

ӘОЖ 538.221

ӨРТУРЛІ КРИСТАЛДЫҚ ҚҰРЫЛЫМДЫ Fe-Ga ҚОРЫТПАЛАРЫНЫҢ МАГНИТТІК АНИЗОТРОПИЯ ЭНЕРГИЯСЫН ЖӘНЕ СЕРПІМДІЛІК ҚАСИЕТТЕРІН ЕСЕПТЕУ

Негметжанова Диана Эрсайиновна

diana.0308@mail.ru

Л.Н. Гумилев атындағы 4-курс студенті, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
Ғылыми жетекшісі – Абуова А.У.

Кіріспе

Үлкен магнитострикциясы бар материалдар магнит өрісінің датчиктері және магнитті механикалық жетектер ретінде, сондай-ақ энергия жинау үшін кеңінен қолданылады [**Ошибка! Источник ссылки не найден.**]. Магнит өрісінің үлкен (және көбінесе сызықты) реакциясы маңызды [**Ошибка! Источник ссылки не найден.**]. Сирек кездесетін жер элементтеріне (СЖЭ) негізделген терфенол-Д қорытпасы - магнит өрісінен туындаған үлкен деформацияларды көрсететін ең сәтті магнитострикциялық материалдардың бірі [**Ошибка! Источник ссылки не найден.**].

$Fe_{1-x}Ga_x$ бинарлы қорытпалары (галфенол) үлкен тетрагональды магнитострикция коэффициенті, төмен қанықтыру магнит өрісі, тамаша икемділік және төмен шығындар сияқты көптеген артықшылықтарды біріктіреді [**Ошибка! Источник ссылки не найден.**]. Fe-Ga қорытпасының $\langle 100 \rangle \lambda_{100}$ бағдарындағы магнитострикция тұрақтысы $TbFe_2$ және терфенол-Д-ге қарағанда аз [**Ошибка! Источник ссылки не найден.**, **Ошибка! Источник ссылки не найден.**]. Сондықтан Fe-Ga қорытпасының магнитострикциялық қасиеттерін бақылау қызығушылық тудырады.

Бұл жұмыста кең концентрация диапазонында эксперименталды түрде байқалатын A2, B2, D0₃, L1₂ және D019 фазаларының құрылымдық және серпімді қасиеттері зерттеліп, ең тиімді құрылымдар анықталды. $Fe_{100-x}Ga_x$ қорытпаларының фазалық диаграммасы энергия функциясы ретінде жасалынған және фазалық ауысулар тізбегі алынған.

Зерттеу нысаны - үлкен тетрагональды магнитострикция коэффициенті, төмен қанықтыру магнит өрісі, керемет икемділік және төмен шығындар сияқты көптеген артықшылықтарды біріктіретін $Fe_{1-x}Ga_x$ екілік қорытпалары (галфенол). Темірдің көлемдікцентрленген торындағы Ga атомдарының ретсіз қатты ерітіндісі болып табылатын A2 ($0,15 \leq x \leq 0,23$) типті термиялық тепе-теңдік құрылымдарына сәйкес келетін кристалды торлары бар легирленген қорытпалардың қасиеттері зерттелді.

Жұмыстың мақсаты нақты уақыт режимінде темір жол аспасы компоненттерінің мониторингін, энергия жинауды, атқарушы механизмдер мен датчиктерді қоса алғанда,

эртүрлі практикалық қолдануға арналған жаңа магнитострикциялық материалдарды эзірлеу болып табылады. Магнитострикциялық материалдар екі талапты да қанағаттандыра алады.

Fe-Ga магнитострикциялық қорытпалары қазіргі уақытта төмен қаныққан магнит өрістерінде, жақсы икемділікте, жоғары Кюри температурасында және салыстырмалы түрде төмен бағамен сызықтық магнитострикцияның үлкен мәндеріне байланысты жоғары кристалды сирек жер магниттеріне сәтті альтернативті материалдар болып табылады [Ошибка! Источник ссылки не найден.]. Бұл қорытпалардың қасиеттері өндіріс процедурасына өте сезімтал фазалық құрамға айтарлықтай байланысты.

