

На правах рукописи

МАЯКОВА СВЕТЛАНА АЛЕКСЕЕВНА

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ЛОКАЛЬНОЙ МАГНИТНОЙ АНИЗОТРОПИИ
В ФЕРРОМАГНЕТИКАХ
С УПРУГОПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИЕЙ**

05.13.18 – математическое моделирование, численные методы
и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Уфа-2008

Работа выполнена на кафедре высокопроизводительных вычислительных технологий в
ГОУ ВПО «Уфимский государственный авиационный технический университет»

Научный руководитель	канд. физ.-мат. наук, доц. ЕМЧЕНКО Ольга Владимировна
Официальные оппоненты	д-р физ.-мат. наук, проф. АЛЕКСАНДРОВ Игорь Васильевич д-р физ.-мат. наук, проф. ШАМСУТДИНОВ Миннахат Асгатович
Ведущая организация	Институт проблем сверхпластичности металлов РАН (г. Уфа)

Защита состоится 10 октября 2008 г. в 10⁰⁰ часов
на заседании диссертационного совета Д-212.288.06
при Уфимском государственном авиационном техническом университете
по адресу: 450000, г. Уфа, ул. К.Маркса, 12, корп. 1

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке университета

Автореферат разослан «__» _____ 2008 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
д-р физ.-мат. наук, проф.

БУЛГАКОВА Г. Т.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ДИССЕРТАЦИИ

Актуальность темы. Магнитные свойства материалов благодаря своей практической значимости занимают одну из ведущих позиций среди наблюдаемых в ходе экспериментов физических свойств.

При конструктивном рассмотрении магнитных явлений не обойтись без системы математических моделей. При построении таких моделей, по-видимому, следует руководствоваться следующим тезисом. “Если, вы можете предложить математическую модель, алгоритм, компьютерную программу, позволяющую воспроизвести с достаточной точностью наблюдаемое в эксперименте явление в достаточно широком диапазоне внешних параметров, и эта модель не будет противоречить установленным физико-химическим законам, то вы понимаете это явление. Если вы не в состоянии построить удовлетворительную модель, то это означает, что у вас нет полного понимания явления”. Сформулированный принцип призывает извлекать фундаментальные знания о системе и находить пути эффективного управления для достижения принципиально реализуемых целей.

В классической теории магнетизма для исследования отклика магнитной системы на воздействие внешнего магнитного поля и температурного отжига применяются либо методы теории фазовых переходов, основанные на разложении термодинамического потенциала в ряд по четным степеням параметра порядка, либо прямое решение уравнений динамики магнитного момента, предложенных Ландау еще в 30-х гг. XX века. Каждый из этих подходов имеет как свои преимущества, так и существенные недостатки.

С одной стороны, теория фазовых переходов удобна тем, что в результате ее применения можно получить представление о процессах, протекающих в магнетике в асимптотическом приближении, и плоха тем, что разложение термодинамического потенциала в ряд возможно лишь в узком диапазоне изменения температуры и внешнего магнитного поля.

С другой стороны, непосредственное решение уравнений Ландау довольно трудоемкий процесс, поскольку эти уравнения содержат помимо временной производной нелинейные слагаемые, отражающие неоднородный обмен рассматриваемого иона с окружающими его соседними частицами.

Бурное развитие современных высокопроизводительных вычислительных систем дает возможность создания нового подхода: проведения численных экспериментов, связанных с изучением свойств ферромагнитных систем, состоящих из нескольких тысяч частиц. Поэтому комплексное исследование ферромагнитных систем, проводимое методами численного моделирования, методами теории фазовых переходов, а также с помощью методов нелинейной динамики является актуальной задачей. Этот подход дает наиболее пол-

ное представление об адекватности модели, а также помогает лучше понять некоторые процессы и явления, протекающие в ферромагнитных веществах.

Цель работы. Построение математической модели, адекватно описывающей анизотропный ферромагнетик с упругопластической деформацией структуры, качественно отражающей наблюдаемые в ферромагнетике эффекты изменения поля локальной намагниченности.

Поставленная цель достигается в результате решения следующих *задач*:

1. Учет в модельном гамильтониане взаимодействий, отвечающих магнитной анизотропии и упругопластической деформации структуры магнетика. Оценка изменения положений экстремумов эффективной энергии магнитной анизотропии при наличии полей неоднородных внутренних деформаций.

2. Оценка сходимости методов минимизации модельного гамильтониана.

3. Разработка алгоритмов и комплекса программ, позволяющих проводить численные расчеты свойств ферромагнитных материалов на базе предложенной модели.

4. Верификация модели:

- проверка непротиворечивости результатов вычислительного эксперимента основным законам классической теории магнетизма;

- сравнение результатов численного моделирования с данными натурального эксперимента на примерах конкретных ферромагнитных материалов.

5. Разработка методов предварительного аналитического анализа модели на основании результатов применения теории хаотизации и нелинейной динамики к решаемой задаче.

Методы исследования. Для разностороннего исследования магнитной системы применялись как методы статистического моделирования, в частности метод Монте-Карло, так и методы, основанные на детерминистическом подходе. К последним относятся методы исследования системы дифференциальных уравнений, описывающих ферромагнетик, предлагаемые нелинейной динамикой: анализ устойчивости и поведения решения вблизи неподвижных точек, исследование бифуркаций и рождения предельных циклов.

На защиту выносятся:

1. Новая математическая модель, описывающая анизотропный ферромагнетик с упругопластической деформацией структуры, позволяющая наблюдать изменение локальной намагниченности в окрестности дефекта, сдвиг критической температуры фазового перехода, увеличение коэрцитивной силы.

