

*На правах рукописи*



БОЛЯЧКИН Антон Сергеевич

**РОЛЬ ОБМЕННОГО И МАГНИТОСТАТИЧЕСКОГО  
ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В ФОРМИРОВАНИИ ГИСТЕРЕЗИСНЫХ  
СВОЙСТВ НАНОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СПЛАВОВ**

01.04.11 – физика магнитных явлений

**Автореферат**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Екатеринбург – 2019

Работа выполнена на кафедре магнетизма и магнитных наноматериалов и в отделе магнетизма твердых тел НИИ Физики и прикладной математики Института естественных наук и математики Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,  
старший научный сотрудник,  
**Кудреватых Николай Владимирович**

Официальные оппоненты: **Гречишкин Ростислав Михайлович**,  
доктор физико-математических наук, профессор,  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Тверской государственный университет» (г. Тверь), профессор кафедры прикладной физики

**Степанов Виктор Иванович**,  
кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, «Институт механики сплошных сред Уральского отделения Российской академии наук» - филиал Федерального государственного бюджетного учреждения науки Пермского федерального исследовательского центра Уральского отделения Российской академии наук (г. Пермь), старший научный сотрудник лаборатории динамики дисперсных систем

Ведущая организация: Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук - обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН (г. Красноярск)

Защита состоится «22» апреля 2019 г. в 13.00 часов на заседании диссертационного совета Д 212.285.24 на базе ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» по адресу: 620000, г. Екатеринбург, пр. Ленина, 51, комн. 248 (зал заседаний диссертационного совета).

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», <http://lib.urfu.ru/mod/data/view.php?d=51&rid=288599>.

Автореферат разослан «    » \_\_\_\_\_ 2019 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,  
доктор физико-математических наук, доцент

 — Овчинников А.С.

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

### Актуальность темы исследования

Задача установления того, как локальные взаимодействия и микроструктурные параметры влияют на макроскопические магнитные гистерезисные свойства нанокристаллических сплавов, сформулирована многие годы назад, но не является на данный момент решенной в полной мере ввиду своей комплексности. Актуальность ее решения остается высокой. Так, анализируя публикационную активность в базе данных Scopus за период с 2015 по 2018 год, можно отметить, что ежегодно издается около 200 статей, посвященных данным материалам, и во многих из них в той или иной степени преследуется упомянутая задача. В частности, интерес представляет обменное взаимодействие между кристаллитами, и предпринимаются попытки его анализа. В качестве его грубой количественной оценки иногда выступает величина относительной остаточной намагниченности, а для качественного анализа активно используются графики Хенкеля и родственные им  $\delta M(H)$  зависимости. Имеются редкие примеры использования FORC-диаграмм с целью изучения обменносвязанных систем. Однако наблюдается явная нехватка количественной информации об обменном взаимодействии между зернами, что, в свою очередь, ограничивает продвижение в исследованиях совместного влияния микроструктуры и локальных взаимодействий на магнитные свойства нанокристаллических сплавов.

### Степень разработанности темы исследования

Применительно к магнитотвердым нанокристаллическим и микрокристаллическим сплавам, и конкретно для соединения  $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ , существенный вклад в исследование связи макроскопических магнитных гистерезисных свойств с микроструктурой и локальными взаимодействиями внес Х. Кронмюллер (H. Kronmüller) [1]. На основе микромагнитного моделирования он с соавторами рассматривал процессы перемагничивания в таких сплавах, анализировал факторы, влияющие на коэрцитивную силу, и установил для нее известное феноменологическое выражение. На данный момент эту линию микромагнитных исследований продолжает Т. Шрефл (T. Schrefl) [2], решая приблизительно тот же набор задач, но с возросшими вычислительными возможностями.

Одной из ключевых фигур в области компьютерного моделирования магнитных наноматериалов является Р. Шантрел (R. Chantrell) [3]. В частности, он развивал моделирование методом Монте-Карло, предложил ряд модификаций метода, которые позволили вычислять квазистатические и динамические петли магнитного гистерезиса с учетом локальных взаимодействий при конечных температурах. На данный момент Р. Шантрел совместно с Р. Эвансом (R. Evans)

развивают атомистическое моделирование магнитных наноматериалов и концепцию мультимасштабного моделирования.

Р. Шантрел в соавторстве с П. Келли (P. Kelly) [4] предложили построения зависимостей  $\delta M(H)$ , цель которых – анализ взаимодействий в материалах. Данная методика стала распространенной применительно к высокоанизотропным нанокристаллическим сплавам. Развитию графиков Хенкеля и  $\delta M(H)$  посвятил цикл работ Ю. Гешев (J. Geshev). Также вклад в анализ зависимостей  $\delta M(H)$  внес А.С. Лилеев, рассмотрев роль магнитостатического взаимодействия между кристаллитами. Однако в настоящий момент данные магнитометрические методики экспериментаторами используются преимущественно для сравнительного анализа и качественных суждений; количественные оценки, в том числе применительно к обменному взаимодействию между зёрнами, делаются редко.

Исследованиям магнитных восприимчивостей наноматериалов в продольном и поперечном направлениях относительно магнитного поля положил начало А. Аарони (A. Aharoni) [5], рассмотрев данный тип восприимчивостей для модели Стонера-Вольфарта. Он же сформулировал метод оценки поля анизотропии на основе полевой зависимости поперечной магнитной восприимчивости. В дальнейшем развил его идеи и сделал обобщения А. Станку (A. Stancu) [6]. В частности, им рассмотрен вопрос о влиянии магнитостатического взаимодействия на продольную и поперечную магнитные восприимчивости. Анализ влияния межзёренного обменного взаимодействия на вышеупомянутые восприимчивости ни им, ни до него не проводился.

Роль межзёренного обменного взаимодействия и микроструктуры в формировании магнитных свойств магнитомягких нанокристаллических сплавов описал Г. Герцер (G. Herzer) [7] на основе модели случайной магнитной анизотропии, которую предложил Р. Албен (R. Alben). Дальнейшие работы Г. Герцер и К. Сузуки (K. Suzuki) посвятили экспериментальной проверке теории и ее развитию, например, учету наведенной магнитной анизотропии. Большой вклад в понимание связи макроскопических магнитных свойств нанокристаллических сплавов с микроструктурой и локальными взаимодействиями внесли Р.С. Исхаков и С.В. Комогорцев [8], развивая методику измерения приближения намагниченности к насыщению и корреляционную магнитометрию.

Научная школа Уральского федерального университета в лице кафедры магнетизма и магнитных наноматериалов ИЕНиМ и отдела магнетизма твердых тел НИИ ФПМ, где выполнялась данная диссертационная работа, имеет многолетний опыт синтеза и изучения магнитных свойств нанокристаллических сплавов (работы Н.В. Кудреватых, В.О. Васьковского, О.А. Иванова, Г.В. Курляндской,

А.В. Свалова и др.). Накопленный опыт и потребность в количественном анализе локальных взаимодействий между зернами нанокристаллических сплавов легли в основу ниже сформулированных целей и задач данной работы.

### **Цель работы и задачи**

Для данного исследования была сформулирована цель: установить связь магнитных гистерезисных свойств нанокристаллических сплавов с обменным и магнитостатическим взаимодействиями. Для достижения этой цели были поставлены задачи:

- 1) разработать компьютерную модель полидисперсных нанокристаллических сплавов и реализовать вычисление процесса их перемагничивания на основе метода Монте-Карло и приближения макроспинов;
- 2) установить для изотропных магнитотвердых нанокристаллических сплавов зависимости остаточной намагниченности и магнитных восприимчивостей в состоянии остаточной намагниченности от величины энергии межзеренного обменного взаимодействия, а также выявить влияние на данные зависимости магнитостатического взаимодействия и распределения зерен по размерам;
- 3) установить роль микроструктурных параметров, межзеренного обменного и магнитостатического взаимодействий в формировании вида графиков Хенкеля и  $\delta M(H)$  изотропных магнитотвердых нанокристаллических сплавов;
- 4) для нанокристаллических сплавов со случайной магнитной анизотропией и сильным межзеренным обменным взаимодействием установить влияние распределения зерен по размерам на зависимости коэрцитивной силы от среднего размера зерен.

### **Методология и методы исследования**

Компьютерное моделирование являлось основным методом достижения поставленных в работе целей и задач. Оно включало в себя: молекулярную динамику, построения многогранников Вороного с учетом весовых коэффициентов, кинетический метод Монте-Карло, моделирование по алгоритму Метрополиса и микромагнитное моделирование. Также задействованы аналитические выкладки в рамках теории среднего поля.

Для экспериментальной апробации отдельных расчетных результатов был получен нанокристаллический сплав  $\text{Nd}_2(\text{Fe}_{0,8}\text{Co}_{0,2})_{14}\text{B}$  методом быстрой закалки с последующим кристаллизационным отжигом. Для аттестации сплава использовались рентгеноструктурный анализ и сканирующая электронная микроскопия. Прецизионная магнитометрия образцов сплава выполнена на

измерительных комплексах PPMS-14 и MPMS XL 7 с функцией горизонтального ротатора. В том числе использовался вибрационный магнитометр.