Зерттеу әдісі

Fe-Ga қорытпасы жүйелерінің құрылымдық және магниттік қасиеттерінің негізгі есептеулері VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package) [6] көмегімен супер ұяшық тәсілін қолдана отырып жүргізілді. Алмасу-корреляциялық потенциал Пердью-Берк-Эрзенхоф (PBE) түрінде жалпыланған градиент (GGA) жуықтау арқылы қарастырылды [7]. k нүктелерінің торы $4 \times 4 \times 4$ нүктелі тормен Монхорст-Пак [8] схемасы бойынша салынған. Электронды-иондық әрекеттесулерді сипаттау үшін Fe, Ga, Nd, Ni валенттік электрондары үшін PAW [6,7] псевдопотенциалдары қолданылды. Жазық толқынның кесу энергиясының мәні 500 эВ құрайды. Nd 4f-электрондары енгізген күшті корреляция эффектілері PBE-де Дурадев және т.б. тұжырымдайтын U Хаббард түзетуімен өңделді [9]. Барлық есептеулер нөлдік температурада жүргізілді ($T = 0$ K).

Кесте 1 – Fe, Ga, Nd, Ni валенттік электрондары үшін келтірілген шеттік энергия мен келтірілген электрондар саны бар қолданылатын псевдопотенциалдар.

Псевдопотенциалдар	Шеттік энергия, эВ	Валенттік электрондар саны	Валенттік электрондар
Fe	267.883	8	$3s^2 3p^6 3d^7 4s^1$
Ga	134.678	3	$3d^{10} 4s^2 4p^1$
Nd	253.189	14	$5s^2 5p^6 5d^1 4f^3$
Ni	269.533	10	$3d^8 4s^2$

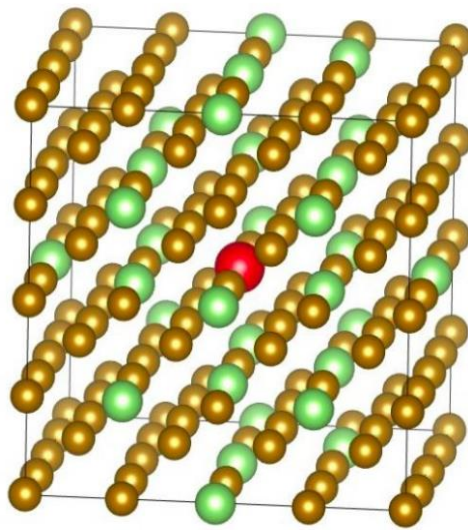
$Fe_{1-x}Ga_xM$ қорытпаларын модельдеу үшін $4 \times 4 \times 4$ (128 атом / ұяшық) кубтық супер ұяшық қолданылды. Модельдік ұяшықты таңдау кезінде біз жұмыс нәтижелерін басшылыққа алдық [10]. Эмпирикалық емес молекулалық динамиканы модельдеу арқылы Fe-Ga қорытпасында көрші түйіндерде галлий атомдарын табу ықтималдығы шамалы, ал олардың тор түйіндерінде орналасуы $D0_3$ құрылымының мотивтерін $B2$ реттелуімен қайталайды. Модельдің элементар ұяшығы 1 - суретте көрсетілген. Бастапқы $Fe_{1-x}Ga_x$ қорытпасын легирлеу үшін бір темір атомы таңдалды, оның ең жақын көршілері де темір атомдары болып табылады. Бұл атом тізбекті түрде Ni және Nd-мен ауыстырылды. Сондай-ақ, біз галлий концентрациясының қарапайым өзгеруімен салыстырғанда үшінші элементтің магнитострикциялық қасиеттерге әсерін бағалау үшін Ga-ны легирлеуші қоспа ретінде қарастырдық. $D0_3$ және $L1_2$ құрылымының Fe_3Ga қосылыстарының примитивті ұяшықтары 2 - суретте көрсетілген.

Тетрагональды магнитострикция коэффициентін анықтау үшін модельдік супер ұяшықтар z осі бойымен тұрақты көлем режимімен оңтайландырылған геометриядан деформацияланды ($\epsilon_x = \epsilon_y = -1/2\epsilon_z$).

