной остаточной намагниченности μ_r , энергии Зеемана E_H и энергии межзеренного обменного взаимодействия E_{EX} , а также их сумма в зависимости от величины приложенного внешнего магнитного поля H при константах межзеренного обменного взаимодействия (а) $J_{IEI} = 5$ эрг/см² и (б) $J_{IEI} = 15$ эрг/см²

Для ансамбля со значением константы $J_{IEI} = 15$ эрг/см² равенства энергии Зеемана и энергии межзеренного обменного взаимодействия не наблюдается (рис. 4.18 б), хотя температурные кривые при определенных значениях внешнего магнитного поля достигают «реперной» кривой. Однако при этом значения внешних магнитных полей довольно большие (сравнительно с полем анизотропии при $T = 240$ К) – есть отклонения от поверхности КОЛН, а также параметры ансамбля уже не удовлетворяют приближению слабой обменной связи.

Также возможна модификация постановки задачи – можно рассматривать температурные зависимости приведенной намагниченности при терморазмагниченном начальном состоянии ансамбля (рис. 4.19). В отсутствие внешних магнитных полей зависимость строго соответствует нулю как в случае невзаимодействующих зерен, так и взаимодействующих. Слабое положительное внешнее магнитное поле (1 кЭ) приводит к положительным отклонениям, которые тем интенсивнее, чем меньше константа межзеренного обменного взаимодействия. Отрицательное внешнее магнитное поле приводит к симметричной в области отрицательных значений ситуации. Преимущество подобной постановки эксперимента – указанная выше симметрия и использование малых внешних магнитных полей.

В качестве рекомендации для дальнейшего развития метода может выступать определение на основе аналитических выкладок распределения, соответствующего рисунку 4.17. Во-первых, это также позволит определить соответствующие распределения и в слабых магнитных полях (следовательно, и сами температурные зависимости приведенной остаточной намагниченности), во-вторых, корректно прогнозировать значения различных вкладов энергии ансамбля, что позволит сопоставлять последние. Все это поможет создать математическое описание методу определения константы межзеренного обменного взаимодействия на основе измерений температурных зависимостей остаточной намагниченности в слабых отрицательных внешних магнитных полях.

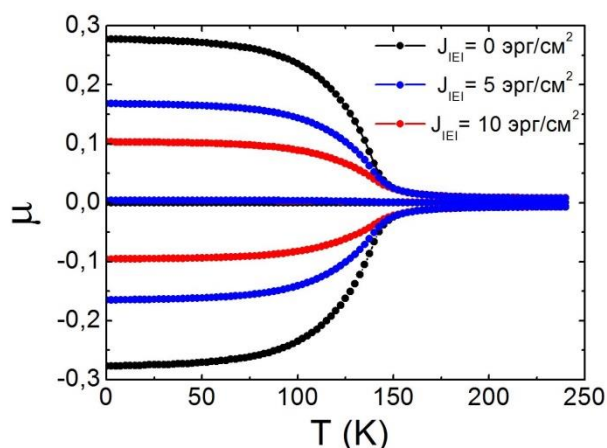


Рисунок 4.19 – Температурные зависимости приведенной намагниченности ансамбля невзаимодействующих зерен, а также в случаях их взаимодействия при константах межзеренного обменного взаимодействия $J_{IEI} = 5$ эрг/см² и б) $J_{IEI} = 10$ эрг/см²

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Подводя итог проделанной в рамках магистерской диссертации работы можно в первую очередь выделить создание серии компьютерных программ в среде MATLAB, позволяющих моделировать и анализировать предельные и частные петли магнитного гистерезиса для однофазных и многофазных ансамблей с различными типами магнитной анизотропии, упорядочением фаз, спецификацией взаимодействия между ними, а также при параметрической зависимости микроскопических констант от температуры. Все это реализовано в рамках модели однодоменных нанокристаллитов, имеющих однородную намагниченность, процесс изменения которой осуществляются за счет когерентного вращения. Разработаны алгоритмы параллельного расчета, позволяющие основные арифметические и логически операции выполнять на графических ускорителях. Последнее является приоритетным направлением развития современной вычислительной физики. Вычислительная сложность алгоритма $O(\log(N))$, что существенно снижает машинное время расчета для ансамблей большого размера и позволяет анализировать сложные структуры и интерфейсы зерен, состоящие из миллионов частиц, с обеспечением необходимого уровня статистики и точности.