### **Научная новизна работы**

Разработана оригинальная компьютерная программа, позволяющая рассчитывать квазистатические и динамические процессы перемагничивания полидисперсных нанокристаллических сплавов с учетом межзеренного обменного и магнитостатического взаимодействий и термических флуктуаций магнитных моментов зерен.

Для изотропных нанокристаллических сплавов впервые изучены зависимости магнитных восприимчивостей в состоянии остаточной намагниченности от величины межзеренного обменного взаимодействия. Рассматривались магнитные восприимчивости в параллельном и перпендикулярном направлениях относительно остаточной намагниченности. В приближении среднего поля выведены формулы, описывающие вышеуказанные зависимости при слабом межзеренным обменным взаимодействием, а также установлено, как эти зависимости изменяются при наличии дисперсии размера зерен и магнитостатического взаимодействия.

Предложен новый метод оценки эффективной константы магнитной анизотропии и константы межзеренного обменного взаимодействия в высокоанизотропных нанокристаллических сплавах на основе измерений продольной и поперечной магнитных восприимчивостей в состоянии остаточной намагниченности.

Изучены изменения графиков Хенкеля и зависимостей  $\delta M(H)$  изотропных магнитотвердых нанокристаллических сплавов, обусловленные межзеренным обменным и магнитостатическим взаимодействиями. Впервые предложено феноменологическое выражение, устанавливающее связь между максимумом  $\delta M(H)$  и следующими величинами: средним значением и дисперсией размера зерен, константой магнитной анизотропии и константой межзеренного обменного взаимодействия.

Изучены зависимости коэрцитивной силы  $H_c$  от среднего размера зерен  $\langle D \rangle_V$  в нанокристаллических сплавах с сильным межзеренным обменным взаимодействием и случайной магнитной анизотропией. Впервые продемонстрировано, что при дисперсии размера зерен имеет место соотношение  $H_c \propto \langle D \rangle_V^n$ , в котором показатель степени  $n < 6$ . Установлена зависимость  $n$  от среднеквадратического отклонения размера зерен.

### **Положения, выносимые на защиту**

1. Выражения, устанавливающие для монодисперсных нанокристаллических сплавов, находящихся в состоянии остаточной намагниченности и

имеющих случайную ориентацию осей легкого намагничивания, зависимости продольной и поперечной магнитных восприимчивостей от параметра межзеренного обменного взаимодействия в промежутке  $\alpha \in [0; 0,3]$ .

2. Зависимости продольной и поперечной магнитных восприимчивостей от параметра межзеренного обменного взаимодействия в промежутке  $\langle \alpha \rangle_V \in [0; 1,5]$ , полученные с учетом магнитоэлектронного взаимодействия между зернами и дисперсии их размера.
3. Метод оценки эффективной константы магнитной анизотропии и константы межзеренного обменного взаимодействия в нанокристаллических сплавах, основанный на измерениях продольной и поперечной магнитных восприимчивостей в состоянии остаточной намагниченности.
4. Обоснование необходимости совокупного учета параметра межзеренного обменного взаимодействия, дисперсии размера зерен, параметра магнитоэлектронного взаимодействия  $\beta = M_S^2/K$  и размагничивающего фактора при интерпретации графиков Хенкеля и зависимостей  $\delta M(H)$  нанокристаллических сплавов со случайной ориентацией осей легкого намагничивания.
5. Феноменологическое выражение, устанавливающее связь между максимумом  $\delta M(H)$  и следующими величинами: средним размером зерен, его СКО  $\sigma_V/\langle D \rangle_V$ , константой магнитной анизотропии и константой межзеренного обменного взаимодействия. Выражение применимо при  $\sigma_V/\langle D \rangle_V \leq 0,3$  и условии  $\beta < 0,03$ .
6. Зависимости коэрцитивной силы  $H_c$  полидисперсных нанокристаллических сплавов со случайной магнитной анизотропией от среднего размера зерен  $\langle D \rangle_V$  вида  $H_c \propto \langle D \rangle_V^n$  с показателем степени  $n < 6$  и зависимость  $n$  от СКО размера зерен в промежутке  $\sigma_V/\langle D \rangle_V \in [0; 0,15]$ .

### **Теоретическая и практическая значимость работы**

Результаты данной работы способствуют развитию теоретических представлений о связи макроскопических магнитных гистерезисных свойств нанокристаллических сплавов с их микроструктурными параметрами и локальными взаимодействиями, в частности, межзеренным обменным взаимодействием. В том числе, данная работа вносит вклад в разработку современных методов компьютерного моделирования процессов перемагничивания в нанокристаллических сплавах.

Практическое значение имеет предложенный метод оценки эффективной константы магнитной анизотропии и константы межзеренного обменного взаимодействия в высокоанизотропных нанокристаллических сплавах с одноосной магнитной анизотропией. Полученные результаты для графиков Хенкеля и

зависимостей  $\delta M(H)$  не менее важны для распространения на практике количественного анализа данных зависимостей.

### **Степень достоверности**

Обсуждаемые в работе численные результаты получены с помощью разработанной автором компьютерной программы. Проверка корректности ее функционирования проводилась на задачах с известными решениями, выполнялись сравнительные расчеты в независимых программах и микромагнитном пакете ООММФ, надежность которого признана научным сообществом. Отдельные аналитические выкладки, представленные в работе, проверялись путем символьных вычислений. Ряд расчетных данных при слабом обменном взаимодействии между зернами соотносится с прогнозами теории среднего поля, при сильном обменном взаимодействии – с моделью случайной магнитной анизотропии.

Результаты исследований согласуются между собой. Их достоверность подкрепляется систематическим характером исследований, использованием аттестованных образцов и современного экспериментального оборудования.

### **Личный вклад автора**

Формулировка цели и задач исследования проводилась автором совместно с научным руководителем Кудреватых Николаем Владимировичем.

Автором реализована генерация ансамблей полиэдров с применением молекулярной динамики и построений многогранников Вороного. Автором также написаны компьютерная программа в среде MATLAB и программа на языке Fortran, реализующие алгоритм Метрополиса и кинетический метод Монте-Карло соответственно. В обсуждении методического обеспечения последней из двух программ принимали участие Р. Шантрел и С. Рута (S. Ruta) (Университет Йорка, Великобритания). Автором лично выполнен весь объем вычислений, представленных в работе. В том числе проведен анализ магнитных восприимчивостей в состоянии остаточной намагниченности в рамках теории среднего поля. Автором сформулирована идея о методе оценки константы межзеренного обменного взаимодействия на основе измерений магнитных восприимчивостей в состоянии остаточной намагниченности. Анализ результатов исследования коэрцитивной силы полидисперсных нанокристаллических сплавов проводился совместно с С.В. Комогорцевым (Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, г. Красноярск).

Синтез быстрозакаленного сплава  $Nd_2(Fe_{0,8}Co_{0,2})_{14}B$  выполнен С.В. Андреевым в Уральском федеральном университете (УрФУ). Его рентгеноструктурный анализ проведен Н.В. Селезневой (УрФУ). Данные сканирующей электронной микроскопии предоставил А.С. Волегов, им же выполнены измерения

магнитных свойств образцов сплава на измерительных комплексах PPMS 14 и MPMS XL 7 (IFW, г. Дрезден, Германия; УрФУ). Измерения на вибрационном магнитометре зависимостей  $\delta M(H)$  для образцов сплава провел И.В. Алексеев (УрФУ).

### **Апробация результатов**

Основные результаты работы представлялись и обсуждались на объединенных научных семинарах Отдела магнетизма твердых тел НИИ ФПМ и Кафедры магнетизма и магнитных наноматериалов ИЕНиМ УрФУ, а также на международных и всероссийских конференциях, симпозиумах и школах, среди которых: Всероссийские школы-семинары по проблемам физики конденсированного состояния вещества (г. Екатеринбург, Россия, 2018 г.; 2014 г.; 2012 г.; 2011 г.), International Workshops on Rare-Earth and Future Permanent Magnets and Their Applications (г. Пекин, Китай, 2018 г.; г. Дармштадт, Германия, 2016 г.), Международная конференция «Новое в магнетизме и магнитных материалах» (г. Москва, Россия, 2018 г.), Moscow International Symposiums on Magnetism (г. Москва, Россия; 2017 г.; 2014 г.), Международные конференции по постоянным магнитам (г. Суздаль, Россия, 2017 г.; 2015 г.; 2013 г.), Байкальская международная конференция «Магнитные материалы. Новые технологии» (г. Иркутск, Россия, 2012 г.), The International Symposium on Hysteresis Modeling and Micromagnetics (г. Яссы, Румыния, 2015 г.), International Baltic Conference on Magnetism: Focus on Biomedical Aspects (г. Светлогорск, Россия, 2015 г.), The European Conference Physics of Magnetism (г. Познань, Польша, 2014 г.), Euro-Asian Symposium «Trends in Magnetism» (г. Владивосток, Россия, 2013 г.), International Symposium on Metastable, Amorphous and Nanostructured Materials (г. Москва, Россия, 2012 г.).

### **Публикации**

По теме диссертации опубликовано 27 печатных работ, в том числе 3 – в изданиях, включенных в Перечень рецензируемых научных изданий, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией при Министерстве науки и высшего образования РФ; получено 1 свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ; 23 – тезисы докладов российских и международных конференций. Перечень основных публикаций приведен в конце автореферата.