2. Численная схема и комплекс программ для проведения расчетов полей локальной намагниченности и основных магнитных характеристик ферромагнетика в процессе изменения температурного и полевого режима.

3. Методы предварительного аналитического анализа модели, основанные на применении теории хаотизации и нелинейной динамики к решаемой задаче

с целью выделения областей качественно различных решений и выбора метода решения задачи в этих областях.

4. Новые качественные и количественные результаты исследований модели методами нелинейной динамики:

- определение областей зарождения магнитных доменов как областей пространства с неустойчивым и хаотическим поведением решения уравнений динамики магнитного момента;
- определение диапазонов изменения внешнего магнитного поля и температуры, при которых ферромагнетик обладает требуемыми свойствами;
- объяснение явления магнитного гистерезиса и скачков Баркгаузена с помощью анализа устойчивости асимптотического решения уравнений динамики магнитного момента.

Научная новизна

1. Предложена новая математическая модель, описывающая анизотропный ферромагнетик с упругопластической деформацией структуры, позволяющая наблюдать:

- изменение локальной намагниченности в окрестности дефекта,
- сдвиг критической температуры фазового перехода,
- увеличение коэрцитивной силы, вызванное внесением дефектов в кристаллическую структуру.

2. Предложена новая область применения метода определения положений экстремумов эффективной энергии магнитной анизотропии при наличии внутренних деформаций структуры, разработанного В. В. Николаевым, А. П. Танкеевым, к задачам моделирования ферромагнитных материалов с локальными дефектами методом Монте-Карло.

3. Для определения областей зарождения доменов, совпадающих с областями устойчивого решения, и допустимых диапазонов значений управляющих параметров модели, применен нестандартный для теории магнетизма подход (теория нелинейной динамики).

Теоретическая и практическая значимость. Разработанный метод позволяет объяснить такие эффекты магнетизма, как зарождение магнитных доменов, критическое поведение намагниченности и магнитной восприимчивости в области фазовых переходов, возникновение скачков Баркгаузена. Выявлены диапазоны изменения параметров модели ферромагнетика с локальными дефектами структуры, определяющие пригодность работы модели в заданном диапазоне свойств.

Достоверность результатов диссертационной работы обоснована использованием общих законов и уравнений теории магнетизма и согласованием полученных решений в частных случаях с результатами, известными из литературы, а также с экспериментальными данными других исследователей. Корректность численной схемы обусловлена проверкой ее сходимости. Достовер-

ность полученных численных решений – сравнением с аналитическими решениями в случаях, когда последние могут быть найдены.

Апробация работы. Основные результаты диссертационной работы были представлены и обсуждались на следующих конференциях и научных школах:

- на третьей региональной научно-технической конференции «Новые программные средства для предприятий Урала» (Магнитогорск, 2004 г.)

- на всероссийской конференции «Современные проблемы физики и математики» (Стерлитамак, 2004 г.)

- на XVII сессии Международной школы по моделям механики сплошной среды (Казань, 2004 г.)

- на 2-ой региональной зимней школе–семинаре аспирантов и молодых ученых «Интеллектуальные системы обработки информации и управления» (Уфа, 2007. г.)

- на всероссийской молодежной научной конференции «Мавлютовские чтения» (Уфа, 2007 г.)

Кроме того, результаты работы обсуждались на научных семинарах кафедры магнетизма (МГУ) под руководством Н. С. Перова, кафедры теоретической физики (БашГУ) под руководством профессора М. А. Шамсутдинова, института математики с ВЦ УНЦ РАН под руководством Л. А. Калякина, кафедры ВВТиС (УГАТУ) под руководством профессора Р. К. Газизова и получили положительную оценку.

Публикации. Основные результаты диссертации опубликованы в 11 работах, в том числе 5 статей в изданиях, рекомендованных ВАК, 5 – в материалах и трудах конференций, 1 – в межвузовском сборнике трудов. Личный вклад автора в совместные статьи заключается в участии в постановке задач, подборе используемых моделей, написании расчетных программ, анализе и обработке расчетных данных, интерпретации результатов.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, общих выводов, списка литературы и четырех приложений, в которых приведены блок-схемы и листинги разработанных программ. Общий объем диссертации 212 страниц, основной текст изложен на 172 страницах. Диссертация содержит 83 рисунка и 2 таблицы. Список литературы включает 95 наименований.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении обоснована актуальность темы диссертации, сформулированы цель, основные направления исследований, приводится структура диссертации.

В первой главе выполнен литературный обзор теоретических исследований, посвященных изучению ферромагнитного порядка и явлению магнитной анизотропии. Рассмотрен процесс намагничивания с точки зрения классиче-

ской теории фазовых переходов развитой Ландау и Вонсовским. Приведены уравнения движения магнитного момента «обменного» ферромагнетика под воздействием внешнего магнитного поля, предложенные Ландау и Лифшицем.

Рассмотрены основные модели магнитных систем: модель Изинга, пригодная для описания бинарного сплава или магнитных систем специального вида, модель Гейзенберга, которая используется для описания многих реальных ферро- и антиферромагнитных систем, модель льда, применимая для описания льда и различных сегнетоэлектриков. Описаны основные особенности каждой из моделей и соответствующие упрощающие предположения о допустимых параметрах теоретических моделей.

Приведен обзор задач, решаемых в области моделирования свойств ферромагнитных материалов на современном этапе. Наиболее близкими из них по отношению к теме диссертационной работы являются: 1) исследование фазовых переходов и критических явлений, происходящих в ферромагнетиках, методами Монте-Карло и молекулярной динамики (А. К. Муртазаев, К. И. Камиров, А. Б. Бабаев, В. А. Мутайламов и др.); 2) исследование влияния линейных дефектов структуры ферромагнетика на его магнитные свойства, в частности, на образование зародышей будущих доменов (В. В. Николаев, А. П. Танкеев).