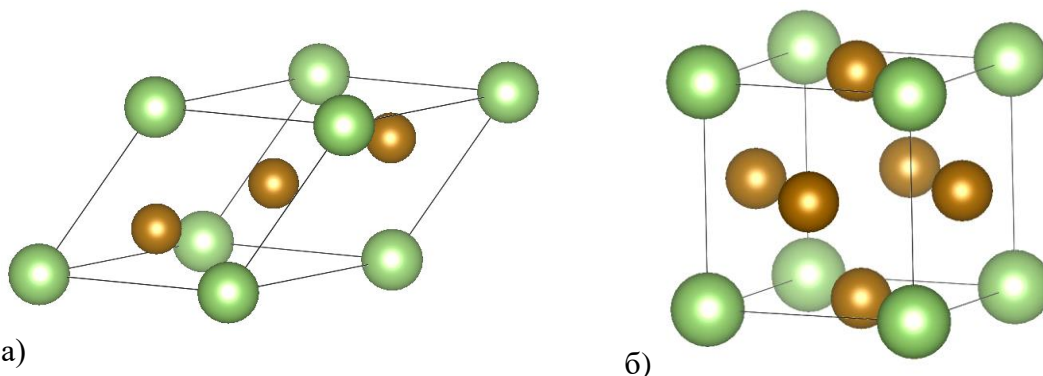
λ_{100} ϵ_z -ке тәуелді жалпы E_{tot} энергиясы мен E_{MCA} магнитокристалды анизотропия энергиясы негізінде мынау формула бойынша есептелді:

$$\lambda_{001} = \frac{2dE_{MCA}/d\epsilon_z}{3d^2E_{tot}/d\epsilon_z^2} = -\frac{b_1}{3c'} \quad (1)$$

мұндағы $b_1 = -\frac{2}{3V_0} \frac{dE_{MCA}}{d\varepsilon_z}$ - магнит-серпімді байланыстың константасы және $c' = \frac{c_{11}-c_{12}}{2} = \frac{1}{3V_0} \frac{d^2E_{tot}}{d\varepsilon_z^2}$ - тетрагональды ығысудың серпімді модулі.



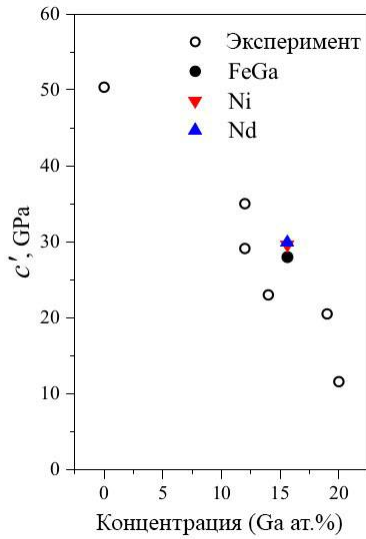
1 сурет – $Fe_{1-x}Ga_xM$ қорытпаны балқыту үшін қолданылатын $4 \times 4 \times 4$ супер ұяшық. Сары, жасыл және қызыл шарлар сәйкесінше Fe, Ga және M атомдары болып табылады



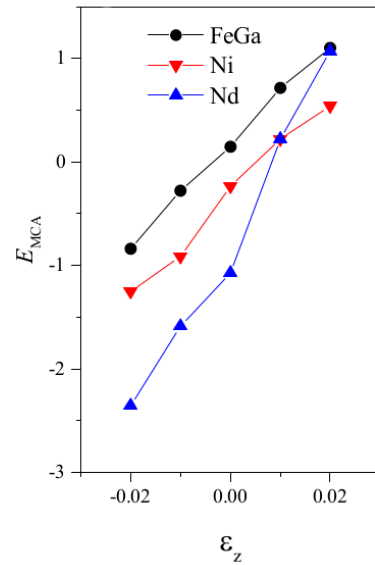
2 сурет – Fe_3Ga құрылымының а) $D0_3$ және б) $L1_2$ қорытпаларының примитивті ұяшықтары. Сары және жасыл - сәйкесінше Fe және Ga атомдары

