

01:05
©1995 г.

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРНОЙ РЕЛАКСАЦИИ И МАГНИТНЫХ СВОЙСТВ АМОРФНЫХ СПЛАВОВ

Д.С.Рыбин, В.И.Ладьянов, В.Е.Шудегов

Удмуртский научный центр, Физико-технический институт УрО РАН,
426001, Ижевск, Россия
(Поступило в Редакцию 1 ноября 1994 г.)

В рамках дисклинационной модели строения аморфных металлических сплавов получено выражение для коэрцитивной силы H_c аморфных ферромагнетиков при движении одиночной гибкой доменной границы в случайном поле дисклинационных мультиполей. Показано, что наблюдаемые численные значения и характер поведения H_c в процессе структурной релаксации хорошо согласуются с дисклинационной моделью строения аморфных тел. Утверждается, что искаженные дисклинационные мультиполи, являясь одновременно как неотъемлемыми элементами структуры некристаллических конденсированных объектов, так и источниками флуктуаций магнитоупругой анизотропии, определяют нижний принципиально непреодолимый порог коэрцитивной силы аморфных ферромагнетиков с отличной от нуля магнитострикцией насыщения.

В последнее время для описания структуры аморфного состояния наряду с непрерывной неупорядоченной сетью атомов и кластерным подходом широко используются модели, основанные на пространствах с постоянной положительной или отрицательной кривизной, а также дисклинационные модели. Проведенный в работах [1-4] анализ перечисленных моделей показал, что все они так или иначе содержат представления о дефектах дисклинационного типа. Поэтому нами был сделан вывод о том, что дисклинации играют фундаментальную роль в формировании аморфного состояния. Причем если в кластерной модели и идеях, основанных на искривленных пространствах, дисклинации играют вспомогательную роль, допуская возможность либо представления кластеров на основе дисклинационных сегментов, либо распрямления искривленного пространства за счет кривизны, вносимой дисклинациями, то в развиваемом нами подходе дисклинации оказываются первопричиной аморфизации. Пример неупорядоченной структуры, полученной введением в кристалл вдоль гексагональной оси перпендикулярно плоскости чертежа системы положительных и отрицательных 60-градусных дисклинаций наклона, приведен на рис. 1. Положительные и отрицательные дисклинации в такой структуре проходят соответственно через пяти- и семикратные кольца связей. Как показано в

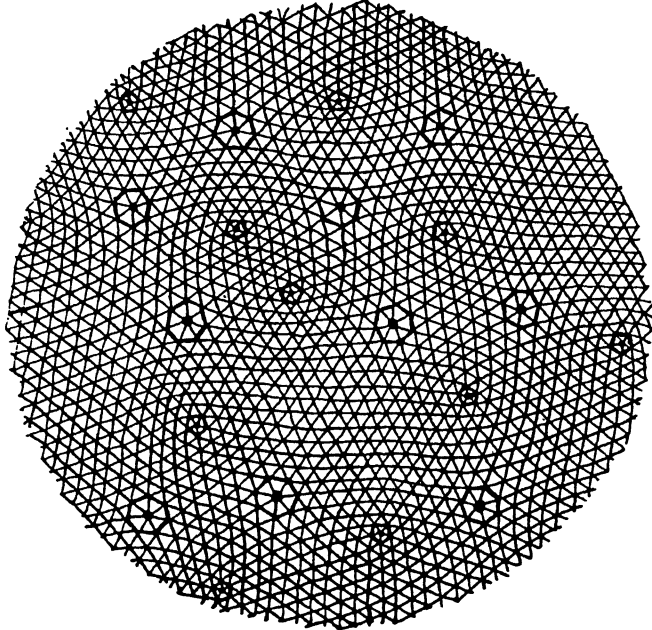


Рис. 1. Неупорядоченная структура, полученная введением в гексагональную решетку ансамбля положительных и отрицательных 60-градусных дисклинаций наклона [1].

[5-8], в рамках дисклинационной модели (ДМ) удается описать строение разных классов стекол (кварцевых, полупроводниковых, металлических и др.), т. е. эта модель является достаточно универсальной. Кроме того, ДМ позволяет рассчитать и объяснить ряд механических и физических свойств аморфных материалов, например уровень напряжения течения, отсутствие деформационного упрочнения, устойчивость против кристаллизации, природу биения плотности стекла, наличие среднего порядка и т. д.

В данной работе, являющейся непосредственным продолжением [1-3], показано, что, рассматривая дисклинационные мультиполи как источники флуктуации магнитоупругой анизотропии, можно непротиворечиво объяснить влияние структурной релаксации на коэрцитивную силу аморфных магнитомягких сплавов (АМС).