### **Структура и объем диссертации**

Диссертация включает в себя список сокращений и условных обозначений, введение, пять глав, заключение и список цитируемой литературы. Общий объем работы составляет 132 страницы, включая 42 рисунка, 2 таблицы, 56 формул и список использованных источников из 115 наименований.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Во введении** обоснована актуальность исследования, выполнена постановка цели и задач работы, показана научная новизна исследования и сформулированы основные положения, выносимые на защиту.

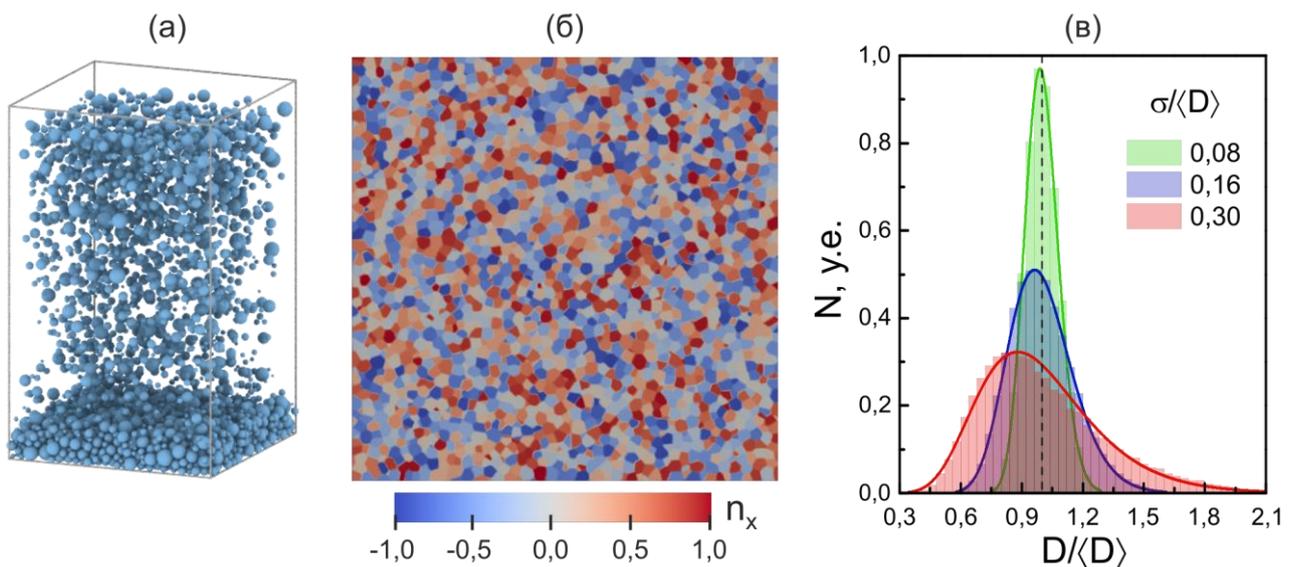
**Первая глава** представляет собой обзор литературы по теме диссертации. В ней описаны магнитные гистерезисные свойства ансамбля частиц в рамках классической модели Стонера-Вольфарта, приведены обобщения, позволяющие учесть для ансамбля: обменное и магнитостатическое взаимодействия между частицами; термические флуктуации магнитных моментов частиц; магнитную анизотропию частиц, отличную от одноосной; динамический режим перемагничивания частиц. Подробно рассмотрены алгоритм Метрополиса и Кинетический метод Монте Карло (КМК) [9]. Также представлены результаты исследований нанокристаллических сплавов, выполненных с использованием двух методик, базирующихся на модели Стонера-Вольфарта. Первая из этих методик – измерения магнитных восприимчивостей в продольном и поперечном направлениях относительно прикладываемого внешнего магнитного поля [4], а вторая – построения графиков Хенкеля и родственных им зависимостей  $\delta m(H)$  [5].

**Во второй главе** описана компьютерная модель нанокристаллического сплава. Модель представляет собой полидисперсный ансамбль плотно сочлененных полиэдров (зерен), формируемый в два этапа. На первом этапе, используя пакет для молекулярной динамики LAMMPS, выполнялось постепенное высыпание в контейнер и релаксация более 60.000 сферических частиц с заданным распределением диаметров (рис. 1 (а)). На втором этапе на основе координат центров сфер выполнялись построения многогранников Вороного с учетом периодических граничных условий и весовых коэффициентов, которыми выступали диаметры сфер (рис. 1 (б)). Для данных построений использовалась библиотека VORO++. В созданных таким способом ансамблях гистограммы характерного размера полиэдров  $D \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt[3]{V}$  хорошо описывались логнормальной функцией распределения (рис. 1 (в)). Полагалось, что размер зерен модельного сплава в достаточной степени мал ( $D < 10,2 \cdot \sqrt{A/(4\pi M_s^2)}$ ), чтобы приближение макроспинов и допущение о перемагничивании путем когерентного вращения намагниченности были применимы. Работа ограничивалась рассмотрением случая, когда зерна сплава имели одноосную магнитную анизотропию со случайной ориентацией осей легкого намагничивания (ОЛН). В главе описано, как учитывались магнитостатическое и обменное взаимодействия между зернами. Энергия последнего из двух формализована в виде:  $E_{ex} = -J_{int} S_{ij} (\vec{m}_i \cdot \vec{m}_j)$ , где  $J_{int}$  –

константа межзеренного обменного взаимодействия,  $S_{ij}$  – площадь контакта между частицами  $i$  и  $j$ ,  $\vec{m}_{i,j}$  – нормированные намагниченности частиц. В этой же главе введены безразмерные величины: **параметр межзеренного обменного взаимодействия**  $\alpha \stackrel{\text{def}}{=} J_{int}S/(KV)$ , где  $S$  и  $V$  – площадь поверхности и объем зерна,  $K$  – константа магнитной анизотропии, и **параметр магнитостатического взаимодействия**  $\beta = M_s^2/K$ , где  $M_s$  – намагниченность насыщения. Далее  $\beta = 0$  будет обозначать отсутствие магнитостатического взаимодействия между зернами.

Расчет процесса перемагничивания ансамблей зерен проводился в разработанной программе методом КМК. Отладка программы выполнена на серии тестовых расчетов для монодисперсных невзаимодействующего и обменно связанного ансамблей. Результаты этих расчетов соответствуют известным аналитическим и численным данным для ансамбля Стонера-Вольфарта и результатам моделирования в микромагнитном пакете OOMMF.

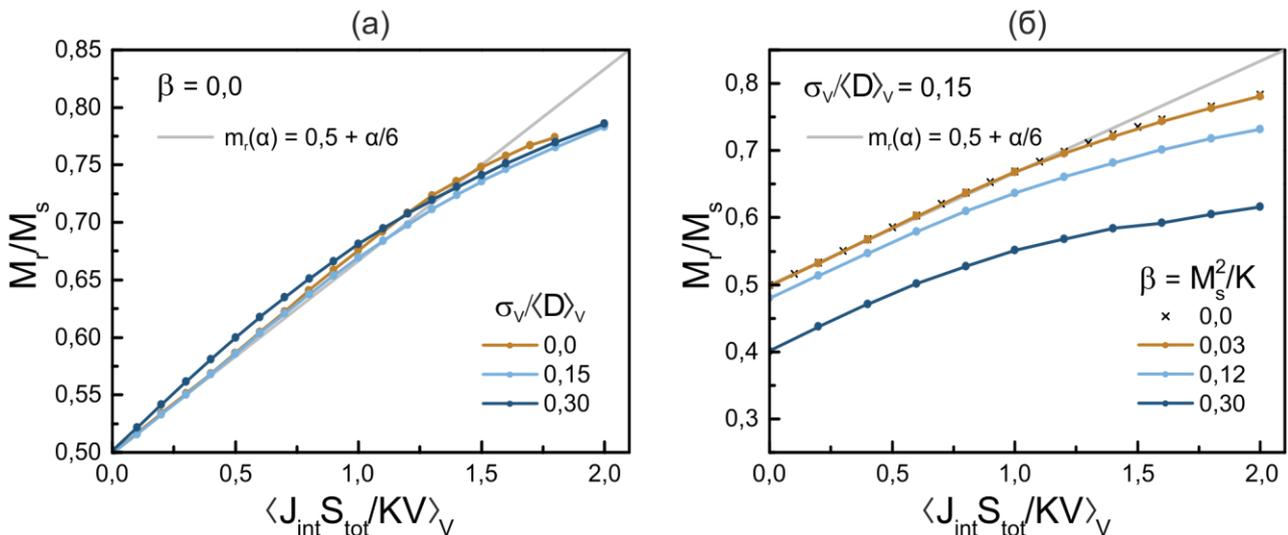
В главе описан экспериментально полученный методом быстрой закалки с последующим кристаллизационным отжигом нанокристаллический сплав состава  $\text{Nd}_2(\text{Fe}_{0,8}\text{Co}_{0,2})_{14}\text{B}$ . Представлены результаты анализа микроструктуры этого сплава методами рентгеноструктурного анализа и сканирующей электронной микроскопии. Магнитные измерения образцов сплава выполнены на вибрационном магнитометре и измерительных комплексах PPMS-14 и MPMS-XL-7 с функцией горизонтального ротатора.