Алынған нәтижелер

Біріншіден, біз есептеулердің дәлдігін бағаладық. Ол үшін барлық қарастырылған құрылымдар үшін c' , E_{MAE} және λ_{001} мәндері бағаланды. Алынған нәтижелер 3 және 4 - суретте көрсетілген. Fe-Ga қорытпасы үшін теория мен эксперимент арасында серпімділік модулі бойынша да, магнитострикция коэффициенті бойынша да жақсы келісім алынды [11]. d- және f- элементтерімен допингтің әсерін бағалау үшін алдын-ала есептеулер жүргізілді. Ni және Nd қосындылары үшін қоспалардың әсері серпімді модульдердің минималды өзгеруіне әкеледі. ε_z - ке байланысты E_{MAE} көлбеуі легірлеуші элементке байланысты. Нәтижесінде, Ni-мен легирленген қорытпа үшін $dE_{MAE}/d\varepsilon_z$ төмендейтіндіктен, бұл λ_{001} мәнін төмендетеді, бұл эксперименттік нәтижелерге сапалы сәйкес келеді. Nd атомдарымен легірлеу жағдайында $dE_{MAE}/d\varepsilon_z$ мәні артады, бұл λ_{001} жоғарылауына әкеледі.

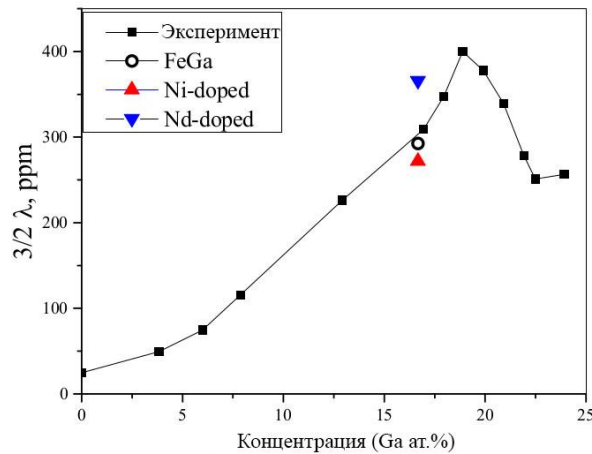


а)

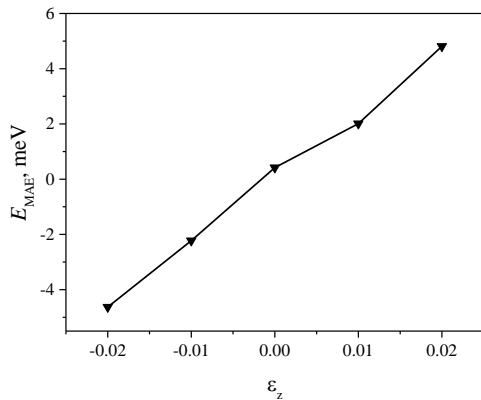


б)

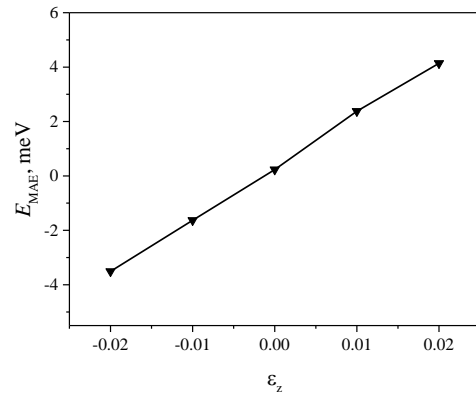
3 сурет – а) Fe-Ga қорытпасы үшін эксперименттік деректермен салыстырғанда Ni және неодимий қоспаланған таза c' серпімділік модулінің есептік мәндері [11] б) Магнитокристалды анизотропияның деформацияға тәуелді энергиясы



4 сурет – $Fe_{1-x}Ga_x$ қорытпасы үшін тәжірибелік деректермен салыстырғанда қарастырылып отырған қосылыстар үшін $3/2\lambda_{001}$ есептік мәні [Ошибка! Источник ссылки не найден.]



