

УДК 537.622

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭВОЛЮЦИИ МАГНИТНОЙ МИКРОСТРУКТУРЫ В СПЛАВАХ ГЕЙСЛЕРА

А. А. Роговой, О. С. Столбова, О. В. Столбов

Институт механики сплошных сред УрО РАН, 614018 Пермь, Россия
E-mails: rogovoy@icmm.ru, sos@icmm.ru, sov@icmm.ru

В рамках теории микромагнетизма строится микроструктурная модель поведения ферромагнитного материала (сплава Гейслера) в магнитном поле. Динамика процесса описывается уравнением Ландау — Лифшица — Гильберта. С использованием процедуры Галеркина дифференциальным соотношениям ставятся в соответствие вариационные уравнения. Рассматривается мартенситная структура типа “елочки” (сдвойникованный вариант мартенсита) с магнитными доменами, расположенными под углом 180° . Границы двойников выполняют роль 90° -градусных магнитных доменных стенок. Исследуется эволюция данной магнитной структуры — движение и взаимодействие 180° -градусных магнитных доменных стенок при наличии внешнего магнитного поля, приложенного в различных направлениях. Методом конечных элементов моделируется образование этих стенок и распределение вектора намагниченности в них.

Ключевые слова: сплав Гейслера, микромагнетизм, магнитные домены, вариационная постановка, метод конечных элементов.

DOI: 10.15372/PMTF20210519

Введение. В последнее время сплав Гейслера Ni_2MnGa является объектом исследований, направленных на разработку новых функциональных материалов, которые изменяют форму и размер под действием внешнего магнитного поля (деформации могут достигать 6–10 %) и восстанавливают их в результате обратного фазового перехода, который также может управляться магнитным полем, но значительно большей напряженности. Реакция материала на приложенное магнитное поле почти мгновенная, вследствие чего это управление является безынерционным.

Если в сплавах Гейслера прямой фазовый переход первого рода из аустенитного (высокотемпературного) состояния в мартенситное (низкотемпературное) реализуется только за счет изменения температуры (охлаждения), то кубическая кристаллическая ячейка аустенита преобразуется в тетрагональную ячейку мартенсита [1] с ребрами длиной a , a и c ($a > c$), имеющую три варианта. Ячейки двух вариантов мартенсита образуют сдвоенные согласованные между собой структуры (двойники), что приводит только к незначительной объемной деформации. Приложение напряжения и (или) внешнего магнитного поля в этом состоянии вызывает упругую деформацию и незначительную магнитострикционную деформацию, соответствующую действующим силам и магнитному полю, и сопровождается

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 20-01-00031).

процессом раздвойниковогоания, в результате чего имеет место значительная деформация, в 6–10 раз превышающая упругую.

Так как температура материала в мартенситном состоянии значительно меньше температуры Кюри, мартенсит в различных вариантах самопроизвольно намагничен даже в отсутствие внешнего магнитного поля. Вектор локальной намагниченности в каждом варианте мартенсита ориентирован вдоль одного из кристаллографических направлений, называемого осью легкого намагничивания, и может быть направлен в двух противоположных направлениях. В случае тетрагональной кристаллической ячейки эта ось совпадает с коротким ребром длиной c . Области, составленные из связанных между собой вариантов мартенсита, в которых вектор намагниченности имеет одно направление, образуют магнитные домены. В результате в мартенситном состоянии формируется множество магнитных доменов с различно направленными векторами намагниченности, причем этим доменам энергетически выгодно быть расположенными таким образом, чтобы полная намагниченность материала в отсутствие внешнего магнитного поля была нулевой. Однако при приложении последнего начинается движение стенок магнитных доменов, вращение векторов намагниченности и реориентация (раздвойниковоание) вариантов мартенсита.

Все указанные выше процессы: двойниковоание, раздвойниковоание, движение стенок магнитных доменов и вращения магнитного векторного момента в каждом мезоэлементе, представляющем собой зерно материала, — происходят на уровне структуры материала. Поэтому для их описания необходимо строить физические и микромеханические модели либо структурно-аналитические модели (согласно терминологии В. А. Лихачева). Указанные выше проблемы могут быть решены только в рамках микроструктурного подхода [2, 3], который, в отличие от широко распространенных феноменологических моделей [4, 5], позволяет явно учитывать физические процессы, происходящие в структурных элементах материала, не принимая допущения, обычно используемые для построения феноменологических моделей, и физически обоснованно описывать поведение сложных материалов, претерпевающих конечные деформации и структурные изменения под действием температуры, силы и магнитных полей.

Формализованный подход к построению определяющих уравнений, описывающих поведение сложных сред при наличии конечных деформаций и структурных изменений, предложен в [6] и использован в работе [7] для моделирования процесса управления температурами фазового перехода в ферромагнитном сплаве с памятью формы с помощью магнитного поля. Это поле сдвигает указанные температуры в соответствии с обобщенным законом Клаузиуса — Клапейрона, форма которого для задач механики также сформулирована в [7]. Переориентации мартенситных вариантов и их раздвойниковоания с помощью магнитного поля, вызывающего значительные деформации (основной фактор, определяющий практический интерес к этим сплавам), в этом процессе не происходит. Поэтому естественным продолжением работы [7] является исследование влияния магнитного поля на переориентацию мартенсита.

В механике деформируемых твердых тел вектор намагниченности в существующих микроструктурных моделях термомагнитоупругого поведения сплавов с памятью формы резко изменяется на границе магнитных доменов. В этих моделях не учитывается, что доменная стенка имеет определенную толщину и вектор намагниченности непрерывно изменяется по толщине (см., например, работы [8–10]). Учитывая эти факторы, можно уточнить известные микроструктурные модели механики деформируемых твердых тел и обосновать необходимость такой доработки. Первым шагом в этом направлении является построение в рамках только теории магнетизма микроструктурной модели, в которой одним из структурных элементов является доменная стенка определенной толщины. В работе [11] была построена такая модель, основанная на минимизации функционала магнитной

энергии, и изучены движение доменных стенок Нееля для простейшей доменной структуры и их взаимодействие под влиянием внешнего магнитного поля, приложенного в различных направлениях. В общем случае на процесс, происходящий в доменных стенках в данный момент времени, существенное влияние оказывает его история, которую можно описать, используя уравнение Ландау — Лифшица — Гильберта, что и осуществлено в настоящей работе. Рассматривается структура типа “елочки”, когда мартенситные пластины располагаются относительно разделяющей их плоскости (плоскости габитуса) под углом 90° друг к другу (сдвойникованный вариант мартенсита), при этом в каждом варианте магнитные домены расположены под углом 180° . Границы двойников выполняют роль 90° -градусных магнитных доменных стенок. (N -градусная доменная граница представляет собой переходный слой между соседними доменами A и B с противоположными или совпадающими направлениями векторов намагниченности \mathbf{m}_A и \mathbf{m}_B , в котором направление магнитного момента постепенно меняется с направления \mathbf{m}_A на направление \mathbf{m}_B . Если в этом случае вращение вектора намагниченности происходит в плоскости, совпадающей с плоскостью стенки, граница называется границей Блоха, если вращение происходит в плоскости, перпендикулярной плоскости стенки, то граница называется границей Нееля [12].) Такая структура минимизирует общую энергию деформации, полученную в результате фазового перехода первого рода аустенит — мартенсит (“самоаккомодация” двойникового мартенсита). В случае такой структуры может возникать стенка Блоха и динамика описывается уравнением Ландау — Лифшица — Гильберта. Сначала в отсутствие внешнего магнитного поля с использованием метода конечных элементов в рамках теории микромагнетизма [13] численно моделируются образование 90° - и 180° -градусных магнитных доменных стенок и распределение вектора намагниченности в них. Затем в предположении, что полученная магнитная структура является начальной, исследуется ее эволюция — движение и взаимодействие 180° -градусных магнитных доменных стенок при приложении внешнего магнитного поля в различных направлениях.