**Рисунок 1** – Моделирование с помощью молекулярной динамики высыпания сферических частиц в контейнер (а). Полидисперсный ансамбль плотносочлененных полиэдров в сечении (б); цветовая гамма частиц соответствует проекции ОХ единичного вектора  $\vec{n}$ , коллинеарного ОЛН. Распределения характерного размера зерен  $D$  модельных нанокристаллических сплавов с различными среднеквадратическими отклонениями размера зерен  $\sigma/\langle D \rangle$  (в); сплошные линии соответствуют аппроксимациям логнормальной функции распределения.

В третьей главе представлены результаты экспериментальных и компьютерных исследований остаточной намагниченности и магнитных восприимчивостей высокоанизотропных нанокристаллических сплавов.

Зависимости нормированной остаточной намагниченности  $m_r = M_r/M_s$  от средневзвешенного по объему параметра межзеренного обменного взаимодействия  $\langle\alpha\rangle_V$  приведены на рисунке 2. Эти зависимости установлены при варьировании среднеквадратического отклонения (СКО) размера зерен  $\sigma_V/\langle D\rangle_V$  и параметра магнитостатического взаимодействия  $\beta$ . Для ансамблей с небольшой дисперсией размера зерен и слабым межзеренным обменным взаимодействием ( $\langle\alpha\rangle_V < 0,5$ ) зависимость  $m_r(\langle\alpha\rangle_V)$  хорошо описывается в рамках приближения среднего поля:  $m_r(\langle\alpha\rangle_V) = 0,5 + \langle\alpha\rangle_V/6$ . При дальнейшем увеличении  $\langle\alpha\rangle_V$  наблюдается снижение  $m_r$  относительно данного линейного закона, что связано с асимптотическим видом зависимости  $m_r(\langle\alpha\rangle_V)$  ( $m_r \rightarrow 1$  при  $\langle\alpha\rangle_V \rightarrow \infty$ ). Влияние распределения частиц по размеру на зависимости  $m_r(\langle\alpha\rangle_V)$  становится выраженным только начиная с определенного значения  $\langle\alpha\rangle_V$  (рис. 2 (а)), например, для  $\sigma_V/\langle D\rangle_V = 0,15$  только при  $\langle\alpha\rangle_V > 0,75$  наблюдается снижение  $m_r$  относительно соответствующих значений монодисперсного ансамбля. При больших СКО размера зерен отклонения  $m_r(\langle\alpha\rangle_V)$  происходят уже при малых  $\langle\alpha\rangle_V$ , как это продемонстрировано для  $\sigma_V/\langle D\rangle_V = 0,3$ . Существенным является влияние магнитостатического взаимодействия на  $m_r(\langle\alpha\rangle_V)$ : зависимость сохраняет свой характерный вид, но смещается в сторону меньших значений (рис. 2 (б)).



**Рисунок 2** – Расчетные зависимости нормированной остаточной намагниченности изотропного нанокристаллического сплава от величины средневзвешенного по объему параметра межзеренного обменного взаимодействия  $\langle\alpha\rangle_V = \langle J_{int} S / KV \rangle_V$ . Зависимости слева (а) вычислены для разных СКО размера частиц  $\sigma_V/\langle D\rangle_V$  при отсутствии магнитостатического взаимодействия между ними ( $\beta = 0$ ). Графики справа (б) получены для ансамбля с  $\sigma_V/\langle D\rangle_V = 0,15$  и  $N = 4\pi/3$  при варьировании параметра магнитостатического взаимодействия  $\beta = M_s^2/K$ .

В данной главе в рамках приближения среднего поля ( $\alpha \ll 1$ ) были рассмотрены магнитные восприимчивости высокоанизотропного сплава в состоянии остаточной намагниченности в продольном ( $\chi_p$ ) и поперечном ( $\chi_t$ ) направлениях относительно  $m_r$ . Аналитически получены формулы для магнитных восприимчивостей как отдельных частиц:

$$\chi_p(\theta_n) = 12\chi_0 \frac{\left(1 + \alpha \frac{\chi_p}{3\chi_0}\right) \sin^2 \theta_n}{\left(2 + \left(\frac{\alpha}{2} + \frac{\alpha^2}{6}\right) \cos \theta_n\right)^3}, \quad (1)$$

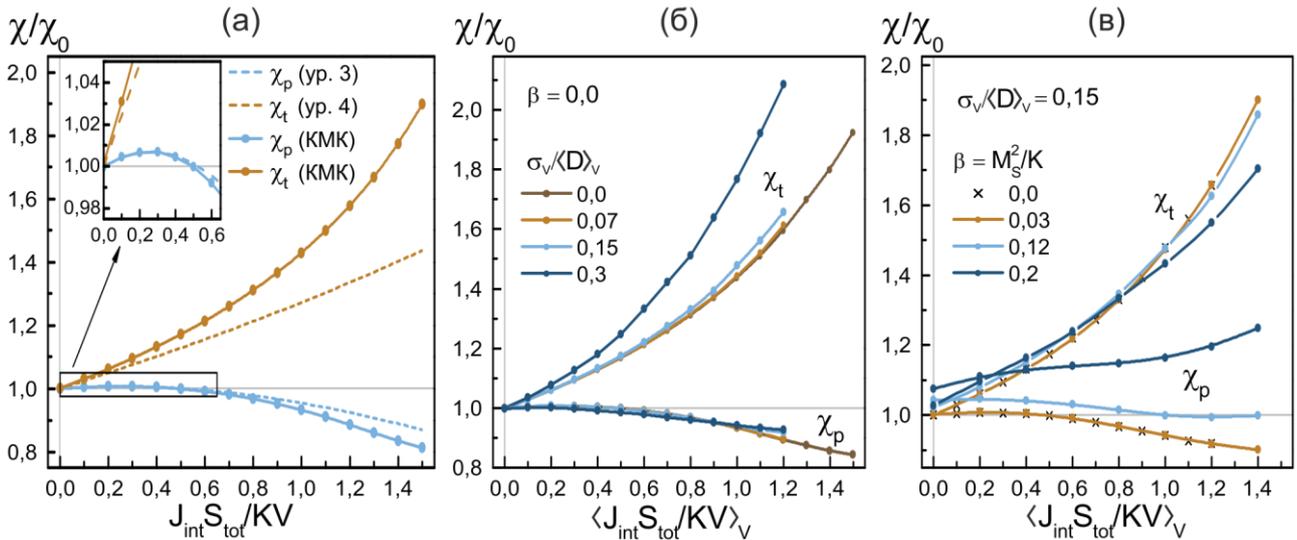
$$\chi_t(\theta_n, \psi_n) = \frac{3\chi_0 \left(1 + \alpha \frac{\chi_t}{3\chi_0}\right)}{2 + \left(\frac{\alpha}{2} + \frac{\alpha^2}{6}\right) \cos \theta_n} \left(1 - \frac{2 \sin^2 \theta_n \cos^2 \psi_n}{2 + \left(\frac{\alpha}{2} + \frac{\alpha^2}{6}\right) \cos \theta_n}\right), \quad (2)$$

где  $(\theta_n, \psi_n)$  – координаты ОЛН частицы в сферической системе координат, ось Z которой сонаправлена с  $m_r$  ансамбля зерен,  $\chi_0 = M_S^2/(3K)$ ; так и для изотропного ансамбля зерен в целом:

$$\chi_p = \frac{3\chi_0}{2\gamma^3 \left(1 + \frac{\gamma^2}{2} - \frac{1}{1+\gamma} - \ln(1+\gamma)\right)^{-1} - \alpha}, \quad (3)$$

$$\chi_t = \frac{3\chi_0}{2\gamma^3 \left(\gamma - \frac{\gamma^2}{2} - (1-\gamma^2) \ln(1+\gamma)\right)^{-1} - \alpha}, \quad (4)$$

где  $\gamma = \alpha/4 + \alpha^2/12$ . Выведенные выражения в предельном переходе  $\alpha \rightarrow 0$  преобразуются в формулы Аарони [5]. Зависимости (3) и (4) представлены на рисунке 3 (а) пунктирными линиями. Примечательно, что  $\chi_p(\alpha)$  оказалась немонотонной функцией, то есть сначала наблюдается незначительный рост восприимчивости, а лишь затем следует ее уменьшение при увеличении параметра межзеренного обменного взаимодействия (вставка рис. 3 (а)). Зависимость  $\chi_t(\alpha)$  является монотонно возрастающей. Для сравнения на рисунке представлены зависимости  $\chi_{p,t}(\alpha)$ , полученные численно методом КМК для монодисперсного ансамбля при  $\beta = 0$ . Можно заключить, что вплоть до  $\alpha \leq 0,3$  аналитические выражения описывают магнитные восприимчивости изотропного ансамбля в состоянии остаточной намагниченности с точностью до 2%. Поэтому для количественного анализа магнитных восприимчивостей при  $\alpha > 0,3$  необходимо руководствоваться результатами компьютерного моделирования.