а)

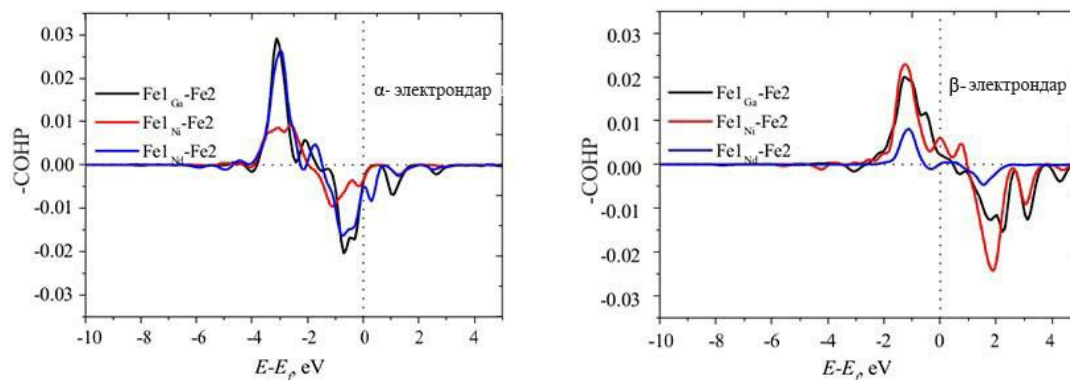


б)

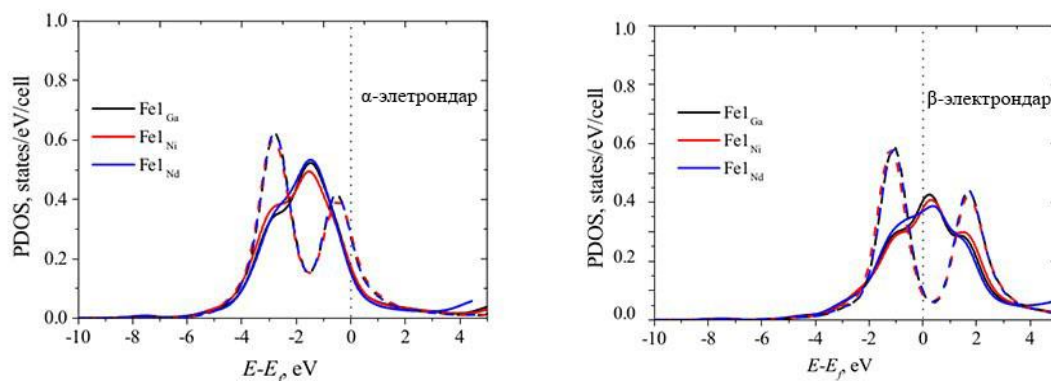
5 сурет – а) L21 және б) D03 құрылымдарының таза және допирленген Fe-Ga қорытпасы үшін деформацияға тәуелді магнитокристалды анизотропия энергиясы

L_{12} және $D0_3$ құрылымының қорытпалары үшін E_{MAE} мәндерінің тәуелділігі 5 - суретте көрсетілген. c' серпімділігінің тетраэдрлік модулінің мәні сәйкесінше 26.68 және 27.17 ГПа құрайды. Магниттік анизотропия мен серпімді модуль энергиясының келбеу шамаларының жақындығы λ_{001} коэффициентінің жақын мәндеріне әкеледі. $D0_3$ және $L1_2$ торларындағы Fe және Ga атомдары әр түрлі жергілікті ортаға ие болған кезде атомдық қаптаманың айырмашылығы допинг эффектісі осы құрылымдарға әртүрлі әсер етуі мүмкін.

а)



б)



6 сурет – Ga, Ni және Nd қосылған қосылыстар үшін Fe_1 және Fe_2 -де d_{xz} және d_{yz} спині жоғары (а) және спині төмен (б) күйлері үшін СОНР шамалары

Сондай-ақ, біз d -күйлерді будандастырудың Fe_1 және f -күйлерінің Nd қоспасына тигізетін әсерін зерттедік. Нәтижелер 6 - суретте көрсетілген. Бұл жағдайда - СОНР есептеулерінің нәтижелері барлық мүмкін электронды күй жұптары үшін беріледі. Көптеген орбитальдар будандастырылмағаны байқалады. СОНР жеткілікті үлкен болатын күйлерде f -электрондардың Ферми деңгейінен төмен күйлерінің өте төмен тығыздығына байланысты үзілген байланыстардың пайда болуына айтарлықтай үлес қоспайды. Осылайша, магнитострикциялық әсердің күшеюіне негізгі үлес Nd атомының бірінші және екінші үйлестіру салаларындағы темір атомдарының бета электрондары арасындағы байланыстың босату сипатын арттырады.