Показано, что недостатком большинства моделей, рассматривающих ферромагнетики на атомарном уровне, является то, что топологический беспорядок связан с наличием точечных дефектов, локальные дефекты – отдельные дислокации, дислокационные стенки, дисклинации, не рассматриваются, хотя роль их важна. Модели, в которых учитывается влияние перечисленных выше локальных дефектов, как правило, не содержат энергии обмена.

В завершении главы были сформулированы цели диссертационной работы, определяемые необходимостью модели, устраняющей перечисленные выше недостатки.

Содержание **второй главы** условно может быть разбито на три части.

В первой описаны механизмы возникновения магнитной анизотропии и магнитострикции, возникновение магнитоупругой и уравнивающей ее упругой энергии при деформации кристаллической структуры ферромагнетика.

Во второй приведен вид модельного гамильтониана. Сформулирована задача о поиске устойчивого состояния магнитной системы, при котором гамильтониан достигает минимума. Остановимся на этой части работы подробнее.

При исследовании влияния локальных дефектов структуры на магнитные свойства материала ферромагнетик, находящийся в тепловом равновесии с окружающей средой, рассматривался как набор $L_x \times L_y \times L_z$ атомов, с каждым из которых связан спиновый момент $\mathbf{S}_{i,j,k} = (S_{i,j,k;x}, S_{i,j,k;y}, S_{i,j,k;z})^T$, $i=1, \dots, L_x$, $j=1, \dots, L_y$, $k=1, \dots, L_z$. Предполагалось, что рассматриваемый ферромагнетик имеет структуру, задаваемую кристаллической решеткой \mathbf{Z}^d , d – размерность

задачи. Устойчивое распределение спинов определялось из условия минимума суммы энергий:

$$H = - \sum_i \sum_j \sum_k \left(\sum_{(i',j',k'): |\vec{r}_{i,j,k} - \vec{r}_{i',j',k'}| \leq r_{\text{эф}}} J \cdot \mathbf{S}_{i,j,k} \cdot \mathbf{S}_{i',j',k'} + \mu_b g \mathbf{H} \cdot \mathbf{S}_{i,j,k} + \omega_a(\mathbf{S}_{i,j,k}) + \omega_{mu}(\mathbf{S}_{i,j,k}, x_i, y_j, z_k) \right) \Delta x_i \Delta y_j \Delta z_k \quad (1),$$

где первое слагаемое суммы (1) обозначает обменное взаимодействие с ближайшими соседями в пределах эффективного радиуса $r_{\text{эф}}$ ($J = \frac{3k_b T_c}{2zS(S+1)}$ – обменный интеграл, $S=1$ – спиновое число, z – число соседей в пределах $r_{\text{эф}}$); второе слагаемое представляет собой взаимодействие с внешним магнитным полем \mathbf{H} (μ_b – магнетон Бора, g – фактор Ланде); третье и четвертое слагаемые (нелокальная часть) представляют собой энергию анизотропии и энергию магнитоупругих связей, возникающую в результате деформации кристаллической структуры. Вид плотностей ω_a, ω_{mu} указан в табл.1.

Таблица 1:

Плотности магнитоупругой энергии и энергии анизотропии для одноосного и кубического ферромагнетиков

<i>Одноосный ферромагнетик</i>	<i>Кубический ферромагнетик</i>
$\omega_a = K_1 S_z^2$ $\omega_{mu} = B_1(\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy}) S_z^2 + B_2 \varepsilon_{zz} S_z^2 + B_3(\varepsilon_{xx} S_x^2 + \varepsilon_{yy} S_y^2 + 2\varepsilon_{xy} S_x S_y) + B_4(\varepsilon_{yz} S_y S_z + \varepsilon_{xz} S_x S_z)$	$\omega_a = K_1 (S_x^2 S_y^2 + S_y^2 S_z^2 + S_x^2 S_z^2)$ $\omega_{mu} = B_1 (S_x^2 \varepsilon_{xx} + S_y^2 \varepsilon_{yy} + S_z^2 \varepsilon_{zz}) + B_2 (S_x S_y \varepsilon_{xy} + S_y S_z \varepsilon_{yz} + S_x S_z \varepsilon_{zx})$
$\omega_{field} = \mathbf{M} \mathbf{H}, \quad \mathbf{M} = \sum_{i: S_i \in V} S_i / V,$ $K_1(T)$ – первая константа магнитной анизотропии, $B_i(T)$ ($i=1,2,3,4$) – константы магнитоупругой связи, $\varepsilon_{ij}(x, y, z)$ – элементы тензора деформаций.	

Во избежание образования магнитных полюсов на границах рассматриваемого ферромагнетика применялись периодические граничные условия, что сделало (1) инвариантным относительно группы пространственных сдвигов $\{T^y, y \in \mathbf{Z}^d\}$:

$$H(T^y \underline{S}) = H(\underline{S}), \quad \underline{S} = (S_{1,1,1}, S_{1,1,2}, \dots, S_{L_x, L_y, L_z}).$$

Далее рассматривалась задача о поиске устойчивого состояния магнитной системы, при котором гамильтониан (1) достигает минимума. При $|\mathbf{S}_{i,j,k}| = 1$, направление спина задавалось парой углов (ψ, θ) , $\psi \in [-\pi/2, 3\pi/2]$, $\theta \in [0, \pi]$:

$$\mathbf{S}_{i,j,k} = (\cos \theta_{i,j,k}, \sin \theta_{i,j,k} \sin \psi_{i,j,k}, \sin \theta_{i,j,k} \cos \psi_{i,j,k})^T.$$

Поиск минимума гамильтониана (1) осуществлялся полным перебором всех возможных конфигураций \underline{S} : последовательным заданием приращений $\Delta\psi$, $\Delta\theta$ каждому из спинов $\mathbf{S}_{i,j,k}$ и сравнением значений гамильтониана до и после пробного изменения углов. Число таких различных переборов составляло $(n_1 \cdot n_2)^N$, где $n_1 = 2\pi/\Delta\psi$, $n_2 = \pi/\Delta\theta$, $N = L_x \times L_y \times L_z$. Тем самым было показано, что такой способ минимизации – довольно трудоемкая задача, которую целесообразно решать лишь при небольшом количестве частиц.