Для количественной оценки составляющей коэрцитивной силы, обусловленной непрерывным полем дисклинационных мультиполей, мы воспользуемся результатами статистической теории намагничивания, развитой в работах [9,10]. Согласно [10], коэрцитивная сила для случая одиночной гибкой доменной границы (ДГ), движущейся в непрерывном случайном поле дефектов, задается следующим соотношением:

$$H_c = 0.74 \frac{\vartheta^{2/3}}{\mu_0 I_s D^{4/3} \gamma^{1/3} \xi^{1/3}}, \quad (1)$$

где ϑ — дисперсия силы взаимодействия доменной границы с дефектами, рассчитанная на единицу длины ДГ; I_s — намагниченность насыщения; γ — плотность энергии ДГ; ξ — средняя длина волны случайной силы взаимодействия ДГ с дефектами.

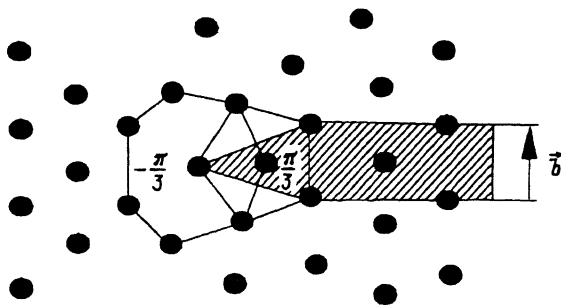


Рис. 2. Представление диполя из 60-градусных дисклинаций наклона через дислокацию с эффективным вектором Бюргерса [11].

Как будет показано ниже, величина ξ много больше среднего расстояния d между отдельными дисклинациями, что подтверждает справедливость применения соотношения (1) в нашем случае. Задачу расчета взаимодействия дисклинации и ДГ сведем к решению задачи взаимодействия ДГ с дислокацией. Как показано в [11] (рис. 2), две дисклинации противоположного знака можно заменить дислокацией с вектором Бюргерса $|b|$

$$|b| = 2d \operatorname{tg} \frac{\omega}{2}, \quad (2)$$

где ω — абсолютная величина вектора Франка дисклинации (мощность дисклинации), d — расстояние между дисклинациями.

В изотропном случае тензор упругих напряжений, создаваемых в доменной границе и обусловленных магнитострикцией, будет иметь три независимые компоненты [12]:

$$\sigma_{11} = 3G\lambda_s \sin^2 \varphi, \quad \sigma_{13} = -\frac{3}{2}G\lambda_s \sin 2\varphi, \quad \sigma_{33} = -3G\lambda_s \sin^2 \varphi, \quad (3)$$

где G — модуль сдвига, λ_s — магнитострикция насыщения, φ — угол между вектором спонтанной намагниченности и направлением приложенного напряжения.

Ортонормированная система координат выбрана так, что ось X направлена по нормали к поверхности пленочного образца и лежит в плоскости доменной границы, а ось Y совпадает с нормалью к плоскости ДГ. Следуя [12], силу, действующую со стороны одиночной дислокации на ДГ, можно оценить с помощью соотношения Пича-Келера [13]

$$F_i = \oint dl \times (\sigma b), \quad (4)$$

где dl — единичный вектор, направленный вдоль линии дислокации.

Однако, как отмечено, например, в [14,15], еще меньшей энергией, чем дисклинационный диполь, обладает дисклинационный квадруполь за счет большей взаимной экранировки полей напряжений, наведенных дисклинациями. При моделировании структуры аморфных веществ, как видно из рис. 1, дисклинации с противоположными знаками в основном располагаются в виде искаженных квадруполей. Поэтому дисклинационный квадруполь можно рассматривать как простейший элемент

структуры. Он будет эквивалентен дислокационному диполю, для которого можно оценить силу F_i , модифицируя (4) к виду

$$F_i = -6d^3 \operatorname{tg} \frac{\omega}{2} G \lambda_s \sin 2\varphi \left(\frac{\partial \varphi_i}{\partial y} \right). \quad (5)$$

В дальнейшем для упрощения расчетов условимся считать, что средний размер линии дисклинации — d , а средний объем, занимаемый одним квадруполем, — d^3 .

Для системы независимых хаотически расположенных дисклинационных квадруполей дисперсия случайной силы, оцениваемая по методике, приведенной в [16], будет равна

$$\vartheta = 6.75\pi^2 d^6 \operatorname{tg}^2 \frac{\omega}{2} G^2 \lambda_s^2 \frac{\rho D}{\delta}, \quad (6)$$

где ρ — объемная плотность квадруполей, рассчитанная как количество квадруполей, приходящихся на единицу объема.