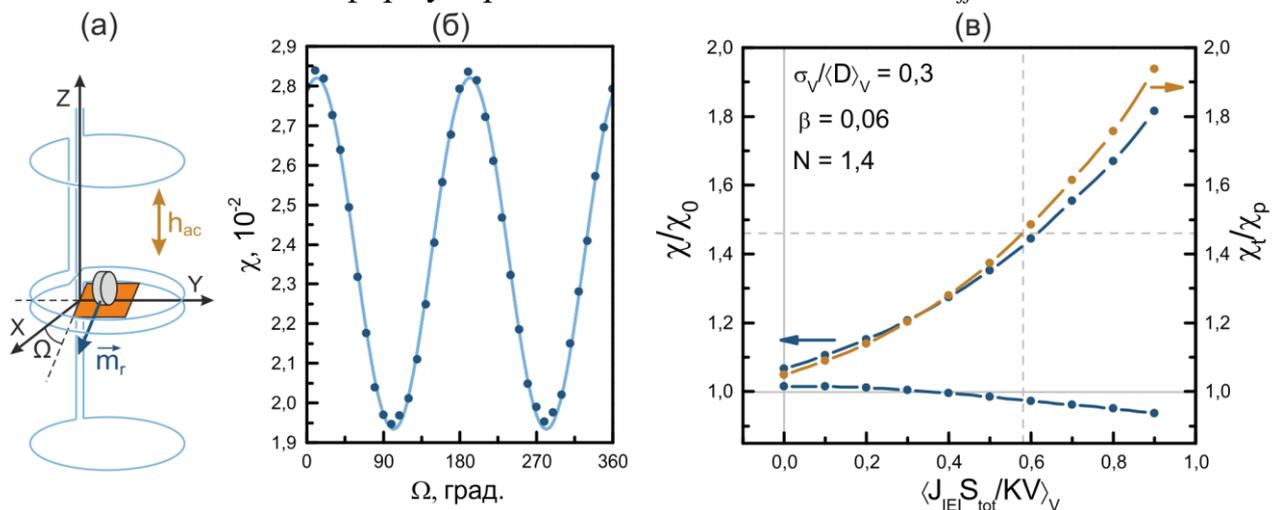
**Рисунок 3** – Зависимости продольной  $\chi_p$  и поперечной  $\chi_t$  магнитных восприимчивостей монодисперсного ансамбля, находящегося в состоянии остаточной намагниченности, от параметра межзеренного обменного взаимодействия  $\alpha = J_{int} S/KV$ , полученные аналитически согласно выражениям (3) и (4) и численно в рамках КМК метода (а).  $\chi_{p,t}(\langle \alpha \rangle_V)$ , вычисленные для разных СКО размера зерен  $\sigma_V/\langle D \rangle_V$  при  $\beta = 0$  (б).  $\chi_{p,t}(\langle \alpha \rangle_V)$ , вычисленные для полидисперсного ансамбля с  $\sigma_V/\langle D \rangle_V = 0,15$  при  $N = 4\pi/3$  и разных параметрах магнитостатического взаимодействия  $\beta = M_S^2/K$ .

Проанализировано влияние на магнитные восприимчивости распределения зерен по размерам и магнитостатического взаимодействия между ними. Зависимости  $\chi_{p,t}(\langle \alpha \rangle_V)$  полидисперсных ансамблей при  $\beta = 0$  представлены на рисунке 3 (б). При малых дисперсиях размера зерен ( $\sigma_V/\langle D \rangle_V = 0,07$ ) магнитные восприимчивости в пределах погрешностей не отличаются от таковых для монодисперсного ансамбля. Дальнейшее увеличение  $\sigma_V/\langle D \rangle_V$  приводит к росту поперечной магнитной восприимчивости, что наиболее выражено для  $\sigma_V/\langle D \rangle_V = 0,3$  (рис. 3(б)). Продольная магнитная восприимчивость при этом меняется незначительно. Влияние магнитостатического взаимодействия на восприимчивости продемонстрировано на рисунке 3 (v) для ансамбля с  $\sigma_V/\langle D \rangle_V = 0,15$  при  $N = 4\pi/3$ . При  $\beta < 0,03$  магнитные восприимчивости в пределах погрешности не отличаются от таковых, вычисленных при отсутствии магнитостатического взаимодействия. Увеличение параметра магнитостатического взаимодействия в большей степени сказывается на продольной магнитной восприимчивости. Ее зависимость от  $\langle \alpha \rangle_V$  смещается в сторону больших значений, а при достаточно больших  $\beta$  изменяется ее характер, то есть она становится монотонно возрастающей. Следует отметить, что имеются интервалы значений  $\langle \alpha \rangle_V$ , в которых поперечная магнитная восприимчивость меньше продольной. В этих интервалах магнитостатическое взаимодействие превалирует над обменным, что также отражается в существенном снижении остаточной намагниченности  $m_r < 0,5$ .

Образец быстрозакаленного изотропного сплава  $\text{Nd}_2(\text{Fe}_{0,8}\text{Co}_{0,2})_{14}\text{V}$  выбран в качестве объекта для анализа гистерезисных явлений в нем с использованием вышеописанных результатов. Его параметры:  $\langle D \rangle = 45$  нм,  $\sigma/\langle D \rangle \approx 0,3$ ,  $M_S = 1250$  Гс,  $N \approx 1,4$ . Схема постановки эксперимента представлена на рисунке 4 (а). Зависимость магнитной восприимчивости образца, находящегося в состоянии остаточной намагниченности, от угла поворота ротатора  $\Omega$  представлена на рисунке 4 (б). В силу осевой симметрии в плоскости  $XZ$ , которая задается вектором остаточной намагниченности (рис. 4 (а)), данная зависимость может быть успешно описана выражением:

$$\chi(\Omega) = \chi_p + (\chi_t - \chi_p) \cos^2(\Omega - \delta) \quad (5)$$

где  $\chi_p$  и  $\chi_t$  – продольная и поперечная магнитные восприимчивости образца соответственно, принимающие значения:  $\chi_p = 1,93 \cdot 10^{-2}$  и  $\chi_t = 2,82 \cdot 10^{-2}$ . Данные результаты были интерпретированы на основе компьютерного моделирования (рис. 4 (в)), что позволило определить значение  $\alpha = 0,58$  и эффективную константу магнитной анизотропии  $K_{eff} = 26,2 \cdot 10^6$  эрг/см<sup>3</sup>. При  $\alpha = 0,58$  расчеты прогнозируют нормированную остаточную намагниченность, равную  $m_r \approx 0,63$ , что хорошо соотносится с экспериментальным значением 0,59. Пользуясь выражением  $J_{int} = \alpha \langle D \rangle K_{eff} / 6$ , была выполнена оценка константы межзеренного обменного взаимодействия  $J_{int}$  в сплаве  $\text{Nd}_2(\text{Fe}_{0,8}\text{Co}_{0,2})_{14}\text{V}$ , что дало  $J_{int} = 11$  эрг/см<sup>2</sup>. На основе полученных данных для нанокристаллических высокоанизотропных сплавов может быть сформулирован новый метод оценки  $K_{eff}$  и  $J_{int}$ .



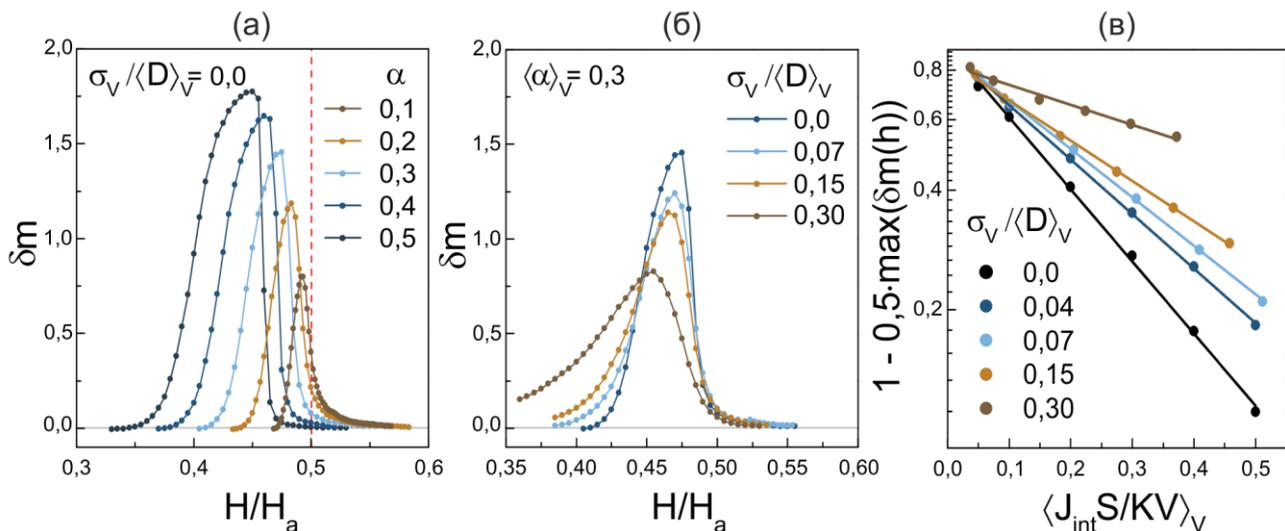
**Рисунок 4** – Схема постановки эксперимента по измерению магнитной восприимчивости (а). Зависимость магнитной восприимчивости образца нанокристаллического сплава  $\text{Nd}_2(\text{Fe}_{0,8}\text{Co}_{0,2})_{14}\text{V}$  от угла поворота ротатора  $\Omega$  (б). Сплошная линия соответствует аппроксимации согласно выражению (5). Расчетные зависимости продольной и поперечной магнитных восприимчивостей от параметра межзеренного обменного взаимодействия при  $\sigma_V/\langle D \rangle_V = 0,3$ ,  $\beta = 0,06$  и  $N = 1,4$  (в).