Было показано, что при рассмотрении двухмерных задач количество переборов может быть уменьшено. При фиксированном значении азимутального угла $\theta = \theta_0$ рассматривалась проекция i -ого спина (где $i=(k-1)L_z+j$ при $x=const$) на направление внешнего магнитного поля: $s_i = 1$, если спин ориентирован по полю, и $s_i = -1$, если спин ориентирован против внешнего поля. Очевидно, что в случае простой кубической решетки при отсутствии слагаемых ω_a , ω_{mi} и эффективном радиусе $r_{эф}$, равном одному межатомному расстоянию, модель (1) с дискретным состоянием спина сводится к модели Изинга.

Количество конфигураций, которые необходимо было перебрать, чтобы найти минимальное значение (1) в случае дискретного состояния спина, составило 2^N . Этот перебор был уменьшен путем использования идеи предпочтительной выборки, согласно которой каждая последующая конфигурация спинов \underline{S}^n , $n = 1, 2, \dots, 2^N$ генерировалась случайно, в соответствии с некоторой предельной вероятностью P_T , такой что при проведении некоторого количества испытаний $n > N_{MC}$, $N_{MC} < 2^N$ система достигала состояния \underline{S}^* с минимальной энергией.

Существование предельной вероятности P_T для гамильтониана (1) с дискретным описанием спина проверялось с помощью следующей теоремы, приведенной в работах Я. Г. Синая:

Теорема 1. Пусть гамильтониан рассматриваемой системы имеет вид:

$$H = H_1 + \varepsilon H', \quad (2)$$

где

$$H_1 = - \sum_{\langle i,j \rangle} J s_i s_j - \bar{\mu} H \sum_i s_i,$$

H' – трансляционно-инвариантный гамильтониан с конечным радиусом взаимодействия, ε – малый параметр, $H = |\mathbf{H}|$. Тогда существует такие положи-

тельные константы T_0 , ε_0 и внешнее поле $H(T, \varepsilon)$, определенное для $T < T_0$ и $|\varepsilon| < \varepsilon_0$, что у гамильтониана (2) существует два различных предельных распределения $P_T = const \cdot \exp(-H/k_b T)$, приводящих к основным состояниям, отличающимся от $\underline{S}^+ = \{s_i = 1\}$, $\underline{S}^- = \{s_i = -1\}$ лишь малыми возмущениями.

При выполнении условий теоремы 1 для расчета состояния с минимальной энергией при фиксированной температуре применялся метод Монте-Карло.

На примере задачи, инвариантной по направлению ox , было показано, что в окрестности источника дефекта существует область Ω , где плотность $\omega_{def} = -\omega_a - \omega_{mu}$ сравнима с плотностью энергии обмена $\omega_{ex} = -Js_i(s_{i,left} + s_{i,right} + s_{i,top} + s_{i,down})$ и ведет себя как δ -функция, быстро убывая с удалением от источника дефекта (рис. 1). В работе было установлено, что при поиске минимума (2), вне Ω можно пользоваться теоремой 1, а внутри необходим полный перебор состояний спинов.

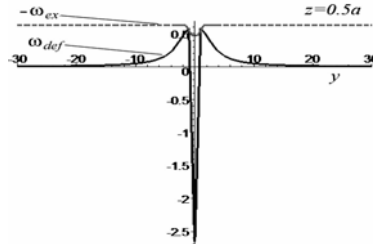


Рисунок -. Соотношение плотностей энергии обмена и энергии дефекта вблизи источника дислокации (расстояния выражены в периодах атомной решетки a)

Для решения задачи минимизации гамильтониана (1) с дискретным описанием спина был предложен следующий алгоритм:

Алгоритм 1

1. локализация области $\{\Omega: (y,z), \text{ при которых } |\omega_{def}/\omega_{ex}| > \delta\}$, $\delta < 0.25$;
2. нахождение первого приближения к минимуму методом Монте-Карло;
3. корректировка полученного значения минимума гамильтониана (1) путем полного перебора конфигураций спинов, принадлежащих Ω .

Локализация Ω происходила на основе поиска положений экстремумов ω_{def} . Для двух простых случаев деформации решетки: краевой дислокации с вектором Бюргера, параллельным оси (oy) , и клиновой дисклинации было показано, что в случае одноосного ферромагнетика в качестве области Ω может быть выбран прямоугольник, содержащий замкнутый контур $(B_1 - B_3)\varepsilon_{yy} + B_2\varepsilon_{zz} + K_1 = 0$, соответствующий энергетически невыгодным состояниям спинов с $\psi = \pi/4$. Для определения энергетически невыгодных

состояний магнитной системы использовались методы, разработанные В. В. Николаевым, А. П. Танкеевым.