1. Основные соотношения теории микромагнетизма. Следуя работе [13], намагниченность каждой кристаллической ячейки будем описывать вектором спонтанной намагниченности \mathbf{M} , который имеет постоянную длину $|\mathbf{M}| = M_s$ (M_s — намагниченность насыщения) и ориентирован вдоль одного из кристаллографических направлений — оси легкого намагничивания — в двух противоположных направлениях. Изменения направления этого вектора во внешнем и внутреннем (собственном) магнитных полях (его динамика) описываются уравнением Ландау — Лифшица — Гильберта

$$\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} = -\gamma(\mathbf{m} \times \mathbf{H}_{eff}) + \alpha \left(\mathbf{m} \times \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} \right), \quad (1.1)$$

где γ — гиромагнитное отношение; α — параметр затухания (диссипации); $\mathbf{m} = \mathbf{M}/M_s$ — единичный вектор намагниченности; \mathbf{H}_{eff} — вектор напряженности эффективного поля:

$$\mathbf{H}_{eff} = \mathbf{H}_{ext} + \mathbf{H}_{int} + \mathbf{H}_{exch} + \mathbf{H}_{anis} + \mathbf{H}_{m-el}, \quad (1.2)$$

\mathbf{H}_{ext} — вектор напряженности приложенного внешнего поля; \mathbf{H}_{int} — вектор напряженности внутреннего поля размагничивания, созданного приложенным внешним полем; \mathbf{H}_{exch} — вектор напряженности обменного поля; \mathbf{H}_{anis} — вектор напряженности поля анизотропии; \mathbf{H}_{m-el} — вектор напряженности магнитоупругого поля, вызывающего магнито-стрикционную деформацию, которая существенно меньше фазовой деформации и которой наряду с этим магнитным полем обычно пренебрегается [8].

Эффективное поле \mathbf{H}_{eff} определяется выражением (см., например, [8])

$$\mathbf{H}_{eff} = -\frac{1}{\mu_0 M_s} \frac{\delta \psi}{\delta \mathbf{m}}, \quad (1.3)$$

где μ_0 — магнитная постоянная. Вариационная производная

$$\frac{\delta\psi}{\delta\mathbf{m}} = \frac{\partial\psi}{\partial\mathbf{m}} - \nabla \cdot \frac{\partial\psi}{\partial(\nabla\mathbf{m})} \quad (1.4)$$

является уравнением Эйлера — Остроградского, доставляющим минимум функционалу полной магнитной энергии ψ по переменной \mathbf{m} , а условие

$$\left[\mathbf{m} \times \left(\mathbf{n} \cdot \frac{\partial\psi}{\partial(\nabla\mathbf{m})} \right) \right] \Big|_{\Gamma} = \mathbf{0} \quad (1.5)$$

(\mathbf{n} — внешняя единичная нормаль к поверхности тела Γ) — естественным граничным условием для этого функционала. Выражение для полной плотности магнитной энергии ψ представляется в виде (см., например, [8])

$$\psi = \psi_{ext} + \psi_{int} + \psi_{exch} + \psi_{anis}.$$

Здесь первые два слагаемых — плотность магнитной энергии приложенного внешнего магнитного поля (энергии Зеемана и размагничивания), последние два — плотность внутренней магнитной энергии, всегда существующей в теле (энергии обмена и анизотропии):

$$\begin{aligned} \psi_{ext} &= -\mu_0 M_s \mathbf{H}_0 \cdot \mathbf{m}, & \psi_{int} &= -\mu_0 M_s \mathbf{H}_{demag} \cdot \mathbf{m}/2, \\ \psi_{exch} &= A_{exch} |\nabla\mathbf{m}|^2, & \psi_{anis} &= K_{anis} (1 - (\mathbf{m} \cdot \mathbf{p}^\alpha)^2), \end{aligned} \quad (1.6)$$

A_{exch} — обменная постоянная; K_{anis} — константа анизотропии; \mathbf{p}^α — направление легкой оси варианта α в случае существования в кристалле нескольких легких осей. (Далее предполагается, что в кристалле существует только одна легкая ось.) В результате из соотношений (1.3), (1.4), (1.6) (см. также [8]) следует

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{ext} &= \mathbf{H}_0, & \mathbf{H}_{int} &= \mathbf{H}_{demag}, \\ \mathbf{H}_{exch} &= \frac{2A_{exch}}{\mu_0 M_s} \Delta\mathbf{m}, & \mathbf{H}_{anis} &= \frac{2K_{anis}}{\mu_0 M_s} (\mathbf{m} \cdot \mathbf{p}^\alpha) \mathbf{p}^\alpha. \end{aligned} \quad (1.7)$$

Граничное условие (1.5) с учетом (1.7) принимает вид

$$2A_{exch} [\mathbf{m} \times (\mathbf{n} \cdot \nabla\mathbf{m})] \Big|_{\Gamma} = \mathbf{0}. \quad (1.8)$$

Из условия $\mathbf{m} \cdot \mathbf{m} = 1$ для производной по нормали получаем $\mathbf{n} \cdot \nabla(\mathbf{m} \cdot \mathbf{m}) = 0$, откуда следует, что $(\mathbf{n} \cdot \nabla\mathbf{m}) \cdot \mathbf{m} = 0$, т. е. вектор $(\mathbf{n} \cdot \nabla\mathbf{m})$ перпендикулярен вектору \mathbf{m} . Тогда равенство (1.8) будет выполняться только в том случае, если хотя бы один из множителей равен нулю. Вектор $\mathbf{m} \neq \mathbf{0}$, значит, другой вектор должен быть равен нулю, что является граничным условием Неймана для вектора \mathbf{m} :

$$(\mathbf{n} \cdot \nabla\mathbf{m}) \Big|_{\Gamma} = \mathbf{0}.$$

Напряженность действующего внешнего поля и поля размагничивания определяется по формуле $\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_{demag}$. В отсутствие электрических токов это поле должно быть безвихревым: $\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{0}$, что при постоянном \mathbf{H}_0 сводится к равенству $\nabla \times \mathbf{H}_{demag} = \mathbf{0}$, которое будет выполняться всегда, если положить $\mathbf{H}_{demag} = -\nabla\varphi$ (φ — скаляр, зависящий от векторной координаты \mathbf{x}). Индуктивность магнитного поля \mathbf{B} , которая должна удовлетворять уравнению $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$, вводится соотношением $\mathbf{B}(\mathbf{x}) = \mu_0(\mathbf{H} + M_s \mathbf{m})$ для $\mathbf{x} \in \Omega^{(in)}$, где $\Omega^{(in)}$ — область, занимаемая телом, и $\mathbf{B}(\mathbf{x}) = \mu_0 \mathbf{H}$ для $\mathbf{x} \in \Omega^{(ex)}$, где $\Omega^{(ex)}$ — область, занимаемая окружающей тело средой. С учетом приведенных выше представлений \mathbf{H} , \mathbf{H}_{demag} и при постоянном \mathbf{H}_0 отсюда следуют уравнение Пуассона для функции φ

$$\nabla \cdot \nabla\varphi = M_s \nabla \cdot \mathbf{m} \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega^{(in)} \quad (1.9)$$

и уравнение Лапласа

$$\nabla \cdot \nabla \varphi = 0 \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega^{(ex)}. \quad (1.10)$$

Естественным требованием, которому должно удовлетворять φ , является условие

$$\varphi \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad \mathbf{x} \rightarrow \infty.$$

На поверхности Γ , отделяющей тело от окружающей его среды, выполняется равенство

$$\varphi^{(in)}|_{\Gamma} = \varphi^{(ex)}|_{\Gamma},$$

где индекс “(in)” соответствует телу; “(ex)” — его внешности.