**Четвертая глава** содержит результаты исследования причинно-следственных связей, формирующих вид графиков Хенкеля и зависимостей  $\delta m(h)$  высокоанизотропных нанокристаллических сплавов со случайной ориентацией ОЛН.

Для монодисперсного и полидисперсных ансамблей СКО размера зерен которых  $\sigma_V / \langle D \rangle_V \leq 0,3$ , получены графики Хенкеля и зависимости  $\delta m(h)$  при варьировании среднего параметра межзеренного обменного взаимодействия в промежутке  $\langle \alpha \rangle_V \in [0; 0,5]$  (рис 5 (а,б)). Все зависимости  $\delta m(h)$  представляют собой колоколообразные кривые, максимум которых растет с увеличением  $\langle \alpha \rangle_V$ , а положение смещается в сторону меньших полей, начиная со значения  $0,5H_a$  (пунктир на рис. 5 (а)). Увеличение дисперсии размера зерен наоборот приводит к существенному снижению максимума  $\delta m(h)$ , при этом его положение также смещается в меньшие поля. Максимум графика  $\delta m(h)$ , как функция от параметра межзеренного обменного взаимодействия, имеет ограниченную область значений  $[0; 2]$ , причем 0 имеет место при  $\alpha = 0$ , а 2 достигается асимптотически при  $\alpha \rightarrow \infty$ . Для описания этой функции предложено феноменологическое выражение:

$$\max(\delta m) = 2 \cdot [1 - e^{-b \cdot \alpha}] \quad (6)$$

где  $b$  – безразмерный коэффициент, который не зависит от средних значений магнитных характеристик ансамбля ( $K$  и  $J_{int}$ ) и размера зерен  $D$ , но зависит от их дисперсии, в частности  $\sigma_V / \langle D \rangle_V$ . Расчетные данные с хорошей точностью удовлетворяют выражению (6) (рис. 5 (в)).

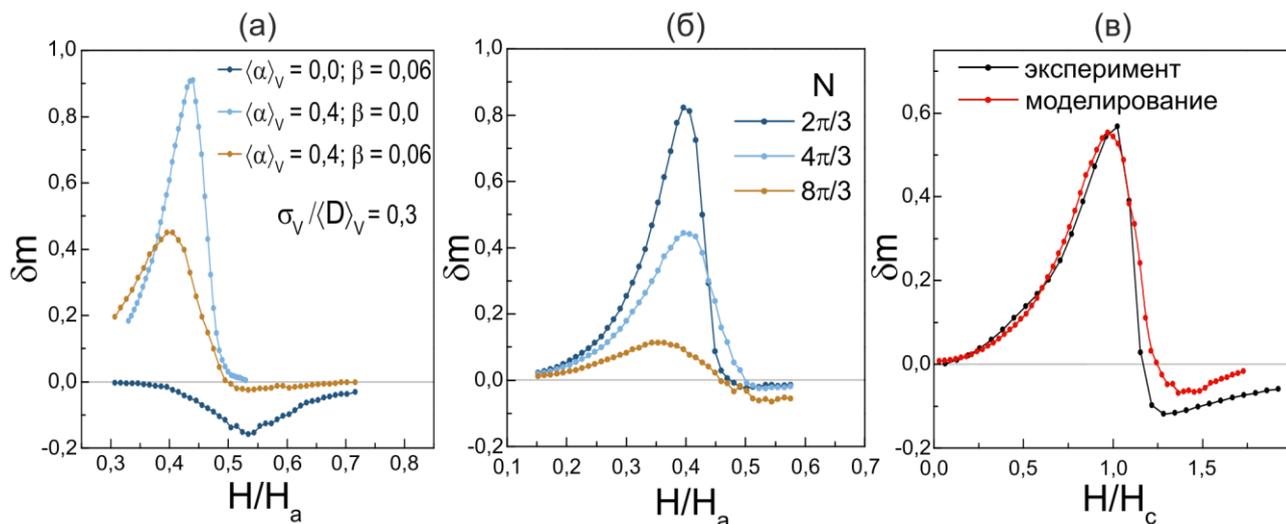


**Рисунок 5** – Зависимости  $\delta m(h)$  для монодисперсного ансамбля при разных параметрах межзеренного обменного взаимодействия  $\alpha$  (а) и для полидисперсных ансамблей с  $\langle \alpha \rangle_V = 0,3$  и разными СКО размера зерен  $\sigma_V / \langle D \rangle_V$  (б). Зависимости  $1 - 0,5 \cdot \max(\delta m(h))$  от  $\langle \alpha \rangle_V$  полидисперсных ансамблей (в), где сплошные линии – аппроксимации согласно формуле (6).

На рисунке б (а) представлены расчетные зависимости  $\delta m(h)$  для полидисперсного ансамбля с  $\sigma_V / \langle D \rangle_V = 0,3$ , полученные при наличии только

магнитостатического взаимодействия, только межзеренного обменного взаимодействия и при учете обоих взаимодействий. В первом случае наблюдается минимум  $\delta m(h)$ , во втором – максимум. Примечательно, что их положения разнесены по значениям напряженности магнитного поля. Поэтому на практике при комбинации взаимодействий присутствует как характерная положительная область в малых полях, так и менее выраженная отрицательная в больших полях. При этом в случае, когда к обменному взаимодействию добавляется магнитостатическое, значение максимума  $\delta m(h)$  существенно снижается. В не меньшей степени на зависимости  $\delta m(h)$  влияет размагничивающий фактор  $N$  (рис. 6 (б)).

С учетом всех выявленных факторов, влияющих на вид зависимостей  $\delta m(h)$ , опробовано описание экспериментальных графиков образца быстрозакаленного сплава  $\text{Nd}_2(\text{Fe}_{0,8}\text{Co}_{0,2})_{14}\text{B}$  с  $N \approx 1,87$ . Варьирование до наилучшего совпадения расчетной кривой  $\delta m(h)$  с экспериментальной выполнялось только по двум величинам: параметру межзеренного обменного взаимодействия  $\langle \alpha \rangle_V$  и параметру магнитостатического взаимодействия  $\beta$ . Наилучшее совпадение достигнуто при  $\langle \alpha \rangle_V = 0,41$  и  $\beta = 0,12$ , соответствующая расчетная зависимость представлена на рисунке 6 (в).

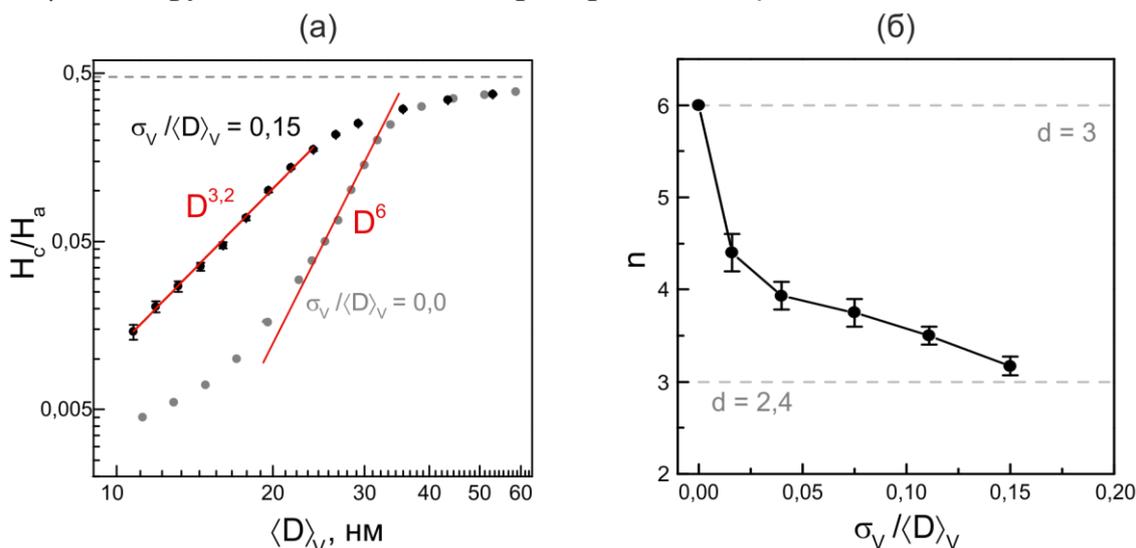


**Рисунок 6** – Зависимости  $\delta m(h)$  полидисперсного ансамбля с  $\sigma_V / \langle D \rangle_V = 0,3$ , полученные при наличии только магнитостатического взаимодействия ( $\langle \alpha \rangle_V = 0,0$ ,  $\beta = 0,06$ ,  $N = 4\pi/3$ ), только межзеренного обменного взаимодействия ( $\langle \alpha \rangle_V = 0,4$ ,  $\beta = 0,0$ ) и при учете обоих взаимодействий ( $\langle \alpha \rangle_V = 0,4$ ,  $\beta = 0,06$ ,  $N = 4\pi/3$ ) (а). Для того же ансамбля зависимости  $\delta m(h)$  при  $\langle \alpha \rangle_V = 0,4$  и  $\beta = 0,06$ , но разных размагничивающих факторах  $N$  (б). Экспериментальная зависимость  $\delta m(h)$  для нанокристаллического сплава  $\text{Nd}_2(\text{Fe}_{0,8}\text{Co}_{0,2})_{14}\text{B}$  ( $M_S = 1250$  Гс;  $\sigma / \langle D \rangle \approx 0,3$ ;  $N \approx 1,87$ ) и соответствующая расчетная зависимость, наилучшим образом описывающая экспериментальную при  $\langle \alpha \rangle_V = 0,41$  и  $\beta = 0,12$  (в).