Для кубического ферромагнетика в связи с отсутствием явного аналитического выражения для оценки энергетически невыгодных состояний спинов при тех же видах деформации применялся другой подход, в котором сначала оценивалась плотность энергии обмена с ближайшими соседями ω_{ex} для задачи без дефектов, а затем осуществлялось решение системы

$$\begin{cases} \left| \frac{\omega_a(\tilde{\psi}(y, z)) + \omega_{mu}(\tilde{\psi}(y, z), y, z)}{\omega_{ex}} \right| > \delta, \\ B_1(\varepsilon_{zz} - \varepsilon_{yy}) \operatorname{tg} 2\tilde{\psi} = B_2 \varepsilon_{yz} + K_1 \sin 2\tilde{\psi}, \end{cases} \quad (3)$$

относительно переменных (y, z) , и тем самым определялась область Ω .

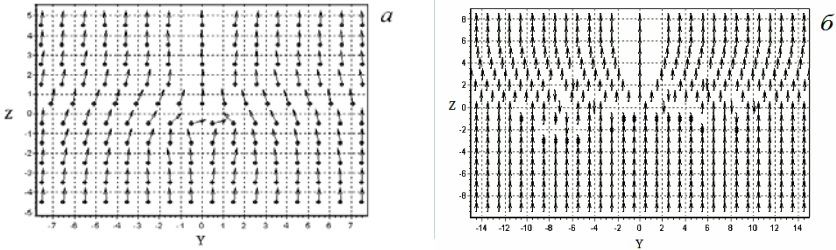


Рисунок 2 - Решение задачи минимизации для кубического ферромагнетика
 а – модель (1) с непрерывным описанием спина,
 б – модель (1) с дискретным описанием спина

В третьей части главы приведены результаты численных расчетов локальных полей намагниченности, проводимых на основе модели (1) при температурах порядка $300^\circ K$ для всех рассмотренных ранее видов деформации. Исследованы форма, расположение и размер полученных областей изменения локальной намагниченности (рис. 2), рассмотрена задача суперпозиции полей при сближении двух локальных дефектов. Показано, что при рассмотрении задачи о суперпозиции обменные взаимодействия оказывают большое влияние на форму и размер зародышей магнитных доменов.

В третьей главе приведены результаты исследований температурной и полевой зависимости модели (1) с дискретным описанием спина. Вначале на примере железа с помощью программы, разработанной на основе алгоритма 1, были исследованы системы $L \times L$; $L=32, 64, 128$ с учетом и без учета искажения кристаллической структуры, вызванного краевыми дислокациями. В результате тестирования было получено, что: 1) дефектность структуры приводит к увеличению числа доменов, следовательно, к изменению локальной намагниченности в области дефекта; 2) наличие деформации структуры магнетика приводит к сдвигу точки Кюри в область более низких температур; 3) учет

упругопластических деформаций приводит к увеличению коэрцитивной силы и изменению формы петли гистерезиса. То есть, верификация модели показала, что результаты численных экспериментов, подтверждены известными фактами теории магнетизма.

Было выполнено сравнение результатов, выдаваемых программой, с экспериментальными данными. Поскольку предлагаемая в работе модель не рассматривала структурные перестановки и сдвиг доменной границы под влиянием высокой температуры, для сравнения был выбран Ni, точка Кюри которого (627°K) значительно меньше температуры плавления (1727°K).

Для Ni была проведена оценка изменения намагниченности при $T \leq T_c$ в различных случаях распределения деформаций: в случаях простых дислокационных стенок, имитирующих границу зерна, в случае стохастического расположения дислокаций, в случае поликристалла, состоящего из зерен квадратной формы. Показано, что среди моделей с регулярным расположением дислокаций модель с квадратными зернами энергетически наиболее выгодна.

На рис. 3 представлены результаты расчетов средней на спин намагниченности для двух модельных кристаллов: для поликристалла, состоящего из зерен квадратной формы с двумя ортогональными системами дислокационных стенок с одинаковой средней плотностью, и для идеального монокристалла. Кривая 1 получена для поликристалла с размерами зерен 100нм и плотностью дислокаций $\rho = 10^{11}\text{см}^{-2}$. Такие размеры зерен и плотность дислокаций характерны для субмикроструктурного (СМК) состояния Ni. Кривая 2 была получена для идеального монокристалла размерами 1мкм . Кривая 1 отражает снижение намагниченности насыщения при $T = 300^{\circ}\text{K}$ на 4.8%.

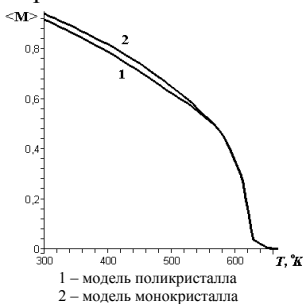


Рисунок 3 - Средняя на спин намагниченность, численно рассчитанная для Ni

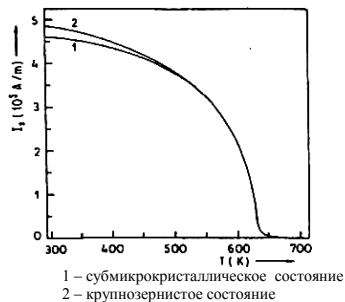


Рисунок 4 - Намагниченность насыщения, измеренная в ходе эксперимента

На рис. 4 приведены результаты исследования никеля чистотой 99.99%, подвергнутого деформации на наковальнях Бриджмена при комнатной температуре под давлением 6 ГПа (эксперимент описан в работах Х. Я. Мулюкова,

Г. Ф. Корзниковой). Кривая 1 записана для СМК состояния Ni сразу после деформации. Кривая 2 соответствует крупнозернистому состоянию Ni. При комнатной температуре величина намагниченности насыщения в СМК состоянии на 5% меньше ее значения в крупнозернистом состоянии. Начиная примерно с 500 °K, обе кривые совпадают.

Был установлен температурный диапазон применимости модели (1) к Ni технической чистоты. Для Ni 99.95% он составил 300–453 °K, для Ni 99.99% 300–400 °K.