Другие граничные условия, которым должна удовлетворять функция φ , определяются поведением векторов \mathbf{H} и \mathbf{B} на поверхности Γ [11]:

$$(\nabla \varphi^{(in)} - \nabla \varphi^{(ex)})|_{\Gamma} \cdot \boldsymbol{\tau} = 0.$$

Здесь $\boldsymbol{\tau}$ — единичный касательный вектор к поверхности тела Γ ;

$$(\nabla \varphi^{(in)} - \nabla \varphi^{(ex)})|_{\Gamma} \cdot \mathbf{n} = \mathbf{M} \cdot \mathbf{n}. \quad (1.11)$$

С учетом (1.7) и представления \mathbf{H}_{demag} через скалярный потенциал φ выражение для напряженности эффективного поля (1.2) принимает вид

$$\mathbf{H}_{eff} = \mathbf{H}_0 - \nabla \varphi + \frac{2A_{exch}}{\mu_0 M_s} \Delta \mathbf{m} + \frac{2K_{anis}}{\mu_0 M_s} (\mathbf{m} \cdot \mathbf{p}^\alpha) \mathbf{p}^\alpha. \quad (1.12)$$

2. Вариационные уравнения. Используя подход Галеркина, представим уравнения (1.1), (1.9), (1.10) и граничные условия (1.8), (1.11) в виде

$$\int_{\Omega^{(in)}} \left[\frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} + \gamma (\mathbf{m} \times \mathbf{H}_{eff}) - \alpha \left(\mathbf{m} \times \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} \right) \right] \cdot \delta \mathbf{m} d\Omega^{(in)} \pm \int_{\Gamma} [\mathbf{m} \times (\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{m})] \cdot \delta \mathbf{m} d\Gamma = 0; \quad (2.1)$$

$$\int_{\Omega^{(in)}} (\nabla \cdot \nabla \varphi - M_s \nabla \cdot \mathbf{m}) \delta \varphi d\Omega^{(in)} + \int_{\Omega^{(ex)}} (\nabla \cdot \nabla \varphi) \delta \varphi d\Omega^{(ex)} \pm \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot (\nabla \varphi^{(in)} - \nabla \varphi^{(ex)} - M_s \mathbf{m}) \delta \varphi d\Gamma = 0, \quad (2.2)$$

где β — постоянный коэффициент, значение которого определяется ниже; $\delta \mathbf{m}$, $\delta \varphi$ — вариации вектора \mathbf{m} и скаляра φ .

В первые два интеграла уравнения (2.2) входят вторые производные по координатам от φ , что требует при численном решении использования для этих величин аппроксимации не ниже квадратичной. С помощью легко доказываемого равенства $\nabla \cdot (A\mathbf{b}) = \mathbf{b} \cdot (\nabla A) + A(\nabla \cdot \mathbf{b})$, где A , \mathbf{b} — произвольные скаляр и вектор, можно значительно ослабить это требование и осуществить так называемую слабую постановку. Записывая данное равенство в виде $A(\nabla \cdot \mathbf{b}) = \nabla \cdot (A\mathbf{b}) - \mathbf{b} \cdot (\nabla A)$, принимая $A = \delta \varphi$, $\mathbf{b} = \nabla \varphi$ или $\mathbf{b} = M_s \mathbf{m}$ и применяя теорему Остроградского — Гаусса, приводим первую строку в (2.2) к виду

$$\int_{\Omega^{(in)}} (\nabla \cdot \nabla \varphi - M_s \nabla \cdot \mathbf{m}) \delta \varphi d\Omega^{(in)} + \int_{\Omega^{(ex)}} (\nabla \cdot \nabla \varphi) \delta \varphi d\Omega^{(ex)} = \int_{\Gamma} \mathbf{n}^{(in)} \cdot [(\nabla \varphi^{(in)} - M_s \mathbf{m}) \delta \varphi^{(in)}] d\Gamma +$$

$$\begin{aligned}
& + \int_{\Gamma} \mathbf{n}^{(ex)} \cdot [(\nabla\varphi^{(ex)}) \delta\varphi^{(ex)}] d\Gamma + \int_{\Gamma_{\infty}} \mathbf{n}^{(\infty)} \cdot [(\nabla\varphi^{(\infty)}) \delta\varphi^{(\infty)}] d\Gamma_{\infty} - \\
& - \int_{\Omega^{(in)}} (\nabla\varphi - M_s \mathbf{m}) \cdot \nabla\delta\varphi d\Omega^{(in)} - \int_{\Omega^{(ex)}} \nabla\varphi \cdot \nabla\delta\varphi d\Omega^{(ex)}.
\end{aligned}$$

Учитывая, что $\mathbf{n}^{(in)} = \mathbf{n}$, $\mathbf{n}^{(ex)} = -\mathbf{n}$, $\varphi \rightarrow 0$ при $\mathbf{x} \rightarrow \infty$ и $\varphi^{(in)}|_{\Gamma} = \varphi^{(ex)}|_{\Gamma}$, преобразуем правую часть этого равенства, объединяя интегралы по поверхности Γ :

$$\begin{aligned}
& \int_{\Gamma} \mathbf{n} \cdot [(\nabla\varphi^{(in)} - \nabla\varphi^{(ex)} - M_s \mathbf{m}) \delta\varphi] d\Gamma - \\
& - \int_{\Omega^{(in)}} (\nabla\varphi - M_s \mathbf{m}) \cdot \nabla\delta\varphi d\Omega^{(in)} - \int_{\Omega^{(ex)}} \nabla\varphi \cdot \nabla\delta\varphi d\Omega^{(ex)}.
\end{aligned}$$

Выбирая в последнем интеграле уравнения (2.2) знак “минус”, получаем следующую слабую форму вариационного уравнения (2.2), в которую входят только первые производные по координатам от φ :

$$\int_{\Omega^{(in)}} (\nabla\varphi - M_s \mathbf{m}) \cdot \nabla\delta\varphi d\Omega^{(in)} + \int_{\Omega^{(ex)}} \nabla\varphi \cdot \nabla\delta\varphi d\Omega^{(ex)} = 0. \quad (2.3)$$