**Пятая глава** посвящена исследованию коэрцитивной силы полидисперсных ансамблей со случайной магнитной анизотропией путем моделирования КМК методом при  $\beta = 0$ . Для расчетов выбраны следующие константы:  $J_{int} = 1$

эрг/см<sup>2</sup>,  $M_S = 1000$  Гс и  $K = 10^6$  эрг/см<sup>3</sup>. Средневзвешенный по объему размер зерен  $\langle D \rangle_V$  варьировался от 10 до 70 нм.

Для изотропного монодисперсного ансамбля зависимость коэрцитивной силы от размера зерна  $H_c(D)$  представлена на рисунке 7 (а). При больших значениях  $D$  коэрцитивная сила асимптотически стремится к предельному значению – коэрцитивной силе ансамбля Стонера-Вольфарта  $0,479 \cdot H_a$ . При уменьшении размера зерна, в промежутке  $D \in [22,4 \text{ нм}; 32 \text{ нм}]$ , наблюдается степенная зависимость  $H_c \propto D^6$ . На рисунке 7 (а) также для примера приведена зависимость  $H_c(\langle D \rangle_V)$  полидисперсного ансамбля с  $\sigma_V / \langle D \rangle_V = 0,15$ . В области больших  $\langle D \rangle_V$ , а именно при  $\langle D \rangle_V > 40$  нм, коэрцитивная сила полидисперсных ансамблей незначительно отличается от таковой у монодисперсного ансамбля и демонстрирует такое же асимптотическое поведение. При  $\langle D \rangle_V \leq 40$  нм дисперсия размера зерен в ансамбле приводит к увеличению коэрцитивной силы, и чем больше СКО размера зерен при неизменном  $\langle D \rangle_V$  – тем больше значение  $H_c$ . Для всех полидисперсных ансамблей наблюдались протяженные интервалы  $\langle D \rangle_V$ , в которых выполняется степенная зависимость вида  $H_c \propto D^n$  с показателем, существенно отличным от 6. Показатель степенной зависимости  $H_c \propto D^n$  как функция СКО размера зерен  $\sigma_V / \langle D \rangle_V$  полидисперсных ансамблей представлен на рисунке 7 (б). Имеет место резкое снижение  $n$ , которое сменяется плавным уменьшением при дальнейшем увеличении  $\sigma_V / \langle D \rangle_V$ , достигающим значений, близких к 3. В главе продемонстрировано, что на величину  $n$  может оказывать влияние не только  $\sigma_V / \langle D \rangle_V$ , но и функциональный вид распределения  $f(D)$ .

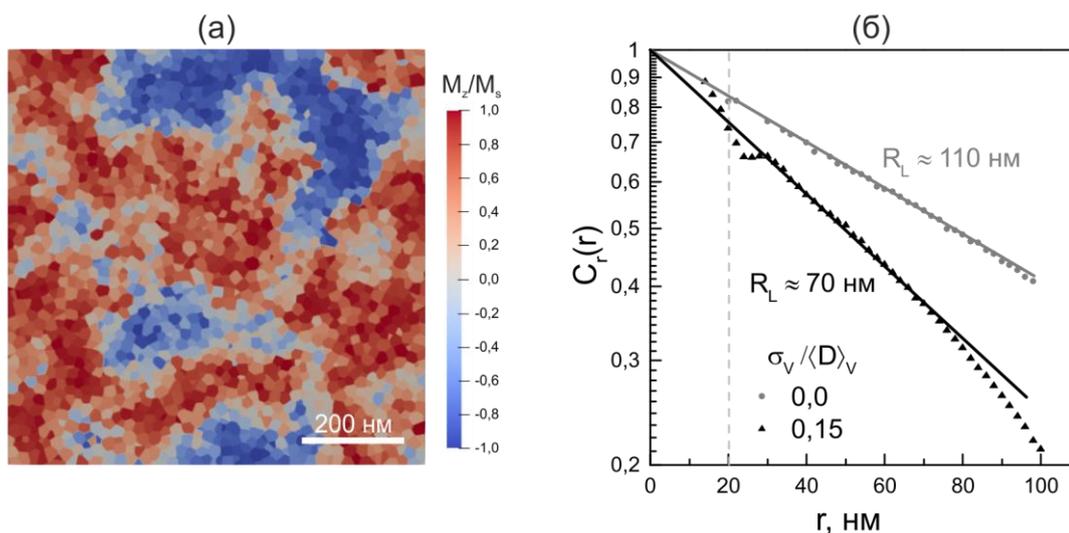


**Рисунок 7** – Зависимости нормированной коэрцитивной силы от среднего размера зерен для монодисперсного ансамбля и полидисперсного с  $\sigma_V / \langle D \rangle_V = 0,15$  (а). Сплошные линии – аппроксимации по закону  $D^n$ . Горизонтальным пунктиром отмечена коэрцитивная сила ансамбля Стонера-Вольфарта. Изменение показателя  $n$  степенной зависимости  $H_c \sim \langle D \rangle_V^n$  при варьировании СКО размера зерен  $\sigma_V / \langle D \rangle_V$  (б).

Визуализированы микромагнитные структуры ансамблей вблизи коэрцитивной силы. Пример одной из них при  $\sigma_V/\langle D \rangle_V = 0,15$  нм и  $\langle D \rangle_V = 22$  нм представлен на рисунке 8 (а). Для полидисперсных ансамблей области корреляции намагниченности являются более выраженными, обособленными и меньшими по размеру, чем для монодисперсного ансамбля. Это подтверждается и при анализе корреляционных функций (рис. 8 (б)):

$$C_{m_z}(r) = \langle (m_z(\vec{r}') - \langle m_z \rangle)(m_z(\vec{r} + \vec{r}') - \langle m_z \rangle) \rangle, \quad (7)$$

где  $m_z(\vec{r}')$  – нормированная проекция намагниченности зерна, координаты которого задаются радиус-вектором  $\vec{r}'$ . Спадание корреляций хорошо описывается экспоненциальной зависимостью:  $\sim \exp(-r/R_L)$ , где  $R_L$  – корреляционный радиус обменосвязанных областей. Для полидисперсного ансамбля ( $\sigma_V/\langle D \rangle_V = 0,15$  и  $\langle D \rangle_V = 22$  нм)  $R_L \approx 70$  нм, а для монодисперсного ( $D = 22$  нм) – 110 нм. Таким образом, меньший магнитный корреляционный объем  $V_{ex}$  в случае полидисперсных ансамблей ведет к большему значению  $\langle K \rangle$  при усреднении по зернам в пределах  $V_{ex}$  и, соответственно, большей коэрцитивной силе по сравнению с монодисперсным ансамблем. Важно отметить, что меняется не только размер магнитных корреляционных объемов, но и их морфология. Наблюдение степенных зависимостей  $H_c \propto D^n$  с  $n < 6$  в определенном интервале размеров зерен означает возможность реализации специфической микромагнитной структуры с фрактальной размерностью  $d$  магнитных корреляционных объемов, которая, определяет показатель степени в  $H_c \propto D^n$ .



**Рисунок 8** – Формирующаяся вблизи коэрцитивной силы микромагнитная структура полидисперсного ансамбля с  $\sigma_V/\langle D \rangle_V = 0,15$  и  $\langle D \rangle_V = 22$  нм в сечении, которое нормально намагниченности ансамбля (ось Z) (а). Цветовая шкала соответствует проекции намагниченности отдельных зерен на ось Z. Корреляционные функции, вычисленные согласно выражению (7).

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ И ВЫВОДЫ

В данной работе проведено исследование магнитных гистерезисных свойств нанокристаллических сплавов с одноосной магнитной анизотропией и случайной ориентацией осей легкого намагничивания. А именно рассмотрены: остаточная намагниченность, магнитные восприимчивости в состоянии остаточной намагниченности в продольном и поперечном направлениях относительно вектора остаточной намагниченности, коэрцитивная сила, графики Хенкеля и зависимости  $\delta M(H)$ . Изучено влияние на перечисленные величины и зависимости среднего значения и дисперсии размера зерен, магнитостатического и межзеренного обменного взаимодействий. Основным методом при выполнении исследования выступало компьютерное моделирование кинетическим методом Монте-Карло в приближении макроспинов без учета термических флуктуаций магнитных моментов зерен.