В четвертой главе проводилось исследование уравнений динамики магнитного момента с помощью методов теории нелинейной динамики. Уравнения, описывающие динамику намагниченности в анизотропном ферромагнетике с дислокацией под воздействием внешнего магнитного поля, имели вид:

$$\begin{cases} \sin \theta \cdot \dot{\theta} = \gamma \frac{\partial \omega}{\partial \psi}, \\ \sin \theta \cdot \dot{\psi} = -\gamma \frac{\partial \omega}{\partial \theta}. \end{cases} \quad (4)$$

где $\gamma = 2\mu_b / \hbar$, μ_b – магнетон Бора, \hbar – постоянная Планка, $\omega = \omega_a + \omega_{mi} + \omega_{field}$ – суммарная плотность энергии анизотропии, магнитоупругих связей и взаимодействия с внешним полем (см. табл. 1).

Константы анизотропии и магнитоупругой связи, входящие в суммарную плотность $\omega_a + \omega_{mi}$, являлись температурозависимыми параметрами, а величина внешнего магнитного поля могла изменяться со временем. Поэтому к задаче (4) были добавлены уравнения, выражающие зависимость температуры T и поля H от времени:

$$\begin{aligned} \dot{T} &= \varepsilon \Delta T, \\ \dot{H} &= \begin{cases} 2\varepsilon H_{\max}/c, & t \in [0; 0.5c/\varepsilon] \cup [1.5c/\varepsilon; 2.5c/\varepsilon], \\ -2\varepsilon H_{\min}/c, & t \in (0.5c/\varepsilon; 1.5c/\varepsilon), \end{cases} \end{aligned} \quad (5)$$

где ε – малый параметр, величина которого не превышает значения частоты магнитного резонанса, c – промежуток времени, в течение которого величина \dot{H} сохраняет знак – полупериод функции $H(t)$.

Рассматривались двумерные задачи, записанные для плоскости (yoz). Схема исследований содержала следующие этапы.

1. Оценивалось влияние дефектности структуры на решение (4).

Проводилась линеаризация системы (4) в окрестности неподвижных точек $(\tilde{\psi}(y, z), \tilde{\theta} = \pi/2)$. Было показано, что матрица коэффициентов рассматриваемой линеаризованной системы имеет всего два вида собственных значений: либо вещественные разных знаков, либо чисто мнимые. Таким образом, каждой точке (y, z) рассматриваемой пространственной области соответствует некото-

рое количество неподвижных точек (4 точки в случае одноосного ферромагнетика, от 4 до 9 точек в случае кубического ферромагнетика), каждая из которых имеет тип «центр» или «седло».

Для одноосного ферромагнетика было получено следующее условие, определяющее возможность чередования типов неподвижных точек при фиксированных (y, z) , T , $H=0$:

$$\text{пусть } \alpha = \frac{B_4 \varepsilon_{yz}}{(B_1 - B_3) \varepsilon_{yy} + B_2 \varepsilon_{zz} + K_1}, \quad \beta = (B_1 + B_3) \varepsilon_{yy} + B_2 \varepsilon_{zz} + K_1$$

• если $\left| B_4 \varepsilon_{yz} \sqrt{1 + a^2} / a \right| > |\beta|$, то все четыре неподвижные точки имеют тип «центр»;

• если $\left| B_4 \varepsilon_{yz} \sqrt{1 + \alpha^2} / \alpha \right| < |\beta|$, то последовательность неподвижных точек имеет чередующийся характер: «седло-центр-седло-центр» или «центр-седло-центр-седло».

На основе приведенного выше условия были найдены значения (y, z) , при которых решение системы (4) устойчиво в окрестности всех неподвижных точек (то есть все неподвижные точки имеют тип «центр») и значения (y, z) , при которых наблюдается хаотичное поведение решения (чередование типов «центр-седло»). Было установлено, что область хаотизации решения находится внутри замкнутого контура $(B_1 - B_3) \varepsilon_{yy} + B_2 \varepsilon_{zz} + K_1 = 0$. Именно в этой области согласно результатам численного моделирования наблюдается наиболее сильное отклонение векторов локальной намагниченности от преимущественного направления.

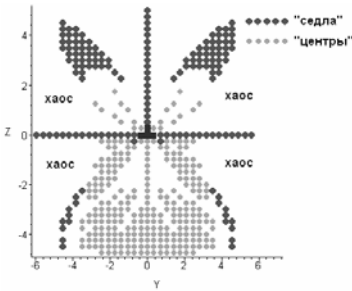


Рисунок 5 - Качественное поведение решения (4) ($T = 0.3T_c$)

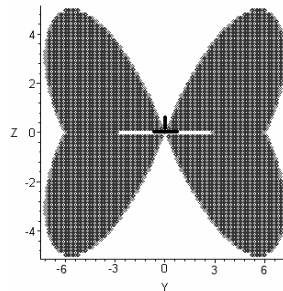


Рисунок 6 - Область Ω ($T = 0.3T_c$)

Аналогично для кубического кристалла при фиксированных (y, z) , T , и $H=0$ были получены следующие условия:

$$\text{пусть } X = \frac{B_1}{K_1} (\varepsilon_{zz} - \varepsilon_{yy}) \cos 2\tilde{\psi} - \frac{B_2}{K_1} \varepsilon_{yz} \sin 2\tilde{\psi} - 2 \sin^2 2\tilde{\psi}, \quad \zeta = \frac{B_1}{K_1} (\varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz})$$

- если $\zeta > 0$ или $-1 \leq \zeta \leq 0$, то все точки $(\tilde{\psi}, \pi/2)$, при которых $-1 < X < \zeta$ – «седла», остальные – «центры»;
- если $\zeta < -1$, то все точки $(\tilde{\psi}, \pi/2)$, при которых $\zeta < X < -1$ – «седла», остальные – «центры».