Вернемся к уравнению (2.1). Из равенства $\mathbf{m} \cdot \mathbf{m} = 1$ следует, что $\delta(\mathbf{m} \cdot \mathbf{m}) = 2\mathbf{m} \cdot \delta\mathbf{m} = 0$, т. е. векторы $\delta\mathbf{m}$ и \mathbf{m} взаимно ортогональны. Это требование удовлетворяется, если положить $\delta\mathbf{m} = \mathbf{m} \times \delta\boldsymbol{\xi}$, где $\delta\boldsymbol{\xi}$ — любые пробные вектор-функции, не совпадающие по направлению с \mathbf{m} . В результате получаем

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega^{(in)}} \left[\frac{\partial\mathbf{m}}{\partial t} + \gamma(\mathbf{m} \times \mathbf{H}_{eff}) - \alpha \left(\mathbf{m} \times \frac{\partial\mathbf{m}}{\partial t} \right) \right] \cdot (\mathbf{m} \times \delta\boldsymbol{\xi}) d\Omega^{(in)} \pm \\
& \pm \beta \int_{\Gamma} [\mathbf{m} \times (\mathbf{n} \cdot \nabla\mathbf{m})] \cdot (\mathbf{m} \times \delta\boldsymbol{\xi}) d\Gamma = 0.
\end{aligned}$$

Используя известные свойства смешанного произведения векторов и скалярного произведения двух векторных произведений векторов, выбирая функции $\delta\boldsymbol{\xi}$ удовлетворяющими условию $\delta\boldsymbol{\xi} \perp \mathbf{m}$, откуда следует равенство $\mathbf{m} \cdot \delta\boldsymbol{\xi} = 0$, и учитывая, что $\mathbf{m} \cdot \mathbf{m} = 1$, приводим это уравнение к виду

$$\int_{\Omega^{(in)}} \left[\left(\mathbf{m} \times \frac{\partial\mathbf{m}}{\partial t} \right) - \gamma \mathbf{H}_{eff} + \alpha \frac{\partial\mathbf{m}}{\partial t} \right] \cdot \delta\boldsymbol{\xi} d\Omega^{(in)} \mp \beta \int_{\Gamma} (\mathbf{n} \cdot \nabla\mathbf{m}) \cdot \delta\boldsymbol{\xi} d\Gamma = 0.$$

Подставляя в полученное уравнение выражение для эффективного поля (1.12), имеем

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega^{(in)}} \left[\left(\mathbf{m} \times \frac{\partial\mathbf{m}}{\partial t} \right) - \gamma \left(\mathbf{H}_0 - \nabla\varphi + \frac{2A_{exch}}{\mu_0 M_s} \Delta\mathbf{m} + \frac{2K_{anis}}{\mu_0 M_s} (\mathbf{m} \cdot \mathbf{p}^{\alpha}) \mathbf{p}^{\alpha} \right) + \alpha \frac{\partial\mathbf{m}}{\partial t} \right] \cdot \delta\boldsymbol{\xi} d\Omega^{(in)} \mp \\
& \mp \beta \int_{\Gamma} (\mathbf{n} \cdot \nabla\mathbf{m}) \cdot \delta\boldsymbol{\xi} d\Gamma = 0. \quad (2.4)
\end{aligned}$$

Здесь в подинтегральном выражении присутствует величина $\Delta \mathbf{m}$, в которую входят вторые производные по координатам, поэтому при численном решении для величины $\Delta \mathbf{m}$ требуется аппроксимация не ниже квадратичной. Используя известное равенство $\nabla \cdot (A \cdot \mathbf{b}) = (\nabla \cdot A) \cdot \mathbf{b} + A^T \cdot \nabla \mathbf{b}$ (A, \mathbf{b} — произвольные тензор второго ранга и вектор), из которого следует $(\nabla \cdot A) \cdot \mathbf{b} = \nabla \cdot (A \cdot \mathbf{b}) - A^T \cdot \nabla \mathbf{b}$, полагая $A = \nabla \mathbf{m}$, $\mathbf{b} = \delta \boldsymbol{\xi}$ и применяя теорему Остроградского — Гаусса, получаем

$$\begin{aligned} \int_{\Omega^{(in)}} (\nabla \cdot \nabla \mathbf{m}) \cdot \delta \boldsymbol{\xi} d\Omega^{(in)} &= \int_{\Omega^{(in)}} [\nabla \cdot (\nabla \mathbf{m} \cdot \delta \boldsymbol{\xi}) - (\nabla \mathbf{m})^T \cdot \nabla \delta \boldsymbol{\xi}] d\Omega^{(in)} = \\ &= \int_{\Gamma} (\mathbf{n} \cdot \nabla \mathbf{m}) \cdot \delta \boldsymbol{\xi} d\Gamma - \int_{\Omega^{(in)}} (\nabla \mathbf{m})^T \cdot \nabla \delta \boldsymbol{\xi} d\Omega^{(in)}. \end{aligned}$$

Выбирая в последнем интеграле уравнения (2.4) знак “плюс” и полагая $\beta = (2\gamma A_{exch})/(\mu_0 M_s)$, находим

$$\begin{aligned} \int_{\Omega^{(in)}} \left[\left(\mathbf{m} \times \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} \right) - \gamma \left(\mathbf{H}_0 - \nabla \varphi + \frac{2K_{anis}}{\mu_0 M_s} (\mathbf{m} \cdot \mathbf{p}^\alpha) \mathbf{p}^\alpha \right) + \alpha \frac{\partial \mathbf{m}}{\partial t} \right] \cdot \delta \boldsymbol{\xi} d\Omega^{(in)} + \\ + \frac{2\gamma A_{exch}}{\mu_0 M_s} \int_{\Omega^{(in)}} (\nabla \mathbf{m})^T \cdot \nabla \delta \boldsymbol{\xi} d\Omega^{(in)} = 0. \end{aligned}$$

При решении этого вариационного уравнения будем использовать θ -схему. Для этого представим $\mathbf{m}(t)$ в текущий момент времени t в виде $\mathbf{m}_* + \theta \tau \mathbf{v}$, где $\mathbf{m}_* = \mathbf{m}(t_*)$ — намагниченность в предыдущий момент времени t_* ; $\tau = t - t_*$ — шаг по времени; $\theta \in [0, 1]$; $\mathbf{v} = \partial \mathbf{m} / \partial t$. В результате, сохраняя только линейные слагаемые относительно τ , получаем уравнение

$$\begin{aligned} \int_{\Omega^{(in)}} (\mathbf{m}_* \times \mathbf{v} + \alpha \mathbf{v}) \cdot \delta \boldsymbol{\xi} d\Omega^{(in)} - \\ - \gamma \int_{\Omega^{(in)}} \left(\mathbf{H}_0 - \nabla \varphi + \frac{2K_{anis}}{\mu_0 M_s} [(\mathbf{m}_* + \theta \tau \mathbf{v}) \cdot \mathbf{p}^\alpha] \mathbf{p}^\alpha \right) \cdot \delta \boldsymbol{\xi} d\Omega^{(in)} + \\ + \frac{2\gamma A_{exch}}{\mu_0 M_s} \int_{\Omega^{(in)}} [(\nabla \mathbf{m})_*^T + \theta \tau (\nabla \mathbf{v})^T] \cdot \nabla \delta \boldsymbol{\xi} d\Omega^{(in)} = 0. \quad (2.5) \end{aligned}$$