В приближении слабой обменной связи впервые аналитически установлены выражения 4.19 и 4.27 для продольной и поперечной магнитной восприимчивости изотропного взаимодействующего ансамбля в состоянии остаточной намагниченности. На их основе разработана экспериментальная методика определения константы межзеренного обменного взаимодействия (выражение 4.30) и эффективной константы одноосной магнитной анизотропии (выражение 4.31) изотропных нанокристаллических постоянных магнитов. Отличительные особенности данной методики – простая и экспрессная постановка эксперимента, независимость его результатов от структурных дефектов внутри зерен. На основе компьютерного эксперимента полученные соотношения верифицированы, а также получены зависимости соответствующих восприимчивостей от магнитного состояния ансамбля. Показан рост продольной и поперечной магнитной восприимчивости для состояний остаточной намагниченности, сформированными отрицательными внешними магнитными полями, соответствующими необратимому процессу перемагничивания ансамбля. Равенство продольной и поперечной магнитной восприимчивости достигается при релаксационной коэрцитивной силе. Показано качественное соответствие полученных численных результатов соответствующим экспериментальным данным.

Выполнен количественный анализ кривых $\delta m(H)$ изотропного ансамбля однодоменных одноосных зерен в приближении слабой обменной связи между ними. Впервые установлены выражения 4.33 и 4.34, связывающее максимальное значение $\delta m(H)$ с микроскопическими параметрами ансамбля для двумерного и трехмерного случаев соответственно. Данные выражения служат основой для еще одной независимой методики определения константы межзеренного обменного взаимодействия изотропных нанокристаллических постоянных магнитов. Стоит отметить при этом, что определяемое в соответствие с ней значение константы в общем случае служит нижней оценкой реальной величины в силу того, что в модели не учитывается магнитостатическое взаимодействие. Последнее всегда приводит в небольшому отрицательному вкладу к кривым $\delta m(H)$.

Аналитически установлены в приближении бесконечно малых внешних магнитных полей температурные зависимости остаточной намагниченности изотропного ансамбля невзаимодействующих однодоменных зерен. Соответствующие выражения 4.7-4.9 подтверждены выполненным компьютерным экспериментом. Также, с применением численных расчетов, получены температурные зависимости остаточной намагниченности уже в случае варьирования константы межзеренного обменного взаимодействия при разных значениях отрицательных внешних магнитных полей. Установлено, что формируемое за счет парного взаимодействия распределение углов проекций векторов намагниченности на базисную плоскость кристаллитов не зависит от значения константы межзеренного обменного взаимодействия. Данный факт должен лечь в основу будущего математического описания метода анализа микроскопических параметров нанокристаллических обменносвязанных систем со спонтанным спин-переориентационным приходом, предложенным в работе [52].

Таким образом, можно констатировать, что все поставленные в работе цели и задачи достигнуты. Получены уникальные результаты, имеющие публикационный потенциал.

Представленные в магистерской диссертации результаты апробировались с устными и стендовыми докладами на конференциях всероссийского и международного уровней со специалистами в области физики магнитных явлений. Среди них можно выделить: XII и XIII Всероссийские школы-семинары по проблемам физики конденсированного состояния (2011, 2012), The 5th Baikal International Conference "Magnetic Materials. New technologies" (2012), 19th International Symposium on Metastable, Amorphous and Nanostructured Materials (2012), V Euro-Asian Symposium "Trends in MAGnetism" (2013), XIXth International Conference on Permanent Magnets (2013).

БЛАГОДАРНОСТИ

Выражаю свою благодарность кандидату физико-математических наук, доценту кафедры магнетизма и магнитных наноматериалов Волегову Алексею Сергеевичу за руководство выполнением магистерской диссертацией, создание оптимальных условий для самореализации, развития профессиональных навыков и приобретения знаний в области физики магнитных явлений.