### Основные выводы диссертационной работы

Для нанокристаллических сплавов со слабым межзеренным обменным взаимодействием получены следующие результаты:

- 1) установлена зависимость остаточной намагниченности от параметра межзеренного обменного взаимодействия  $\alpha \stackrel{\text{def}}{=} J_{int}S/(KV)$  в промежутке  $\langle \alpha \rangle_V \in [0; 2]$ . Продемонстрирована трансформация данной зависимости под влиянием магнитостатического взаимодействия и дисперсии размера зерен;
- 2) в приближении среднего поля выведены формулы, описывающие продольную и поперечную магнитные восприимчивости в состоянии остаточной намагниченности, как функции параметра межзеренного обменного взаимодействия. Данные формулы применимы при  $\alpha \in [0; 0,3]$ ;
- 3) численно установлено как изменяются зависимости продольной и поперечной магнитных восприимчивостей от параметра межзеренного обменного взаимодействия в промежутке  $\langle \alpha \rangle_V \in [0; 1,5]$  под влиянием магнитостатического взаимодействия и дисперсии размера зерен;
- 4) разработан новый метод оценки эффективной константы магнитной анизотропии  $K_{eff}$  и константы межзеренного обменного взаимодействия  $J_{int}$  на основе измерений продольной и поперечной магнитных восприимчивостей в состоянии остаточной намагниченности. Метод был опробован на нанокристаллическом изотропном сплаве  $Nd_2(Fe_{0,8}Co_{0,2})_{14}B$ , для которого были получены следующие оценки:  $K_{eff} = 26,2 \cdot 10^6$  эрг/см<sup>3</sup> и  $J_{int} = 11$  эрг/см<sup>2</sup>;
- 5) изучено как меняются графики Хенкеля и зависимости  $\delta M(H)$  при варьировании при прочих равных условиях: параметра межзеренного обменного

- взаимодействия в промежутке  $\langle \alpha \rangle_V \in [0; 0,5]$ , СКО размера зерен, параметра магнитостатического взаимодействия и размагничивающего фактора;
- б) найдено феноменологическое выражение, устанавливающее связь между максимумом  $\delta M(H)$  и следующими величинами: средним размером зерен, его среднеквадратическим отклонением (СКО)  $\sigma_V / \langle D \rangle_V$ , константой магнитной анизотропии и константой межзеренного обменного взаимодействия. Выражение применимо при  $\sigma_V / \langle D \rangle_V \leq 0,3$  и условии  $M_s^2 / K < 0,03$ .

Для нанокристаллических сплавов с сильным межзеренным обменным взаимодействием получены следующие результаты:

- 1) установлены зависимости коэрцитивной силы  $H_c$  от среднего размера зерен при разных значениях СКО размера зерен. Для монодисперсного случая наблюдался интервал  $D$ , в котором выполняется степенная зависимость  $H_c \propto D^6$ . Все зависимости  $H_c(\langle D \rangle_V)$  при дисперсии размера зерен также имели участки  $H_c \propto \langle D \rangle_V^n$ , но для них  $n < 6$  и значения коэрцитивной силы превышали таковые для монодисперсного ансамбля;
- 2) рост коэрцитивной силы и уменьшение степени в соотношении  $H_c \propto D^n$  при увеличении СКО размера зерен объяснены в рамках теории случайной магнитной анизотропии через уменьшение магнитных корреляционных объемов и изменение их морфологии;
- 3) установлена зависимость степенного показателя в соотношении  $H_c \propto D^n$  от СКО размера зерен в промежутке  $\sigma_V / \langle D \rangle_V \in [0; 0,15]$ . При увеличении дисперсии размера зерен наблюдается резкое снижение  $n$  от 6 до  $\approx 3$ . Этот результат позволяет по-новому объяснить часто наблюдаемые зависимости  $H_c \propto D^3$  для нанокристаллических сплавов.

### **Рекомендации**

Для внедрения в практику может быть рекомендован разработанный метод оценки константы межзеренного обменного взаимодействия и эффективной константы магнитной анизотропии, который применим для высокоанизотропных нанокристаллических сплавов со случайной ориентацией осей легкого намагничивания. Данный метод требует прецизионной магнитометрии, но является простым в постановке эксперимента и опирается на анализ обратимых процессов перемагничивания.

Также результаты данной работы демонстрируют, что графики Хенкеля и зависимости  $\delta M(H)$  имеют высокую чувствительность к межзеренному обменному взаимодействию. Но наряду с этим они сильно зависят от среднего размера зерен и его дисперсии, от магнитостатического взаимодействия между зернами и размагничивающего фактора образца. Поэтому при использовании данного

метода на практике необходимо контролировать все перечисленные факторы, а сами измерения проводить для образцов сферической формы. В таком случае возможен количественный анализ зависимостей  $\delta M(H)$ , в том числе описание их полного профиля с оценкой константы межзеренного обменного взаимодействия.

### **Перспективы дальнейшей разработки темы**

Можно выделить две ветви дальнейших исследований по данной теме. Первая из них – это более детальная экспериментальная апробация численных результатов и компьютерной модели в целом. Она могла бы включать в себя сравнение полученных констант для сплава  $\text{Nd}_2(\text{Fe}_{0,8}\text{Co}_{0,2})_{14}\text{B}$  с оценками другими независимыми методами, а также сбор статистики по образцам с разным средним размером зерен и разной формой. Представляет интерес рассмотрение сплавов других составов.

Вторая ветвь – это продолжение вычислений и развитие компьютерной модели. В разработанную программу уже заложены возможности для учета температурных флуктуаций магнитных моментов зерен и релаксационных процессов. В частности, эти факторы способны влиять на значение коэрцитивной силы нанокристаллических сплавов, что может быть проанализировано. Развитие же компьютерной модели может заключаться в создании внутренней структуры зерен и адаптации алгоритмов для использования графического ускорителя.

### **СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ АВТОРА ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ**

*Статьи в рецензируемых научных журналах, рекомендованных ВАК РФ:*

1. Bolyachkin A. S. Power-law behavior of coercivity in nanocrystalline magnetic alloys with grain-size distribution / **A. S. Bolyachkin**, S. V. Komogortsev // Scripta Materialia. – 2018. – Vol. 152. – P. 55-58; 0,48 п.л. / 0,24 п.л. (Scopus, WoS).
2. Bolyachkin A. S. Intergrain exchange interaction estimation from the remanence magnetization analysis / **A. S. Bolyachkin**, A. S. Volegov, N. V. Kudrevatykh // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2015. – Vol. 378 – P. 362-366; 0,6 п.л. / 0,4 п.л. (Scopus, WoS).
3. Volegov A. S. A new method of intergrain exchange interaction energy determination in nanostructured alloys with spontaneous spin-reorientation transition / A. S. Volegov, **A. S. Bolyachkin**, N. V. Kudrevatykh // Solid State Phenomena. – 2015. – Vol. 233-234. – P. 615-618; 0,48 п.л. / 0,16 п.л. (Scopus).

*Патенты и программы:*

4. **Болячкин А. С.**, Волегов А. С.,  $\text{Nd}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$  magnetic properties simulator // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2017611009, 19 января 2017.

## СПИСОК ЦИТИРУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bauer J. Nanocrystalline FeNdB permanent magnets with enhanced remanence / J. Bauer, M. Seeger, A. Zern, H. Kronmüller // *Journal of Applied Physics*. – 1996. – Vol. 80. – P. 1667-1673.
2. Fischbacher J. Micromagnetics of rare-earth efficient permanent magnets / J. Fischbacher, A. Kovacs, M. Gusenbauer, H. Oezelt, L. Exl, S. Bance, T. Schrefl // *Journal of Physics D: Applied Physics*. – 2018. – Vol. 51. – P. 193002 (17 pp.).
3. Evans R. F. L. Atomistic spin model simulations of magnetic nanomaterials / R. F. L. Evans, W. J. Fan, P. Chureemart, T. A. Ostler, M. O. A. Ellis, R. W. Chantrell // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2014. – Vol. 26. – P. 103202 (23 pp.).
4. Kelly P. E. Switching mechanisms in cobalt-phosphorus thin films / P. E. Kelly, K. O'Grady, P. I. Mayo, R. W. Chantrell // *IEEE Transactions on Magnets*. – 1989. – Vol. 25, № 5. – P. 3881-3883.
5. Aharoni A. The reversible susceptibility tensor of the Stoner-Wohlfarth model / A. Aharoni, E. H. Frei, S. Shtrikman, D. Treves // *Bulletin of the research council of Israel*. – 1957. – Vol. 6A, № 3-4. – P. 215-238.
6. Cimpoesu D. Physics of complex transverse susceptibility of magnetic particulate systems / D. Cimpoesu, A. Stancu, L. Spinu // *Physical Review B*. – 2007. – Vol. 76. – P. 054409 (15 pp.).
7. Herzer G. Grain size dependence of coercivity and permeability in nanocrystalline ferromagnets / G. Herzer // *IEEE Transactions on Magnets*. – 1990. – Vol. 26, № 5. – P. 1397-1402.
8. Iskhakov R. Magnetic microstructure of amorphous, nanocrystalline, and nanophase ferromagnets / R. Iskhakov, S. Komogortsev // *The Physics of Metals and Metallography*. – 2011. – Vol. 112. – P. 666-681.
9. Chantrell R. W. Calculations of the susceptibility of interacting superparamagnetic particles / R.W. Chantrell, N. Walmsley, J. Gore, M. Maylin // *Physical Review B*. – 2000. – Vol. 63. – P. 024410 (14 pp.).