Из условия $\mathbf{m}(t) \cdot \mathbf{m}(t) = 1 \forall t$ следует $\mathbf{m}_* \cdot \mathbf{v} = 0$ и $\delta(\mathbf{m}_* \cdot \mathbf{v}) = \mathbf{m}_* \cdot \delta \mathbf{v} = 0$. Тогда, учитывая, что $\mathbf{m}_* \cdot \delta \boldsymbol{\xi} = 0$, примем в качестве $\delta \boldsymbol{\xi}$ величину $\delta \mathbf{v}$: $\delta \boldsymbol{\xi} = \delta \mathbf{v}$. С помощью метода множителей Лагранжа определим \mathbf{m}_* и \mathbf{v} , так чтобы выполнялись условия $\mathbf{m}_* \cdot \mathbf{v} = 0$ и $\mathbf{m}_* \cdot \delta \mathbf{v} = 0$. В результате уравнение (2.5) представляется в окончательном виде

$$\begin{aligned} \int_{\Omega^{(in)}} (\mathbf{m}_* \times \mathbf{v} + \alpha \mathbf{v} + \lambda \mathbf{m}_*) \cdot \delta \mathbf{v} d\Omega^{(in)} - \\ - \gamma \int_{\Omega^{(in)}} \left(\mathbf{H}_0 - \nabla \varphi + \frac{2K_{anis}}{\mu_0 M_s} [(\mathbf{m}_* + \theta \tau \mathbf{v}) \cdot \mathbf{p}^\alpha] \mathbf{p}^\alpha \right) \cdot \delta \mathbf{v} d\Omega^{(in)} + \\ + \frac{2\gamma A_{exch}}{\mu_0 M_s} \int_{\Omega^{(in)}} [(\nabla \mathbf{m})_*^T + \theta \tau (\nabla \mathbf{v})^T] \cdot \nabla \delta \boldsymbol{\xi} d\Omega^{(in)} + \int_{\Omega^{(in)}} (\mathbf{m}_* \cdot \mathbf{v}) \delta \lambda d\Omega^{(in)} = 0, \quad (2.6) \end{aligned}$$

где λ — множитель Лагранжа.

Построенные связанные вариационные уравнения (2.3), (2.6) позволяют определить φ , \mathbf{v} , λ . Внешнее магнитное поле прикладывается по шагам, и на каждом таком шаге решаются вариационные уравнения, описывающие изменение магнитного поля по другим, внутренним шагам по времени. На внутреннем текущем шаге величина \mathbf{m}_* берется с предыдущего внутреннего шага. После нахождения \mathbf{v} на текущем шаге для уменьшения вычислительной погрешности вектор \mathbf{m} корректируется таким образом, чтобы его длина оставалась единичной:

$$\mathbf{m} = \frac{\mathbf{m}_* + \tau \mathbf{v}}{|\mathbf{m}_* + \tau \mathbf{v}|}.$$

Учитывая, что $|\mathbf{m}| = 1$, процесс по внутренним шагам заканчивается, когда выполняется условие $|\mathbf{m} - \mathbf{m}_*| < 10^{-3}$. Это происходит после выполнения приблизительно 3000 внутренних шагов.

На первом этапе в отсутствие внешнего магнитного поля в качестве \mathbf{m}_* задается начальное распределение намагниченности \mathbf{m} и в результате решения вариационных уравнений определяются начальные границы магнитных доменов и распределение намагниченности в них. Полученная магнитная структура является исходной для внешнего магнитного поля, приложенного на следующем шаге.

Устойчивость численного решения обеспечивается выбором параметра θ : при $\theta > 0,5$ схема устойчива для любых шагов по времени и пространству.

3. Результаты численного моделирования. Рассмотрим sdвойникованный вариант мартенсита сплава Ni_2MnGa (рис. 1). Так как типичные структуры мартенситных пластин в сплаве Гейслера имеют характерный размер 100 нм, выберем расчетную область в виде квадрата $L \times L$, где $L = 220$ нм, и зададим периодические граничные условия (см., например, [11]). Рассматриваемая область размером 220×220 нм (незаштрихованный квадрат на рис. 1) является элементарной ячейкой, которая дублируется вдоль осей x и y и представляет собой структуру, состоящую из двух вариантов мартенсита с короткими осями, направленными под углом 90° друг к другу. Стрелками показано начальное распределение вектора намагниченности (среднее значение в домене), при котором образец не намагничен в отсутствие внешнего магнитного поля. В варианте 1 векторы намагниченности в доменах параллельны оси анизотропии $\mathbf{p}^{(1)}$, направленной под углами 45°

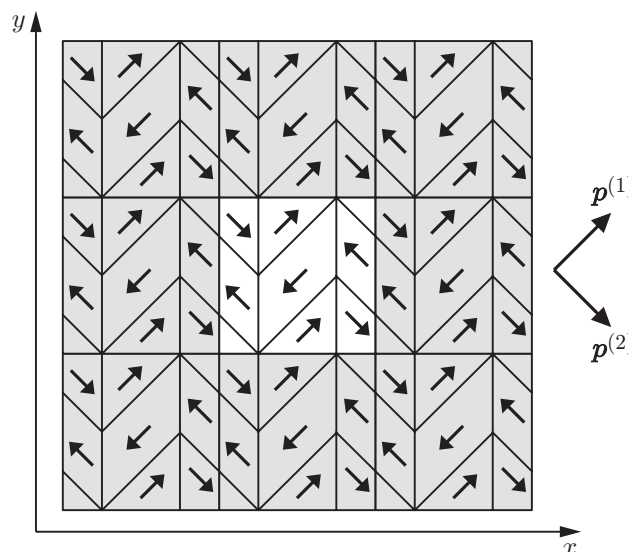


Рис. 1. Расчетная область с периодическими граничными условиями

и -45° к осям x и y . В варианте 2 векторы намагниченности в доменах параллельны оси анизотропии $\mathbf{p}^{(2)}$, направленной под углами 135° и -135° к осям x и y .

Для сплава Ni_2MnGa намагниченность насыщения равна $M_s = 6,015 \cdot 10^5$ А/м, константа магнитокристаллической анизотропии $K_{anis} = 2,5 \cdot 10^5$ Дж/м³ [8, 14], обменная постоянная $A_{exch} = 2 \cdot 10^{-11}$ Дж/м [8, 15]. Толщина доменной стенки для материала с такими параметрами составляет $\Delta \approx \sqrt{A_{exch}/K_{anis}} \approx 9$ нм (см. [12]). Для проведения численного расчета обезразмерим все соотношения, введя характерный размер $l_0 = 2,2$ нм и энергию $\psi_0 = \mu_0 M_s^2 = 4,55 \cdot 10^5$ Дж/м³. Характерный размер выбирался таким образом, чтобы на доменную стенку приходилось приблизительно четыре характерных размера. В результате получаем следующие безразмерные параметры: $\tilde{M}_s = 1$, $\tilde{K}_{anis} = K_{anis}/\psi_0 \approx 0,54$, $\tilde{A}_{exch} = A_{exch}/(\psi_0 l_0^2) \approx 9$. Обезразмерим также напряженность внешнего магнитного поля: $\tilde{H}_0 = \mathbf{H}_0/M_s$ и введем обозначение $\tilde{H}_0 = |\tilde{H}_0|$.