Отдельно отмечу свою признательность за плодотворные дискуссии по тематике магистерской диссертации и не только, за ценные замечания д.ф.-м.н. Кудреватых Николаю Владимировичу, д.ф.-м.н. Васьковскому Владимиру Олеговичу и д.ф.-м.н. Овчинникову Александру Сергеевичу, чей вклад в формирование целостной картины выполненной работы и проблематики исследования имел важное значение. Также выражаю слова благодарности профессору Франку Кубелю и профессору Ральфу Скомскому за мотивацию к результативной работе и полезные советы.

Особую благодарность выражаю своим ближайшим коллегам Михалицыной Евгении Александровне, Незнахину Дмитрию Сергеевичу, Андрееву Сергею Витальевичу и к.ф.-м.н. Степановой Елену Александровне за помощь и всестороннюю поддержку.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Aharoni A. Micromagnetics: past, present and future // *Physica B.* – 2001. – V. 306. – P. 1-9.
2. Vansteenkiste A., Van de Wiele B. MuMax: A new high-performance micromagnetic simulation tool // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials.* – 2011. – V. 323. – P. 2585-2591.
3. Balamurugan B., Sellmyer D. J., Hadjipanayis G. C., Skomski R. Prospects for nanoparticle-based permanent magnets // *Scripta Mater.* – 2012. – V. 67 – P. 542-547.
4. Lewis L. H., Jiménez-Villacorta F. Perspectives on Permanent Magnetic Materials for Energy Conversion and Power Generation // *Metall. Mater. Trans. A* – 2013. – V. 44A – P. S2-S20.
5. Umetsu R. Y., Sakuma A., Fukamichi K. Magnetic anisotropy energy of antiferromagnetic L1₀-type equiatomic Mn alloys // *Appl. Phys. Lett.* – 2006. – V. 89. – P. 052504(1)-(3).
6. Liorzou F., Phelps B., Atherton D. L. Macroscopic Models of Magnetization // *IEEE Trans. Magn.* – 2000. – V. 36, № 2. – P. 418-428.
7. Stoner E. C., Wohlfarth E. P. A Mechanism of Magnetic Hysteresis in Heterogeneous Alloys // *Phil. Trans. Roy. Soc.* – 1948. – V. 240, № 826. – P. 599-642.
8. Skomski R. Simple Models of Magnetism. – Oxford University Press, 2012. – P. 110-116.
9. Sato S., Lee S. J., Mitsumata C., Yanagihara H., Kita E. Random magnetic anisotropy in isotropic nanocrystalline composite permanent magnets // *J. Appl. Phys.* – 2011. – V. 109. – P. 083904(1)-(4).
10. Atherton D. L., Beattie J. R. A Mean Field Stoner-Wohlfarth Hysteresis Model // *IEEE Trans. Magn.* – 1990. – V. 26, № 6. – P. 3059-3063.
11. Zhang H., Zhang S., Shen B., Kronmuller H. The magnetization behavior of nanocrystalline permanent magnets based on the Stoner–Wohlfarth Model // *J. Magn. Magn. Mater.* – 2003. – V. 260. – P. 352-360.
12. Wang S., Kang S. S., Harrell J. W., Wu X. W., Chantrell R. W. Coercivity ratio and anisotropy distribution in chemically synthesized L1₀FePt nanoparticle systems // *Phys. Rev. B.* – 2003. – V. 68. – P. 104413(1)-(7).
13. Franco V., Conde A. Thermal effects in a Stoner–Wohlfarth model and their influence on magnetic anisotropy determination // *J. Magn. Magn. Mater.* – 2004. – V. 278. – P. 28-38.
14. Geshev J., Pereira L. G., Schmidt J. E., Mikhov M. Dependence of the magnetization and remanence of single-domain particles on the second cubic anisotropy constant // *J. Appl. Phys.* – 2001. – V. 90, № 12. – P. 6243-6250
15. Jiles D. C., Atherton D. L., Theory of ferromagnetic hysteresis // *J. Magn. Magn. Mater.* – 1986. – V. 61. – P. 48-60.
16. Szewczyk R., Bienkowski A., Salach J. Extended Jiles–Atherton model for modelling the magnetic characteristics of isotropic materials // *J. Magn. Magn. Mater.* – 2008. – V. 320. – P. e1049-e1052.
17. Hamimid M., Mimoune S. M., Feliachi M. Hybrid magnetic field formulation based on the losses separation method for modified dynamic inverse Jiles–Atherton model // *Physica B.* – 2011. – V. 406. – P. 2755-2757
18. Hamimid M., Mimoune S. M., Feliachi M. Evaluation of minor hysteresis loops using Langevin transforms in modified inverse Jiles–Atherton model // *Physica B.* – 2013. – V. 429. – P. 115-118