Из рис. 5 хорошо видно, что область с седловой неустойчивостью решения (6) сосредоточена внутри прямоугольника $(y, z) \in [-6; 6] \times [-5; 5]$, так же, как и область всплеска энергии дефекта, найденная из условия (3) (рис. 6). Таким образом, было показано, что метод определения седловых точек можно использовать для локализации области Ω в алгоритме 1.

2. Исследовалось влияние температуры на динамику локальной намагниченности. Для примера железа было показано, что рост отношений модулей $|B_1/K_1|$, $|B_2/K_1|$ при приближении температуры к точке Кюри приводит к расширению зон с седловой неустойчивостью решения системы (4), (5).

Было установлено, что при низких температурах ($0 < T < 0.3T_c$) зона неустойчивости решения (4), (5) располагается в непосредственной близости дефекта и занимает сравнительно небольшую часть рассматриваемого объема. Распределение спинов, построенное с помощью модели (1) в том же диапазоне температур отражает отклонение небольшого количества спинов из окрестности дефекта от преобладающего направления (образование зародыша домена). Значение удельной намагниченности максимально.

При постепенном повышении температуры энергия обмена ослабевает, группа спинов с противоположной направленностью увеличивается. Удельная намагниченность падает. Этот же результат показывают и исследования, проводимые методами нелинейной динамики: зона неустойчивости решения (4), (5) расширяется. При температуре $T=0.55T_c$ эта зона увеличивается уже более, чем в 2 раза от первоначальной. Начиная с $T=0.8T_c$, область неустойчивости решения (6), (7) увеличивается примерно в 4 раза, в поведении спинов наблюдается хаос, а удельная намагниченность стремится к нулю.

Таким образом, было показано, что исследования (4), (5), проводимые методами нелинейной динамики, адекватно описывают процесс размагничивания материала при повышении внешней температуры.

3. Исследовалась зависимость динамики локальной намагниченности внешнего магнитного поля H .

Для случая постоянного, отличного от нуля, внешнего поля было построено асимптотическое решение системы (4), и определен вид устойчивости этого решения. На примере одноосного ферромагнетика было показано, что при $H \rightarrow 0$ асимптотическое решение со временем становится неустойчивым, благодаря появлению резонансных слагаемых в уравнениях для третьего члена асимптотического разложения, а при $H \rightarrow \infty$ асимптотическое решение устойчиво в любой точке рассматриваемого объема.

Рассматривался случай периодического внешнего поля с направляющим вектором $\mathbf{q} = (0, \sin\beta, \cos\beta)$, $\beta \in [-\pi/2, 3\pi/2]$ и модулем, изменяющимся согласно (6). Было установлено, что в этом случае линейное приближение системы (4), записанное как дифференциальное уравнение второго порядка относительно переменной ψ , представляет собой уравнение Хилла. Для полученного линейного уравнения была построена диаграмма устойчивости решения в зависимости от y, z, ε, H и полупериода c . Согласно диаграмме решение устойчиво в случае, когда $c \rightarrow 0$ только в тех областях (y, z) , где все неподвижные точки $(\tilde{\psi}, \tilde{\theta})$ системы (4) имеют тип «центр». Если c не стремится к нулю, а $\varepsilon \ll 1$, то решение неустойчиво во всей рассматриваемой области изменения координат.

4. Исследовалось явление затягивания потери устойчивости при переходе пары собственных значений матрицы линеаризованной системы, составленной для (4), (6), через мнимую ось. Суть явления состояла в том, что фактический уход фазовой точки от потерявшего устойчивость положения равновесия происходил не сразу после потери устойчивости, а спустя некоторое время ($\sim 1/\sqrt{\varepsilon|\ln\varepsilon|}$), за которое параметр H успевал измениться на конечную величину. Явление затягивания потери устойчивости иллюстрирует проявление эффекта Баркгаузена, а именно: процесс намагничивания происходит неравномерно, скачками.

5. Гистерезис. Рассматривалась система (4), дополненная уравнением $\dot{H} = \varepsilon\Delta H$, с начальными условиями в точке (ψ_0, θ_0) . Наряду с предыдущей системой, рассматривалась система (4), дополненная уравнением $\dot{H} = -\varepsilon\Delta H$. Численно было показано, что эволюция фазовой точки второй системы не сводится к эволюции фазовой точки первой с помощью обращения времени – наблюдается гистерезис.

Схема исследований дифференциальных уравнений вида (4), (5) или (4), (6), построенная по принципу выявления областей устойчивости и неустойчивости решения позволяет наблюдать те же эффекты, что и непосредственно численное моделирование изменения намагниченности. Плюсом данной схемы является то, что основные расчеты проводятся аналитически.

В заключении сформулированы основные результаты и выводы.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

В диссертационной работе предложена новая математическая модель, описывающая анизотропный ферромагнетик с упругопластической деформацией структуры. В модельном гамильтониане ферромагнетика учтены нелокальные члены, отвечающие анизотропии намагниченности при внесении в

кристаллическую структуру локальных дефектов (локальных напряжений). На основе предложенной модели разработаны алгоритмы и комплекс программ для проведения численных расчетов полей локальной намагниченности и основных магнитных характеристик системы в процессе изменения температурного и полевого режима. С помощью разработанного комплекса программ были получены следующие результаты.

1. Было установлено, что учет слагаемых ω_a , ω_{mi} в модельном гамильтониане приводит к возникновению областей, где локальная намагниченность, отличается от преобладающего направления. Этот эффект отражает процесс зарождения магнитных доменов.

