Министерство образования и науки
Российской Федерации
Федеральное государственное
бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тверской государственный университет»

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ
ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ,
НАНОСТРУКТУР
И НАНОМАТЕРИАЛОВ**

МЕЖВУЗОВСКИЙ СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

выпуск 9

ТВЕРЬ 2017

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Ф50

Рецензирование статей осуществляется на основании Положения об рецензировании статей и материалов для опубликования в Межвузовском сборнике научных трудов «Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов».

Официальный сайт издания в сети Интернет:

www.physchemaspects.ru

Ф50 Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]: межвуз. сб. науч. тр. / под общей редакцией В.М. Самсонова, Н.Ю. Сдобнякова. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2017. – Вып. 9. – 592 с.

ISBN 978-5-7609-1275-6

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС 7747789 от 13.12.2011.

Сборник составлен из оригинальных статей теоретического и экспериментального характера, отражающих результаты исследований в области изучения физико-химических процессов с участием кластеров, наноструктур и наноматериалов физики, включая межфазные явления и нанотермодинамику. Сборник предназначен для научных и инженерно-технических работников, преподавателей ВУЗов, студентов и аспирантов. Издание подготовлено на кафедре общей физики Тверского государственного университета.

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

ISBN 978-5-7609-1275-6

ISSN 2226-4442

© Коллектив авторов, 2017

© Тверской государственной
университет, 2017

УДК 537.624

АНАЛИЗ SPD-МЕТОДА ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПОЛЕЙ АНИЗОТРОПИИ ФЕРРОМАГНИТНЫХ ПОЛИКРИСТАЛЛОВ

М.Б. Ляхова, О.В. Жданова, Е.М. Семенова, Ю.Г. Пастушенков, Д.Ю. Карпенков,
А.Ю. Карпенков, М.В. Филимонов

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

170002, Россия, Тверь, Садовый пер., 35

lahova_m_b@mail.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2017.9.283

Аннотация: Приведены результаты моделирования кривых намагничивания $I(H)$ и зависимостей $d^2I(H)/dH^2$ в рамках моделей вращения вектора намагниченности и модели магнитных фаз Нееля. Предложены рекомендации для реализации SPD-метода для определения поля анизотропии поликристаллических многодоменных образцов ферромагнитных соединений с МКА типа «легкая ось».

Ключевые слова: SPD-метод, магнитокристаллическая анизотропия, поле анизотропии, кривая намагничивания.

1. Введение

При исследовании магнитокристаллической анизотропии (МКА) ферромагнетиков применяются два основных метода. Поле анизотропии H_A можно определять из кривых намагничивания, как поле, в котором монокристалл достигает магнитного насыщения вдоль оси трудного намагничивания (ОТН). Для определения констант МКА монокристаллов обычно используются расчетные методы по кривым вращающих моментов, измеренных на магнитном анизометре. Однако, в обоих методах объектами исследования являются монокристаллы, получение которых для многих соединений является сложной экспериментальной задачей.

В работах [1-4] описан так называемый SPD-метод (singular point detection) определения поля анизотропии поликристаллических образцов по положению особой точки (излома) на кривых намагничивания. Метод заключается в измерении на специальной установке зависимости второй производной намагниченности I от напряженности импульсного поля H и определения величины H_A , соответствующего пику на этой зависимости.

Целью данной работы являлся анализ возможности применения SPD-метода для определения полей анизотропии поликристаллических образцов по их кривым намагничивания.

2. Методика расчетов

В простейшей модели процесса намагничивания считается, что образец находится в однодоменном состоянии и процесс происходит только за счет вращения вектора $\vec{I}_s$. В полной энергии кристалла учитываются только энергия МКА и энергия во внешнем магнитном поле.

В методе магнитных фаз Нееля [5] рассматриваются два процесса намагничивания: смещение доменных границ, которому соответствует изменение объема магнитных фаз, и вращение векторов $\vec{I}_s$ во всех фазах к направлению внешнего поля. В полной энергии кристалла учитываются энергия МКА, энергия во внешнем поле и энергия собственного размагничивающего поля. Предполагается, что плотность энергии МКА всех магнитных фаз одинакова, то есть векторы намагниченности всех фаз составляют одинаковый угол с ОЛН кристалла.

В [6] предложен численный метод расчета кривых намагничивания монокристаллов с любым типом МКА. Метод базируется на модели магнитных фаз Нееля, но не учитывает ограничения модели. Считается, что в размагниченном образце присутствует соответствующее типу МКА количество магнитных фаз, а при воздействии поля происходит изменение объемов фаз и вращение векторов $\vec{I}_s$ во всех фазах.