При решении вариационного уравнения (2.6) полагалось, что гиромагнитное отношение равно $\gamma = 2,21 \cdot 10^5$ м/(А·с), параметр затухания $\alpha = 0,5$ (см. [8]). Шаг по времени равен $\tau = \gamma M_s t = 0,05$, $\theta = 0,6$. Задача решалась на регулярной сетке, имеющей 5184 конечных элемента. Незаштрихованный квадрат на рис. 1 был разбит на 1296 одинаковых квадратов, каждый из которых разделен диагоналями на четыре идентичных треугольника. Для вектора \mathbf{v} задавалась квадратичная аппроксимация, для φ и λ — линейная.

Численный расчет выполнялся следующим образом. Задавалось начальное векторное поле намагниченности \mathbf{m} , параллельное оси анизотропии $\mathbf{p}^{(1)}$ (вариант 1 мартенсита) или $\mathbf{p}^{(2)}$ (вариант 2 мартенсита) (см. рис. 1), и полагалось, что в начальный момент времени $\mathbf{v} = \mathbf{0}$. При этих начальных условиях решались связанные вариационные уравнения (2.3), (2.6) в отсутствие внешнего магнитного поля и находилось распределение \mathbf{m} в элементарной ячейке. Затем по шагам прикладывалось магнитное поле, направленное вдоль оси анизотропии $\mathbf{p}^{(1)}$ (задача 1), а также вдоль осей x и y (задачи 2 и 3). В результате происходила эволюция вектора \mathbf{m} , и образец становился намагниченным вдоль приложенного поля. Напряженность \tilde{H}_0 увеличивалась от 0 до 0,5 с шагом $\tilde{h}_0 = 0,01$, при фиксированном значении напряженности магнитного поля выполнялось 3000 шагов по времени.

В доменных стенках вектор \mathbf{m} имеет три отличные от нуля координатные составляющие m_x , m_y , m_z . На рис. 2, 3 представлены проекции этого вектора на плоскость (x, y) .

Рис. 2,а соответствует случаю отсутствия внешнего магнитного поля. На рис. 2,а видно, что между магнитными доменами образуются 180-градусные (внутри одного варианта мартенсита) и 90-градусные (между вариантами) стенки. Вне доменных стенок и в 90-градусных стенках составляющая $m_z = 0$, а в 180-градусных стенках $m_z \neq 0$. Иными словами, 90-градусные стенки — это стенки Нееля, а 180-градусные — стенки Блоха. При приложении внешнего магнитного поля, направленного вдоль оси анизотропии $\mathbf{p}^{(1)}$, сначала происходит движение 180-градусных стенок (см. рис. 2,б), а затем постепенный поворот векторов намагниченности в доменах с осью анизотропии $\mathbf{p}^{(2)}$ (см. рис. 2,в). Энергетически выгодно расположенные по отношению к внешнему полю домены растут за счет движения доменных стенок, до тех пор пока полностью не исчезнут домены, расположенные энергетически невыгодно (под тупым углом) по отношению к полю. Полученные результаты качественно согласуются с результатами, представленными в работе [9].

При приложении внешнего магнитного поля вдоль оси x эволюция магнитной структуры на первом этапе качественно согласуется с решением, полученным при приложении магнитного поля вдоль оси $\mathbf{p}^{(1)}$, при этом в полях большой напряженности вектор намагниченности располагается практически вдоль оси x . Различие задач 1 и 2 состоит в том, что при приложении магнитного поля вдоль оси $\mathbf{p}^{(1)}$ исчезновение 180-градусных стенок происходит в поле с напряженностью $\tilde{H}_0 = 0,08$, а при приложении магнитного поля вдоль оси x — в поле с напряженностью $\tilde{H}_0 = 0,06$.

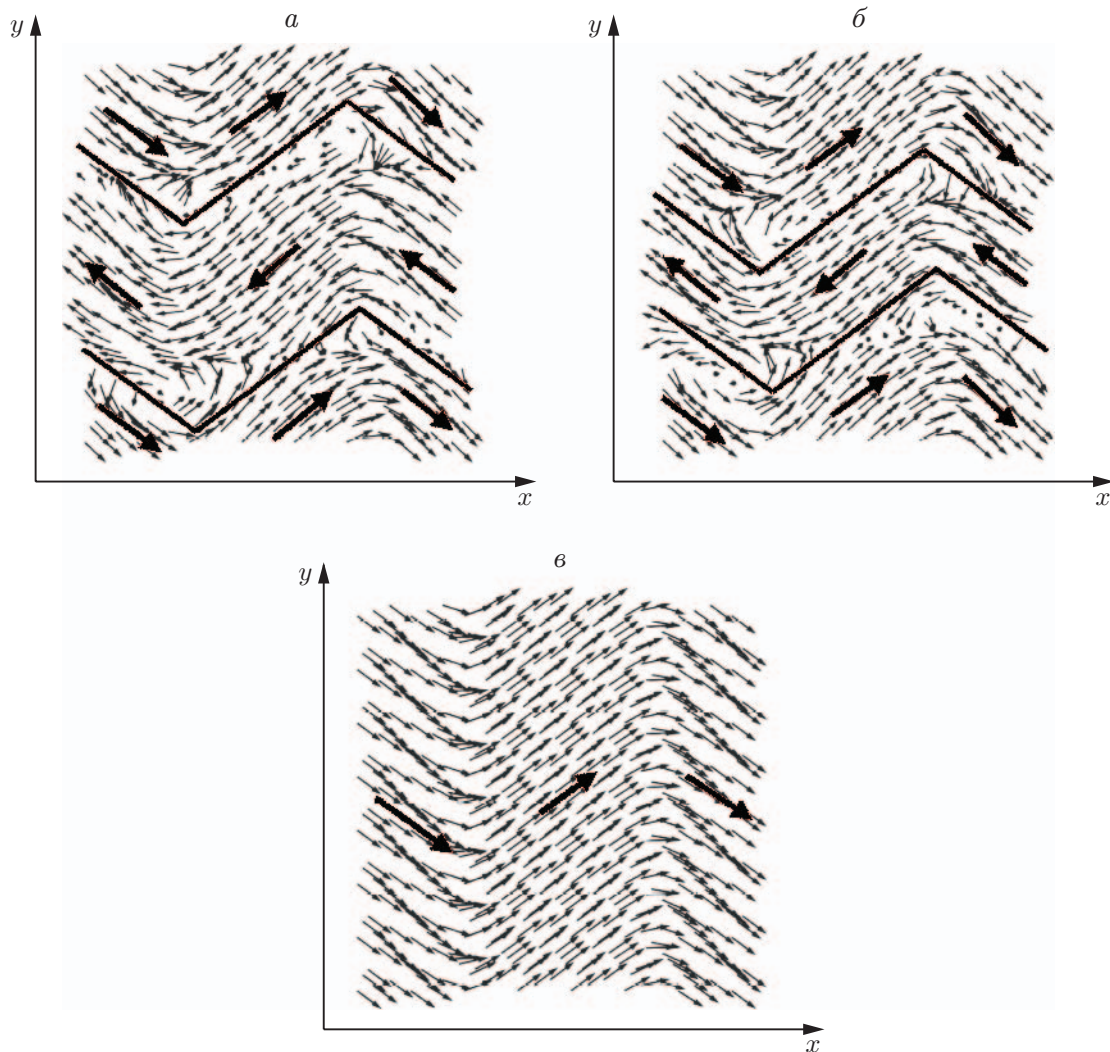


Рис. 2. Проекция вектора намагниченности \mathbf{m} на плоскость (x, y) при наличии внешнего магнитного поля, приложенного вдоль оси $\mathbf{p}^{(1)}$:
 а — $\tilde{H}_0 = 0$, б — $\tilde{H}_0 = 0,07$, в — $\tilde{H}_0 = 0,5$; сплошные линии — 180-градусные стенки, большие стрелки — среднее значение намагниченности в домене