Выражение (6) получено в приближении равномерного поворота намагниченности внутри ДГ. Величину ξ определим из равенства

$$\xi = 2\pi \left[\sum_i \langle F_i^2 \rangle / \sum_i \left\langle \left(\frac{\partial F_i}{\partial y} \right)^2 \right\rangle \right]^{1/2}. \quad (7)$$

Опуская промежуточные расчеты, которые можно найти в работе [17], получаем $\xi = \delta$. Для аморфных магнитомягких сплавов на основе железа $\delta \approx 100$ нм, что подтверждает справедливость высказанного выше допущения $\xi \gg d$. С учетом (6) выражение коэрцитивной силы (1) для случая движения ДГ в непрерывном поле системы несквозных хаотически расположенных дисклинационных квадруполей принимает вид

$$H_c = 12.2 \frac{\rho^{2/3} d^4 \operatorname{tg}^{4/3}(\omega/2) G^{4/3} \lambda_s^{4/3}}{\mu_0 I_s D^{2/3} \gamma^{1/3} \delta}. \quad (8)$$

Подставим следующие значения величин, входящих в равенство (8) для сплава $\text{Fe}_{80}\text{B}_{20}$: $d = 1$ нм, $\omega = \pi/3$, $G = 65$ ГПа, $\lambda_s = 30 \cdot 10^6$, $\mu_0 I_s = 1.6$ Тл, $D = 80$ нм, $\gamma = 6.9 \cdot 10^{-4}$ Дж/м², $\delta = 87$ нм, $\rho = 10^{26}$ м⁻³ [12,18]. Тогда получим приблизительное значение коэрцитивной силы 507 А/м, что находится в хорошем соответствии с известными экспериментальными результатами для этой системы [19,20].

Полученные численные результаты показывают, что нижний предел коэрцитивной силы будет определяться в АМС с ферромагнитным упорядочением не флуктуациями обмена [21], дающими значение $H_c \approx 8 \cdot 10^{-4}$ А/м, а характером распределения и мощностью дисклинаций как источников некристаллических элементов симметрии. Все это хорошо согласуется с имеющимися экспериментальными результатами по характеру поведения коэрцитивной силы в процессе структурной релаксации. Известно, что в магнитострикционных сплавах термической обработкой не удастся понизить H_c на несколько порядков

[22–24]. Ранее это объяснялось значительным вкладом в коэрцитивную силу дефектов технологического происхождения (например, неровностей поверхности, каверн и т. д.). Действительно, результирующая H_c будет складываться из нескольких составляющих

$$H_c^{3/2} = \sum_i H_i^{3/2},$$

где различные значения i относятся к разным типам мест пиннинга доменной границы.

Не подвергая сомнению эффективность технологических дефектов и весомость их вклада в H_c , можно отметить, что устранение последних не способно, как показывают результаты независимых экспериментов [25,26], существенно уменьшить величину коэрцитивной силы. Таким образом, вводя дисклинационный мультиполь как неотъемлемый элемент структуры некристаллического твердого тела и рассматривая его как внутренне присущий аморфному магнетику источник флуктуаций магнитоупругой анизотропии, этот факт удастся объяснить.

Интересно отметить, что после релаксации неупорядоченной структуры, представленной на рис. 1, которая была проведена в компьютерном эксперименте методом молекулярной динамики авторами [2], объемная плотность дисклинаций возросла примерно в 3 раза. Соответственно расстояние между дисклинациями уменьшилось в 1.44 раз. Аналогичные результаты по увеличению объемной плотности источников внутренних напряжений, названных Кронмюллером квазидислокационными диполями, получены экспериментально в работе [27]. Указанное изменение концентрации дефектов в соответствии с формулой (8) приводит к уменьшению коэрцитивной силы, обычно наблюдаемому в эксперименте при структурной релаксации АМС системы металл–металлоид (рис. 3). Важно указать, что в рамках дислокационных представлений подобное изменение концентрации не находит соответствующего объяснения.

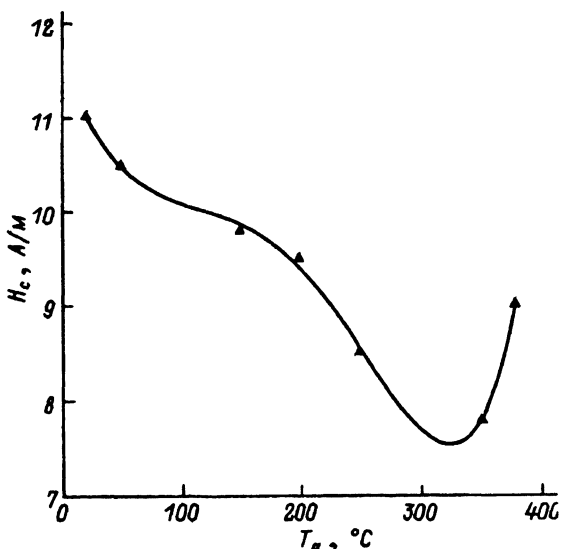


Рис. 3. Зависимость коэрцитивной силы металлического стекла системы $Fe_{80}V_{13}Si_5C_2$ от температуры отжига. Рост H_c после $350^\circ C$ обусловлен кристаллизацией образца.