На основе данных методов создана компьютерная программа «Метеор» для расчетов кривых намагничивания магнетиков с любым типом МКА, любой формы и при любой ориентации внешнего поля относительно кристаллографических осей образца [7]. Минимизация полной энергии кристалла выполняется численными методами, определяются все необходимые микромагнитные параметры магнитных фаз (объемы и углы) и строятся кривые намагничивания образца.

В данной работе моделировались кривые намагничивания $I(H)$ одноосного кристалла с МКА типа «легкая ось» и следующими характеристиками: константой МКА $K_1 = 5 \cdot 10^6$ эрг·см⁻³, величиной намагниченности насыщения $I_s = 10^3$ Гс, фактором формы $N = 4\pi/3$ (сфера). Для построения кривых $I(H)$ использовалась программа «Метеор». Кривая намагничивания поликристаллического образца рассчитывалась как сумма зависимостей $I(H)$ при различных углах $\varphi = 0-90^\circ$ между осью легкого намагничивания (ОЛН) образца и направлением внешнего поля, деленная на количество кривых, шаг изменения угла составлял $\Delta\varphi = 1-5^\circ$. При моделировании текстуры предполагалось, что вдоль оси текстуры ориентированы ОЛН 25 % зерен. Дифференцирование кривых $I(H)$ выполнено в программе «Origin 7.0».

3. Результаты и обсуждение

На первом этапе было проведено моделирование кривых $I(H)$ и $d^2I(H)/dH^2$ моно- и поликристаллов в рамках модели вращения вектора $\vec{I}_s$. На рис. 1 а показаны кривые намагничивания под различными углами φ к ОЛН (оси c) монокристалла. Видно, что особая точка (излом)

наблюдается только на кривой намагничивания вдоль ОН, перпендикулярной оси c , в поле насыщения $H_s = H_A = 2K_1/I_s$ [8]. При произвольном угле φ кривые $I(H)$ — гладкие и не достигают насыщения, а только асимптотически приближаются к нему.

Рис. 1. Кривые $I(H)$ (а) и $d^2I(H)/dH^2$ (б) монокристаллического образца, рассчитанные в модели вращения вектора $\vec{I}_s$.

Кривые намагничивания вдоль ОН были построены для различных шагов изменения магнитного поля $\Delta H = 25 - 500$ Э. Результаты дифференцирования приведены на рис. 1 б. Хорошо видно, что чем меньше шаг изменения поля ΔH , тем выше и уже пик на кривых $d^2I(H)/dH^2$. Это означает, что при экспериментальном измерении кривых намагничивания необходимо стремиться к максимально возможному количеству точек на измеряемой кривой.

Кривые $I(H)$ и $d^2I(H)/dH^2$ поликристаллических образцов, рассчитанные в модели вращения вектора $\vec{I}_s$, приведены на рис. 2. Видно, что положение пика на кривых $d^2I(H)/dH^2$ постоянно и соответствует полю $H = H_A$, а высота пика зависит от текстуры образца. Максимальный по величине пик наблюдается при ориентации поля перпендикулярно оси текстуры, минимальный — при параллельной ориентации. Эту закономерность нужно учитывать при измерениях кривых намагничивания текстурированных образцов.

На втором этапе работы было проведено моделирование кривых намагничивания в рамках модели магнитных фаз Нееля. На рис. 3 а видно, что особая точка (излом) наблюдается на всех кривых $I(H)$ монокристалла при всех углах $\varphi = 0 - 90^\circ$ к ОЛН (оси c). При $\varphi = 0^\circ$ и 90° в особой точке

$I = I_s$. Известно [5, 8], что насыщение достигается в поле $H = H_0$ вдоль ОЛН и в поле $H = H_0 + H_A$ вдоль ОТН, где $H_0 = NI_s$ – собственное размагничивающее поле, $N = 4\pi/3$ – фактор формы образца, $H_A = 2K_1/I_s$ – поле анизотропии. Кривые намагничивания в произвольных направлениях к ОЛН имеют излом в точках с координатами (I_{sp}, H_{sp}) . С ростом угла φ от 0° до 90° величина H_{sp} растет от H_0 до $H_0 + H_A$, а зависимость $I_{sp}(\varphi)$ имеет минимум (пунктирная линия на рис. 3 а).

Рис. 2. Кривые $I(H)$ (а) и $d^2I(H)/dH^2$ (б) поликристаллических образцов, рассчитанные в модели вращения вектора $\vec{I}_s$: 1 – изотропный образец, 2-3 – текстурированные образцы. Поле направлено вдоль (2) и перпендикулярно оси текстуры (3).