Қорытынды

Бұл жұмыста біз Ni және Nd магнитострикциялық қасиеттері тығыздығының функционалды теориясын қолдана отырып, $A2$ құрылымының модификацияланған Fe-Ga қорытпасын компьютерлік модельдеуді жүргіздік. Ni (Nd) легірілеуші қоспаларды қосу кезінде λ_{001} коэффициентінің эксперименталды түрде төмендеуі (жоғарылауы) арасындағы химиялық байланыстың босаңсыту сипатының жоғарылауымен (төмендеуімен) байланысты екендігі көрсетілген. Магнитострикциялық әсерді күшейту үшін галлий қолданылған жағдаймен

салыстырғанда легирлеуші атомның бірінші және екінші үйлестіру салаларындағы темір атомдары. Темір атомдарының d -күйлері будандастыруға негізгі үлес қосады. Nd атомдарымен допинг жағдайында $f-d$ будандастыру әсері f -электрондардың Ферми деңгейінен төмен күйлерінің тығыздығының төмен болуына байланысты аз болады. Сондай-ақ, магниттік анизотропия энергиясы және $L1_2$ және $D0_3$ құрылымының Fe_3Ga қорытпасы торларының серпімді қасиеттері зерттелді.

Қолданылған әдебиеттер тізімі

1. Clark A.E. Hathaway K.B., ed. Engdahl G. Tetragonal magnetostriction and magnetoelastic coupling in Fe-Al, Fe-Ga alloys // Academic. 2000. V.1. P. 1-48.
2. Du Trémolet de Lacheisserie E., Gignoux D., Schlenker M. Soft Materials for Electrical Engineering and Low Frequency Electronics // Magnetism: Materials and Applications. 2005. P. 213-234.
3. Jerems F., Mahon C.M., Jenner A. G., Greenough R.D. The magnetic and magnetoelastic properties of Ce substituted melt-spun // Ferroelectrics. 1999. V. 228. P. 333–341.
4. Atulasimha J., Flatau A. B. Experimental actuation and sensing behavior of single-crystal iron-gallium alloys // Smart Materials and Structures. 2011. P. 20.
5. Clark A. E. Magnetostrictive Rare Earth-Fe₂ Compounds // Ferromagnetic Materials. 1980. V.1. P. 531-589.
6. Kresse G. and Furthmüller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane wave basis set // Phys. Rev. B. 1996. V. 54. P. 11169-11186.
7. J. P. Perdew, Burke K. and Ernzerhof Phys M. Generalized Gradient Approximation Made Simple // Rev. Lett. 1997. V. 78. P. 1396-1396.
8. Dronskowski R. and Bloechl P. E. Crystal orbital Hamilton populations (COHP): energy-resolved visualization of chemical bonding in solids based on density-functional calculations // The Journal of Physical Chemistry. 1993. V. 97. P. 8617-8624.
9. Dudarev S.L., Botton G.A., Savrasov S.Y., Humphreys C. J., Sutton A.P. Electron-energy-loss spectra and the structural stability of nickel oxide: An LSDA+U study // Phys. Rev. B. 1998. V. 57. P. 1505-1509.
10. Wang H., Zhang Y.N., Wu R.Q., Sun L.Z, Xu D.S., Zhang Z.D. Understanding strong magnetostriction in Fe_{100-x}Ga_x alloys // Scientific Reports. 2013. V. 3. P. 3521.
11. Wuttig M., Dai L. and Cullen J. Elasticity and magnetoelasticity of Fe-Ga solid solutions // Applied Physics Letters. 2002. V. 80. P. 1135-1137.