19. Globus A. Universal hysteresis loop for soft ferrimagnetic material // Proc. Europ. Physical Society, Conference on Soft Magnetic Material 2 – 1975. – P. 233.
20. Preisach F. Uber die magnetische nachwirkung // Zeitschrift fur Physik. – 1935. – V. B94. – P. 277-302
21. Vadja F. and Della Torre E. Measurement of output dependent Preisach functions // IEEE Trans. Magn. – 1991 – V. 27. – P. 4757-4762.
22. Oti J., Vadja F., Della Torre E. Identification of parameters in a moving model // J. Appl. Phys. – 1991 – V. 69, № 8. – P. 4826-4828.
23. Takahashi N., Miyabara S., Fujiwara K. Problems in Practical Finite Element Analysis Using Preisach Hysteresis Model // IEEE Trans. Magn. – 1999 – V. 35, №3. – P. 1243-1246.
24. Mantegna R. N., Spagnolo B., Testa L., Trapanese M. Stochastic resonance in magnetic systems described by Preisach hysteresis model // J. Appl. Phys. – 2005. – V. 97. – P. 10E519(1)-(3).
25. Skomski R. Simple Models of Magnetism. – Oxford University Press, 2012. – P. 274-276.
26. Toga Y., Moriya H., Tsuchiura H., Sakuma A. First principles study on interfacial electronic structures in exchange-spring magnets // J. Phys.: Conf. Ser. – 2011. – V. 266. – P. 012046(1)-(5)
27. Ogawa D., Koike K., Kato H., Mizukami S., Miyazaki T., Oogane M., Ando Y. Evaluation of Interlayer Exchange Coupling in α -Fe(100)/Nd₂Fe₁₄B(001) Films // J. Korean Phys. Soc. – 2013. – V. 63, № 3. – P. 489-492
28. Wohlfarth E. P. Relations between Different Modes of Acquisition of the Remanent Magnetization of Ferromagnetic Particles // J. Appl. Phys. – 1958. – V. 29. – P. 595-596.
29. Henkel O. Remanenzverhalten und Wechselwirkungen in hartmagnetischen Teilchenkollektiven // Phys. Status Solidi – 1964. – V. 7. – P. 919-929.
30. Kelly P. E., O'Grady K., Mayo P. I., Chantrell R. W. Switching mechanisms in cobalt-phosphorus thin films // IEEE Trans. Magn. – 1989. – V. 25, №5. – P. 3881-3883.
31. Gaunt P., Hadjipanayis G., Ng D. Remanence Relationships and Domain Wall Pinning in Ferromagnets // J. Magn. Magn. Mater. – 1986. – V. 54-57. – P. 841-842.
32. Müller K.-H., Eckert D., Handstein A., Nothnagel P. Deviations from Wohlfarth's remanence relationship in NdFeB magnets // J. Magn. Magn. Mater. – 1992. – V. 104-107. – P. 1173-1174.
33. Cui B. Z., O'Shea M. J. Hard magnetic properties of rapidly annealed NdFeB/Co films and intergrain interactions // J. Magn. Magn. Mater. – 2004. – V. 279. – P. 27-35.
34. Mata-Zamora M. E., Montiel H., Alvarez G., Barrona J. F., Arriola H., Saniger J. M., Valenzuela R. Remanence of the interparticle interactions and its influence on the microwave absorption in Co-ferrite // J. Magn. Magn. Mater. – 2008. – V. 320. – P. e139-e142.
35. Che X.-D., Bertram H. N. Phenomenology of δM curves and magnetic interactions // J. Magn. Magn. Mater. – 1992. – V. 116. – P. 121-127.
36. Ohkubo T., Miyoshi T., Hirosawa S., Hono K. Effects of C and Ti additions on the microstructures of Nd₉Fe₇₇B₁₄ nanocomposite magnets // Mater. Sci. Eng. A – 2007. – V. 449-451. – P. 435-439.
37. Rama Rao N. V., Gopalan R., Manivel Raja M., Chandrasekaran V., Chakravarty D., Sundaresan R., Ranganathan R., Hono K. Structural and magnetic studies on spark plasma sintered SmCo₅/Fe bulk nanocomposite magnets // J. Magn. Magn. Mater. – 2007. – V. 312. – P. 252-257.