Рис. 3. Кривые $I(H)$ (а) и $d^2I(H)/dH^2$ (б) монокристаллического образца, рассчитанные в модели магнитных фаз Нееля.

На зависимостях $d^2I(H)/dH^2$ положения пика соответствуют значениям H_{sp} , а высота пиков изменяется сложным образом в зависимости от угла φ (см. рис. 3 б). Максимальная высота пика характерна для кривой вдоль ОЛН, с увеличением φ она падает и при $\varphi > 80^\circ$ опять возрастает.

На рис. 4 приведены кривые $I(H)$ и $d^2I(H)/dH^2$ поликристаллических образцов, рассчитанные в модели магнитных фаз Нееля. Видно, что на кривых $d^2I(H)/dH^2$ наблюдаются два пика, соответствующих полям $H = H_0$ и $H = H_0 + H_A$, а высота пиков зависит от текстуры образца. При намагничивании вдоль оси текстуры растет величина пика в поле $H = H_0$, и уменьшается величина пика в поле $H = H_0 + H_A$. Если поле направлено перпендикулярно оси текстуры, то наблюдается обратный эффект – растет величина пика в поле $H = H_0 + H_A$ и падает в поле $H = H_0$.

Рис. 4. Кривые $I(H)$ (а) и $d^2I(H)/dH^2$ (б) поликристаллических образцов, рассчитанные в модели магнитных фаз Нееля: 1 – изотропный образец, 2-3 – текстурированные образцы. Поле направлено вдоль (2) и перпендикулярно оси текстуры (3).

На последнем этапе работы SPD-метод был применен для расчета полей анизотропии по экспериментальным кривым намагничивания поликристаллических образцов гадолиния и соединения $FeCoB$.

Кривые намагничивания $\sigma(H)$ поликристалла гадолиния в интервале температур 260–300 К приведены на рис. 5 а. Известно [9], что гадолиний имеет гексагональную кристаллическую решетку и в данном интервале

температур характеризуется МКА типа «легкая ось» с $K_1 = 2 \cdot 10^5$ эрг·см⁻³ и полем анизотропии не более 1 кЭ.

Рис. 5. Кривые $\sigma(H)$ (а) и $d^2\sigma(H)/dH^2$ (б) поликристалла гадолиния в интервале температур 260–300 К.

На кривых $d^2\sigma(H)/dH^2$ поликристалла гадолиния (см. рис. 5 б) видны четкие пики, которые, по-видимому, соответствуют полям насыщения вдоль ОЛН $H_0 = NI_s$. С понижением температуры от 260 К до 290 К положение пиков сдвигается в сторону меньших полей от ~ 3 кЭ до $\sim 0,5$ кЭ, что связано с уменьшением величины I_s . Выявить четкий пик, соответствующий полю насыщения вдоль ОТН не удалось из-за малой величины $H_A < 1$ кЭ.

Вторым объектом исследования было соединение $FeCoB$ с тетрагональной кристаллической решеткой и МКА типа «легкая ось» при комнатной температуре. По данным [10, 11] соединение $FeCoB$ имеет следующие характеристики: $I_s \approx 840$ Гс, $K_1 = 2 \cdot 10^6$ эрг·см⁻³, и для сферического образца $H_0 = 4\pi I_s / 3 \approx 3,5$ кЭ, $H_A = 2K_1 / I_s \approx 5$ кЭ.

Поликристаллический образец $FeCoB$ имел явно выраженную текстуру. Это подтверждалось его устойчивой ориентацией одной из осей во внешнем магнитном поле, а также результатами металлографического анализа его микроструктуры и доменной структуры. Образец состоял из зерен правильной столбчатой формы со средними размерами ~ 50 – 100 мкм. На плоскости, перпендикулярной оси текстуры в большинстве зерен выявлялась доменная структура в виде «звездочек», характерная для базисной плоскости монокристаллов с данным типом МКА.

На рис. 6 приведены кривые намагничивания $\sigma(H)$ и зависимости $d^2\sigma(H)/dH^2$ вдоль и перпендикулярно оси текстуры поликристалла $FeCoB$. На обеих кривых $d^2\sigma(H)/dH^2$ четко видны пики, соответствующие $H_0 \approx 3,5$ кЭ, однако, второй пик удалось наблюдать только для кривой, измеренной в поле перпендикулярном оси текстуры. Разность полей, соответствующих положениям этих двух пиков составляет порядка 4–5 кЭ, что удовлетворительно согласуется с величиной $H_A \approx 5$ кЭ.