Таким образом, можно утверждать, что непротиворечивость экспериментально наблюдаемых магнитных свойств и их изменений с результатами, предсказываемыми дисклинационной моделью строения АМС.

Список литературы

- [1] *Литачев В.А., Волков А.Е., Шудегов В.Е.* Континуальная теория дефектов. Л., 1986. 232 с.
- [2] *Литачев В.А., Михайлин А.И., Шудегов В.Е.* // Моделирование в механике. Сб. науч. тр. Новосибирск, 1987. Т. 1 (18). № 3. С. 105-130.
- [3] *Шудегов В.Е.* Роль дисклинаций в физике твердого тела. Ч. 2. Дисклинации в кластерах и стеклах. Ижевск, 1992. 44 с.
- [4] *Шудегов В.Е.* // Вестник Удмурдского ун-та. 1993. Т. 2. Вып. 5. С. 71-80.
- [5] *Литачев В.А., Шудегов В.Е.* // ФХС. 1989. Т. 15. № 3. С. 510-513.
- [6] *Литачев В.А., Шудегов В.Е.* // Физика некристаллических твердых тел. Сб. науч. тр. Вып. 10. Ижевск, 1990. С. 92-98.
- [7] *Литачев В.А., Михайлин А.И., Шудегов В.Е.* // Вопросы физики и механики материалов. Сб. науч. тр. Новгород, 1992. С. 99-128.
- [8] *Каширин В.Б., Шудегов В.Е.* // ФХС. 1993. Т. 19. № 3. С. 482-490.
- [9] *Иванов А.А.* // ФММ. 1974. Т. 38. № 1. С. 14-21.
- [10] *Иванов А.А.* // ФММ. 1980. Т. 49. № 5. С. 954-964.
- [11] *Friedel J.* // Proc. of the 6th General Conf. of the European Physical Society. Vol. 1. Prague, 1984. P. 25-37.
- [12] *Kronmüller H., Cröger V.* // J. Phys. 1981. Vol. 42. N 3. P. 1285-1292.
- [13] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теория упругости. М.: Наука, 1987. 248 с.
- [14] *Литачев В.А., Хайров Р.Ю.* Введение в теорию дисклинаций. Л., 1975. 183 с.
- [15] *Владимиров В.И., Романов А.Е.* Дисклинации в кристаллах. Л.: Наука, 1986. 224 с.
- [16] *Иванов А.А., Лобов И.В., Воробьев Ю.Д.* // ФММ. 1984. Т. 58. № 1. С. 11-20.
- [17] *Рыбин Д.С., Шудегов В.Е.* // Вестник Удмурдского университета. 1994. В печати.
- [18] *Судзуки К., Фудзимори Х., Хасимото К.* Аморфные металлы. М.: Metallurgia, 1987. 328 с.
- [19] *Пушкарь В.Н., Сандлер Л.М., Троценков Ю.Н.* и др. // Металлофизика. 1986. Т. 8. № 2. С. 117-118.
- [20] *Онума С., Накамучи Ю., Мацумото Т.* // Быстрозакаленные металлические сплавы /Под ред. С. Штиба, Г. Варлимонта. М.: Metallurgia, 1989. 386 с.
- [21] *Kronmüller H.* // JMMM. 1981. Vol. 24. P. 159-167.
- [22] *Кекало И.Б., Леффлер Ф.* // ФММ. 1989. Т. 68. № 2. С. 280-288.
- [23] *Abrosimova G.E., Zhukov A.P., Ponomarev B.K.,* // Phys. Stat. Sol. (a). 1989. Vol. 111. P. K237-K241.
- [24] *Lin Zhao-Hua* // IEEE Trans. Magn. 1987. Vol. MAG-23. N 5. P. 2990-2992.
- [25] *Wang Y.J., Kronmüller H.* // Phys. Status. Sol. (a). 1982. Vol. 70. P. 415-421.
- [26] *Potocky L., Kollár P., Juránek Z.* et al. // Phys. Stat. Sol. (a), 1989. Vol. 111. P. 603-609.
- [27] *Grimm H., Kronmüller H.* // JMMM. 1980. Vol. 15-18. P. 1411-1412.