38. Geshev J., Mikhov M. Remanence curves for a disordered system of three- and four-axial fine particles. Henkel-type plots // *J. Magn. Magn. Mater.* – 1992. – V. 104-107. – P. 1569-1570.
39. Geshev J., Pereira L. G., Schmidt J. E., Mikhov M. Dependence of the magnetization and remanence of single-domain particles on the second cubic anisotropy constant // *J. Appl. Phys.* – 2001. – V. 90, №12. – P. 6243-6250.
40. Garcia-Otero J., Porto M., Rivas J. Henkel plots of single-domain ferromagnetic particles // *J. Appl. Phys.* – 2000. – V. 87, №10. – P. 376-7381.
41. Zhang H., Rong C., Du X., Zhang J., Zhang S., Shen B. Investigation on intergrain exchange coupling of nanocrystalline permanent magnets by Henkel plot // *Appl. Phys. Lett.* – 2003 – V. 82, №23. – P. 4098-4100.
42. Neu V., Biele R., Singh A., Schultz L. Modeling of Intergrain Exchange Coupling for Quantitative Predictions of δm Plots // *IEEE Trans. Magn.* – 2010. – V. 46, №6. – P. 2331-2333.
43. Matarranz R., Contreras M. C., Pan G., Presa B., Corrales J. A., Calleja J. F. Transverse susceptibility of nanoparticle systems: The effect of interaction, dispersion, and texture // *J. Appl. Phys.* – 2006. – V. 99. – P. 08Q504(1)-(3).
44. Aharoni A., Frei E. H., Shtrikman S., Treves D. // *Bull. Res. Council. Isr., Sect. A: Math., Phys. Chem.* – 1957. – V. 6A, P. 215.
45. Zimmermann G. Transverse susceptibility of particulate recording media in different remanence states // *J. Appl. Phys.* – 1995. – V. 77, №5. – P. 2097-2101.
46. Cimpoesu D., Stancu A., Spinu L. Physics of complex transverse susceptibility of magnetic particulate systems // *Phys. Rev. B.* – 2007. – V. 76. – P. 054409(1)-(15).
47. Мушников Н. В., Терентьев П. Б., Розенфельд Е. В. Магнитная анизотропия соединения $Nd_2Fe_{14}B$ и его гидрида $Nd_2Fe_{14}B$ // *Физика металлов и металловедение.* – 2007. – Т. 103 №1. – С. 42-53.
48. Skomski R. *Simple Models of Magnetism.* – Oxford University Press, 2012. – P. 311-312.
49. Akdogan N. G., Hadjipanayis G. C., Sellmyer D. J. Novel $Nd_2Fe_{14}B$ nanoflakes and nanoparticles for the development of high energy nanocomposite magnets // *Nanotechnology* – 2010. – V. 21. – P. 295705(1)-(5).
50. Akdogan N. G., Li W., Hadjipanayis G. C. Anisotropic $Nd_2Fe_{14}B$ nanoparticles and nanoflakes by surfactant-assisted ball milling // *J. Appl. Phys.* – 2011. – V. 109. – P. 07A759(1)-(3).
51. Preparata F. P., Shamos M. I. *Computational geometry. An introduction.* – New York: Springer, 1985. – 390 P.
52. Волегов А. С. Межзеренное обменное взаимодействие в наноструктурированных сплавах системы РЗМ-3d-металл-бор и его роль в формировании их фундаментальных и гистерезисных магнитных свойств: дис... канд. физ.-мат. наук. – Екатеринбург, 2012. – 160 С.