Рис. 6. Кривые $\sigma(H)$ (а) и $d^2\sigma(H)/dH^2$ (б) вдоль (1) и перпендикулярно (2) оси текстуры поликристалла $FeCoB$.

4. Заключение

Результаты моделирования зависимостей $d^2I(H)/dH^2$ поликристаллических образцов ферромагнетиков с МКА типа «легкая ось» в модели вращения вектора I_s полностью соответствуют SPD-методу, предложенному в работах [1-4].

На всех зависимостях $d^2I(H)/dH^2$ поликристаллических образцов, рассчитанных в модели магнитных фаз Нееля, наблюдаются два пика в собственном размагничивающем поле образца $H = H_0$ и в поле $H = H_0 + H_A$, где H_A – поле анизотропии.

Предложены следующие рекомендации для реализации SPD-метода для определения поля анизотропии поликристаллических многодоменных образцов ферромагнитных соединений с МКА типа «легкая ось»:

1. если на зависимостях $d^2I(H)/dH^2$ образцов выявляются два пика, то поле анизотропии H_A можно определить как расстояние между этими пиками;

2. при наличии текстуры в поликристаллах измерения кривых

намагничивания следует проводить в направлении, перпендикулярном оси текстуры, так как в этом случае увеличивается высота пика в поле $H = H_0 + H_A$;

3. при экспериментальном измерении кривых намагничивания необходимо стремиться к максимально возможному количеству точек на измеряемой кривой, так как чем меньше шаг изменения поля, тем выше пики на кривых $d^2I(H)/dH^2$.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ (грант № 3.7849.2017/8.9).

Библиографический список:

1. **Asti, G.** Nonanalyticity of the magnetization curve: application to the measurement of anisotropy in polycrystalline samples / G. Asti, S. Rinaldi // *Physical Review Letters*. – 1972. – V. 28. – №. 24. – P. 1584-1586.
2. **Asti, G.** Singular points in the magnetization curve of a polycrystalline ferromagnet / G. Asti, S. Rinaldi // *Journal of Applied Physics*. – 1974. – V. 45. – I. 8. – P. 3600-3610.
3. **Asti, G.** Singular point detection in multidomain samples / G. Asti, F. Bolzoni, R. Cabassi // *Journal of Applied Physics*. – 1993. – V. 73. – I. 1. – P. 323-333.
4. **Asti, G.** Influence of domain walls on the singular point detection of energy losses in hard magnetic materials / G. Asti, M. Solzi, M. Ghidini // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. – 2005. – V. 290–291. – P. 1. – P. 533-535.
5. **Neel, L.** Les lois de l'aimantation et de subdivision en domaines elementaires d'un monocristal de fer (I) / L. Neel // *Journal de Physique et Le Radium*. – 1944. – V. 5. – № 11. – P. 241-251.
6. **Скоков, К.П.** Учет микромагнитного состояния образца при интерпретации данных магнитных измерений / К.П. Скоков // *Известия РАН. Серия физическая*. – 2007. – Т. 71. – № 11. – С. 1563-1564.
7. Свидетельство № 2013618687 Российская Федерация. Программа для моделирования кривых намагничивания ферромагнитных кристаллов / М.Б. Ляхова, С.С. Смирнов, К.П. Скоков; заявитель и правообладатель Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования. – № 2013616250. заявл. 18.07.2013; зарегистрировано в реестре программ для ЭВМ. 16.09.2013. – 1 с.
8. **Ляхова, М.Б.** Анализ кривых намагничивания и магнитокристаллической анизотропии одноосных ферромагнетиков / М.Б. Ляхова, О.В. Жданова // *Металловедение и термическая обработка металлов*. – 2016. – № 10. – С. 10-16.
9. **Roe, W.C.** Measurements of the magnetic anisotropy of gadolinium / W.C. Roe // Presented in candidature for the degree of Doctor of Philosophy. Durham theses. – Durham: Durham University, 1961. – 86 с.
10. **Iga, A.** Magnetocrystalline anisotropy in $(Fe_{1-x}Co_x)_2B$ system / A. Iga // *Japanese Journal of Applied Physics*. – 1970. – V. 9. – №. 4. – P. 415-416.
11. **Edström, A.** Magnetic properties of $(Fe_{1-x}Co_x)_2B$ alloys and the effect of doping by 5d elements / A. Edström, M. Werwiński, D. Iuşan et al. // *Physical Review B*. 2015. – V. 92. – 17. – P. 174413-1-174413-13.