На рис. 3 представлены результаты численного решения задачи 3 (внешнее магнитное поле приложено вдоль оси y). При приложении внешнего магнитного поля сначала происходит движение 180-градусных стенок (см. рис. 3, б, в), а затем постепенный поворот векторов намагниченности к оси y . Аннигиляция всех 180-градусных стенок происходит в поле с напряженностью $\tilde{H}_0 = 0,27$.

В качестве макроскопического параметра задачи рассматривается среднее значение проекции намагниченности на ось, вдоль которой направлено внешнее магнитное поле $\tilde{\mathbf{H}}_0$:

$$\langle m_{\parallel} \rangle = \frac{1}{S} \int_{\Omega^{(in)}} \left(\mathbf{m} \cdot \frac{\tilde{\mathbf{H}}_0}{\tilde{H}_0} \right) d\Omega^{(in)}$$

(S — площадь расчетной области). На рис. 4 представлены зависимости величины $\langle m_{\parallel} \rangle$ от модуля напряженности приложенного магнитного поля \tilde{H}_0 в случаях, когда внешнее поле направлено вдоль оси анизотропии $\mathbf{p}^{(1)}$ (сплошная кривая), вдоль оси x (штриховая

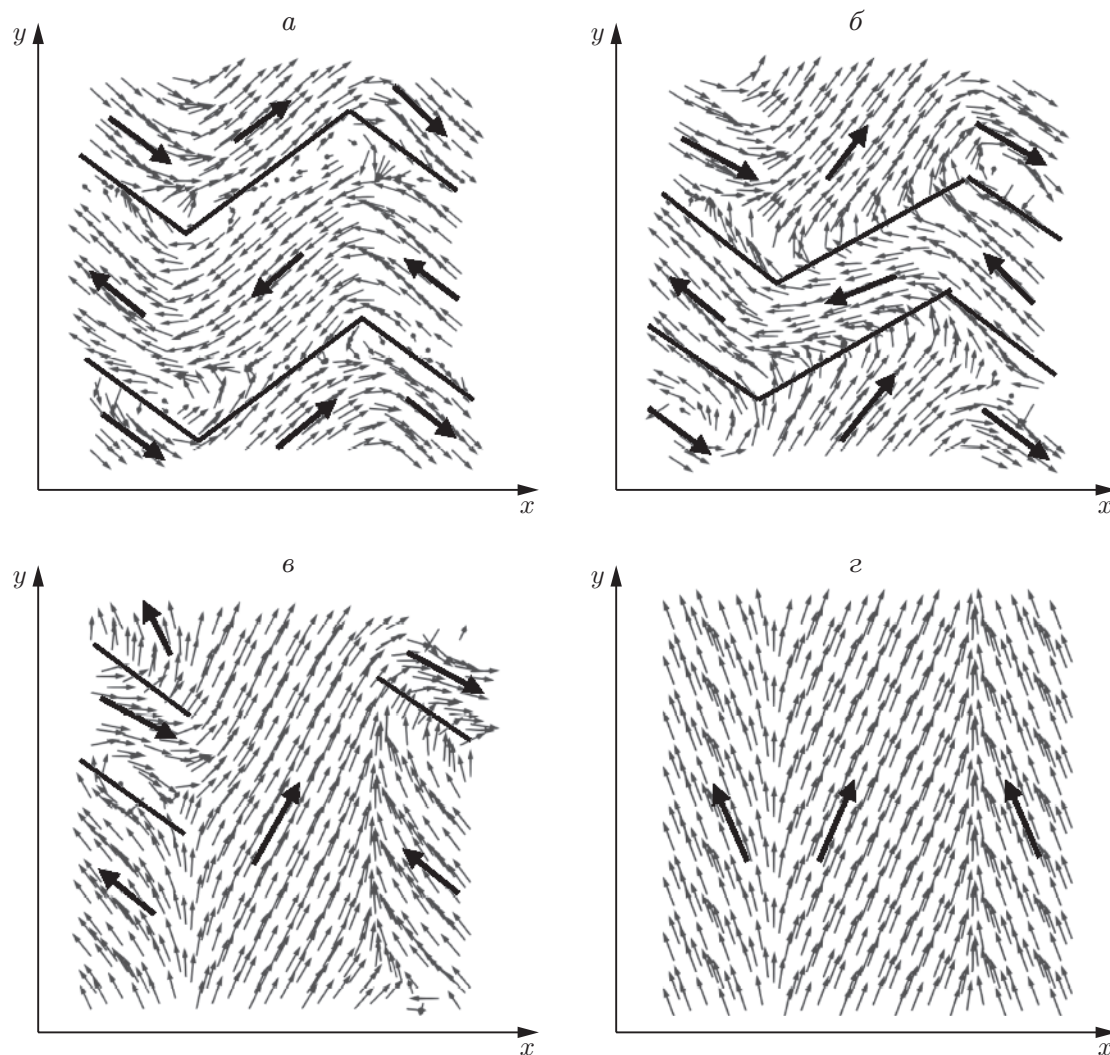


Рис. 3. Проекция вектора намагниченности m на плоскость (x, y) при наличии внешнего магнитного поля, приложенного вдоль оси y :
 a — $\tilde{H}_0 = 0$, $б$ — $\tilde{H}_0 = 0,17$, $в$ — $\tilde{H}_0 = 0,26$, $г$ — $\tilde{H}_0 = 0,5$; сплошные линии — 180-градусные стенки, большие стрелки — среднее значение намагниченности в домене

кривая) и вдоль оси y (штрихпунктирная кривая). На каждой кривой можно выделить два участка: на первом участке происходит рост намагниченности за счет движения 180-градусных стенок магнитных доменов, на втором участке в результате их аннигиляции в некотором критическом поле ($\tilde{H}_0 = 0,08$, $\tilde{H}_0 = 0,06$ и $\tilde{H}_0 = 0,27$ при приложении внешнего магнитного поля вдоль осей $\mathbf{p}^{(1)}$, x и y соответственно) происходит постепенный поворот векторов намагниченности, до тех пор пока они не будут расположены вдоль приложенного внешнего магнитного поля.