2. При тестировании модели на примерах ферромагнетиков с низкой температурой Кюри и высокой температурой плавления было получено, что наличие дефектов структуры вызывает снижение самопроизвольной намагниченности за счет увеличения числа магнитных доменов, сдвиг точки Кюри в область более низких температур, увеличение коэрцитивной силы и изменение формы петли гистерезиса. То есть, верификация модели показала, что результаты численных экспериментов, подтверждены известными фактами теории магнетизма.

3. Для Ni было проведено сравнение расчетных данных с результатами эксперимента. Магнитные характеристики модели поликристалла, состоящего из зерен квадратной формы размерами 100 нм , с плотностью дислокаций $\rho = 10^{11}\text{ см}^{-2}$, сравнивались с данными, полученными для СМК состояния Ni 99.99% при $300\text{--}400\text{ }^\circ\text{K}$. Было показано, что при указанных ограничениях численные расчеты и эксперимент совпадают.

4. Было показано, что на предварительном этапе моделирования ферромагнетика с деформированной структурой могут быть использованы аналитические методы теории нелинейной динамики для определения диапазонов значений управляющих параметров модели (координатных направлений, температуры и внешнего магнитного поля), в которых энергия, создаваемая дефектом, вносит существенный вклад, а решение обладает требуемыми свойствами.

Полученные результаты определяют пригодность модели для расчета магнитных характеристик анизотропного ферромагнетика с дефектами структуры при значениях температуры и внешнего магнитного поля, не вызывающих изменения структурного состояния и снижения внутренних напряжений материала.

Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах:

Работы, опубликованные в изданиях из перечня ВАК:

1. Реализация модели Изинга для магнетиков в случае слабого топологического беспорядка / О. В. Емченко, С. А. Маякова // Вестник УГАТУ, 2004. Т.5. № 2(10). С.67-73.

2. Устойчивость и бифуркации в динамических системах, описывающих ферромагнетики с упругопластическими деформациями / О. В. Емченко, С. А. Маякова // Вестник УГАТУ, 2006. Т.7. №2(15). С.44-50.

3. Моделирование процесса изменения локальной намагниченности под воздействием внешнего поля и температуры / С. А. Маякова // Вестник УГАТУ, 2007. Т.9. № 5(23). С. 93-100.

4. Параллельная реализация модели Изинга для ферромагнетика с дефектной структурой / О. В. Емченко, С. А. Маякова, К. И. Михайленко // Обзорные прикладной и промышленной математики, 2004. Т.11. № 4. С.880.

5. Фазовые переходы в двумерной модели Изинга для ферромагнетика с дефектной структурой / О. В. Емченко, С. А. Маякова // Обзорные прикладной и промышленной математики, 2005. Т.12. № 2. С.361.

Работы, опубликованные в других изданиях:

1. Локальная магнитная анизотропия ферромагнетиков со слабым топологическим беспорядком / О. В. Емченко, С. А. Маякова // Новые программные средства для предприятий Урала: Материалы третьей региональной научно-технической конференции 21-22 декабря 2004 г. С.167-171.

2. Модель Изинга для магнетика в случае слабого топологического беспорядка / О. В. Емченко, С. А. Маякова, К. И. Михайленко // Современные проблемы физики и математики: Труды всероссийской конференции (16-17 сентября 2004г., г. Стерлитамак). Уфа: Гилем, 2004. Т.1. С.224-228.

3. Параллельная реализация модели Изинга для магнетика в случае слабого топологического беспорядка / О. В. Емченко, С. А. Маякова, К. И. Михайленко // Тр. Матем. центра им. Н.И. Лобачевского. Т.28. Модели механики сплошной среды: Материалы XVII сессии Межд. школы по моделям механики сплошной среды, Казань, 4 – 10 июля 2004 г. Казань: Изд-во Казан. матем. об-ва, 2004. С. 78-81.

4. Стохастическое моделирование критического поведения неупорядоченной трехмерной модели Изинга. Параллельная реализация / О. В. Емченко, С. А. Маякова, К. И. Михайленко // Актуальные проблемы математики. Мат. модели современного естествознания: межвуз. сборник. Изд-во УГАТУ, 2004. С.127-130.

5. Применение методов теории хаотизации к уравнениям, описывающим динамику намагниченности под воздействием внешнего поля и температуры / С. А. Маякова // Мавлютовские чтения: сб. трудов Всероссийской молодежной научной конференции. Уфа, 2007. Т.5. С.58-60.

6. Влияние анизотропии и магнито-упругих взаимодействий на динамику модели никеля / С. А. Маякова // Интеллектуальные системы обработки информации и управления: сб. статей 2-ой региональной зимней школы-семинара аспирантов и молодых ученых (13-17 февраля 2007 г.). Уфа: Издательство «Технология», 2007. Т.1. С. 293-298.

МАЯКОВА СВЕТЛАНА АЛЕКСЕЕВНА

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ЛОКАЛЬНОЙ МАГНИТНОЙ АНИЗОТРОПИИ
В ФЕРРОМАГНЕТИКАХ
С УПРУГОПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИЕЙ**

Специальность 05.13.18
«Математическое моделирование, численные методы
и комплексы программ»

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Подписано к печати 19.08.2008. Формат 60x84 1/16.
Бумага офсетная. Печать плоская. Гарнитура Таймс.
Усл. печ. л. 1,0. Усл. кр. – отт. 1,0. Уч.-изд. л. 0,9.
Тираж 100 экз. Заказ № 307

ГОУ ВПО Уфимский государственный авиационный технический университет
Центр оперативной полиграфии
450000, Уфа-центр, ул. К.Маркса, 12