Заключение. При фазовом переходе первого рода аустенит (высокотемпературное состояние) — мартенсит (низкотемпературное состояние) в сплаве Гейслера образуются пары сдвоенных, согласованных между собой вариантов структуры (двойники). Приложение внешнего магнитного поля в этом состоянии инициирует движение стенок магнитных доменов, вращение магнитного векторного момента и раздвоение структуры, что сопровождается значительной деформацией (порядка 6–10 %). Все эти процессы происхо-

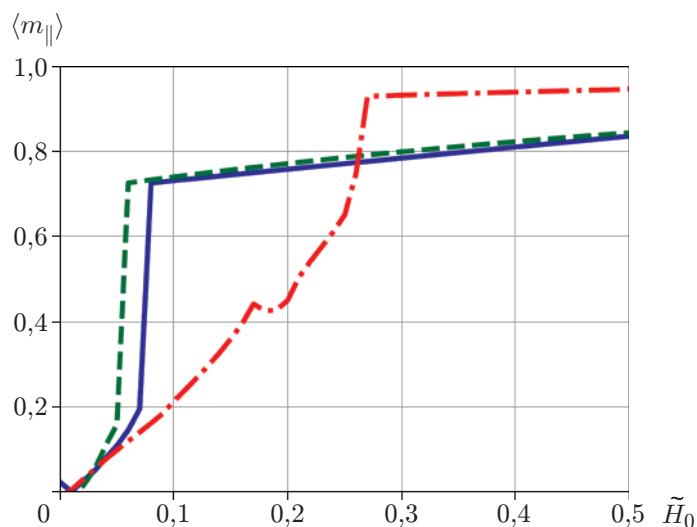


Рис. 4. Зависимости величины $\langle m_{\parallel} \rangle$ от модуля напряженности магнитного поля \tilde{H}_0 в случаях, когда внешнее поле направлено вдоль оси анизотропии $\mathbf{p}^{(1)}$ (сплошная линия), вдоль оси x (штриховая линия) и вдоль оси y (штрихпунктирная линия)

дят на уровне структуры материала, поэтому для их описания используются микромеханические модели. В существующих микроструктурных моделях термомагнитоупругого поведения сплавов с памятью формы вектор намагниченности скачкообразно изменяется на границе магнитных доменов. В этих моделях не учитывается, что доменная стенка имеет определенную толщину и вектор намагниченности непрерывно изменяется по этой толщине. Принимая это во внимание, можно уточнить известные микроструктурные модели механики деформируемых твердых тел и обосновать необходимость такой доработки. Первым шагом в этом направлении является построение в рамках только теории микромагнетизма микроструктурной модели, в которой одним из структурных элементов является доменная стенка определенной толщины. С использованием теории магнетизма построена микроструктурная модель поведения ферромагнитного материала (сплава Гейслера) в магнитном поле. Динамика процесса описывается уравнением Ландау — Лифшица — Гильберта. С помощью процедуры Галеркина дифференциальным соотношениям поставлены в соответствие вариационные уравнения. Рассмотрена структура типа “елочки”, когда мартенситные пластины одного варианта расположены под углом 90° к пластинам другого варианта (сдвойникованный мартенсит), при этом внутри каждого варианта магнитные домены расположены под углом 180° . Границы двойников выполняют роль 90° -градусных магнитных доменных стенок. Методом конечных элементов выполнено моделирование образования этих стенок и найдено распределение вектора намагниченности в них. Исследована эволюция магнитной структуры — движение и взаимодействие 180° -градусных магнитных доменных стенок при приложении внешнего магнитного поля в различных направлениях. Сначала в отсутствие внешнего магнитного поля методом конечных элементов с использованием теории микромагнетизма численно построены 90° - и 180° -градусные магнитные доменные стенки и найдено распределение вектора намагниченности в них. Затем в предположении, что полученная магнитная структура является начальной, исследована ее эволюция — движение и взаимодействие 180° -градусных магнитных доменных стенок при наличии внешнего магнитного поля, приложенного в различных направлениях.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Васильев А. Н., Бучельников В. Д., Такаги Т. и др.** Ферромагнетики с памятью формы // Успехи физ. наук. 2003. Т. 173, № 6. С. 577–607. DOI: 10.3367/UFNr.0173.200306a.0577.
2. **Kazaryan A., Wang Y.** Development of magnetic domains in hard ferromagnetic thin films of polytwinned microstructure // J. Appl. Phys. 2002. V. 92. P. 7408–7414. DOI: 10.1063/1.1522494.
3. **Wan X.-P., Wang K., Weinan E.** Simulations of 3-D domain wall structures in thin films // Discrete Continuous Dynamic Systemts. B. 2006. N 6. P. 373–389. DOI: 10.3934/dcdsb.2006.6.373.
4. **Bustamante R., Dorfmann A., Ogden R. W.** A nonlinear magnetoelastic tube under extension and inflation in an axial magnetic field: numerical solution // J. Engng Math. 2007. V. 59. P. 139–153. DOI: 10.1007/s10665-006-9088-4.
5. **Haldar K., Kiefer B., Lagoudas D. C.** Finite element analysis of the demagnetization effect and stress inhomogeneities in magnetic shape memory alloy samples // Philos. Mag. 2011. V. 91. P. 4126–4157. DOI: 10.1080/14786435.2011.602031.
6. **Rogovoy A. A.** Formalized approach to construction of the state equations for complex media under finite deformations // Continuum Mech. Thermodynamics. 2012. V. 24. P. 81–114. DOI: 10.1007/s00161-011-0220-y.
7. **Rogovoy A., Stolbova O.** Modeling the magnetic field control of phase transition in ferromagnetic shape memory alloys // Intern. J. Plasticity. 2016. V. 85. P. 130–155. DOI: 10.1016/j.ijplas.2016.07.006.
8. **Mennerich C., Wendler F., Jainta M., Nestler B.** A phase-field model for the magnetic shape memory effect // Arch. Mech. 2011. V. 63. P. 549–571.
9. **Jin Y. M.** Domain microstructure evolution in magnetic shape memory alloys: Phase-field model and simulation // Acta Materialia. 2009. V. 57. P. 2488–2495. DOI: 10.1016/j.actamat.2009.02.003.
10. **Li L. J., Lei C. H., Shu Y. C., Li J. Y.** Phase-field simulation of magnetoelastic couplings in ferromagnetic shape memory alloys // Acta Materialia. 2011. V. 59. P. 2648–2655. DOI: 10.1016/j.actamat.2011.01.001.
11. **Rogovoy A. A., Stolbov O. V., Stolbova O. S.** The microstructural model of the ferromagnetic material behavior in an external magnetic field // Magnetochemistry. 2021. V. 7, N 7. P. 1–19. DOI: 10.3390/magnetochemistry7010007.
12. **Шамсутдинов М. А.** Введение в теорию доменных стенок и солитонов в ферромагнетиках: Учеб. пособие / М. А. Шамсутдинов, В. Н. Назаров, А. Т. Харисов. Уфа: Баш. гос. ун-т, 2010.
13. **Браун У. Ф.** Микромагнетизм. М.: Наука, 1979.
14. **Tickle R., James R. D.** Magnetic and magnetomechanical properties of Ni_2MnGa // J. Magnet. Magnet. Materials. 1999. V. 195. P. 627–638. DOI: 10.1016/S0304-8853(99)00292-9.
15. **Zhang J. X., Chen L. Q.** Phase-field microelasticity theory and micromagnetic simulations of domain structures in giant magnetostrictive materials // Acta Materialia. 2005. V. 53. P. 2845–2855. DOI: 10.1016/j.actamat.2005.03.002.

*Поступила в редакцию 10/VI 2021 г.,
после доработки — 10/VI 2021 г.
Принята к публикации 28/VI 2021 г.*