

# 纳米晶永磁 $\text{Pr}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ 微磁学有限元法的 模拟计算研究\*

张宏伟 荣传兵 张 健 张绍英 沈保根

(中国科学院物理研究所与凝聚态物理中心磁学国家重点实验室, 北京 100080)

(2002 年 6 月 20 日收到, 2002 年 7 月 19 日收到修改稿)

根据实验数据, 构造了接近实际纳米晶永磁  $\text{Pr}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$  的样品, 用微磁学有限元法进行了模拟计算. 计算结果表明, 晶界处各向异性的下降会导致矫顽力减小、剩磁值增大, 而晶界处交换作用常数的减小则会使剩磁值减小、矫顽力增大. 通过对实验样品的模拟研究发现, 晶界处各向异性和交换作用常数的共同减小能够同时拟合出真实的矫顽力和剩磁值. 模拟计算与实验在退磁曲线形状上的差距则说明模拟还存在不足.

关键词: 纳米晶永磁, 磁滞回线, 矫顽力, 剩磁

PACC: 7560E, 7550V

## 1. 引 言

自从理论上预言纳米复合永磁材料最大磁能积可高达  $1\text{MJ}/\text{m}^3$  以来<sup>[1]</sup>, 纳米晶永磁研究成为近年来磁学研究的重点之一<sup>[2-6]</sup>. 但实验上各向同性磁体的最大磁能积尚未能超过  $0.2\text{MJ}/\text{m}^3$ <sup>[2]</sup>. 理论预言与实验差距巨大的主要原因体现在 (1) 实验上不能够同时保证较高的矫顽力和剩磁; (2) 理论预言最大磁能积  $1\text{MJ}/\text{m}^3$  的模型过于简单. 因此, 人们对微磁学有限元法的模拟计算研究寄以希望.

永磁材料的硬磁性能既取决于材料的内禀特性, 又决定于材料的微结构. 关于三维磁体磁滞回线的计算研究, 已由过去的基于无相互作用的单畴颗粒集合体的 Stoner-Wohlfarth 模型发展到目前的微磁学有限元法. 微磁学有限元法已在磁体设计方面取得了很大成功. 近几年, 这一方法又应用于纳米晶永磁的磁滞回线计算研究, 并且取得了一定的进展<sup>[7-11]</sup>. 如果微磁学有限元法能够模拟实际样品的磁滞回线, 那么这一算法对提高磁体性能的指导价值显而易见. 然而, 迄今为止尚未看到用这一算法模拟实验上磁滞回线的研究报道. 因此, 本文将报道采用微磁学有限元法模拟真实退磁曲线的尝试.

## 2. 实验与计算方法

实验上的纳米晶永磁  $\text{Pr}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$  是采用熔体快淬  $\text{Pr}_{12}\text{Fe}_{82}\text{B}_6$  合金制备的. x 射线衍射 (XRD) 测试结果显示 (见图 1), 这种合金快淬条带样品是各向同性的. 高分辨率透射电子显微镜测试结果显示, 快淬样品的晶粒约为  $20\text{nm}$ , 晶粒边界处的缺陷层厚度约为  $3\text{nm}$ <sup>[12]</sup>. 磁性测量是用 SQUID 在室温下进行的.

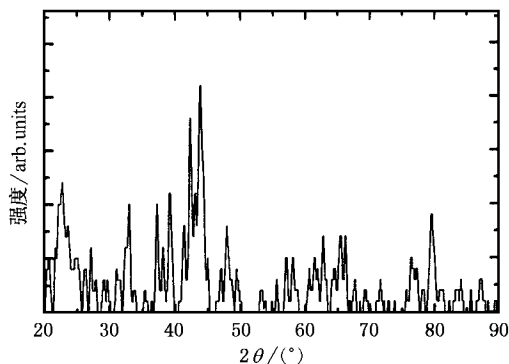


图 1 快淬  $\text{Pr}_{12}\text{Fe}_{82}\text{B}_6$  的 XRD 谱图

模拟计算的样品是由 64 个多面体晶粒构成的立方体 (见图 2), 在其相邻晶粒间构造了  $3\text{nm}$  晶间层<sup>[8]</sup>. 采用了两种晶粒大小分布 (见图 3), 即较宽分

\* 国家重点基础研究项目 (批准号: G1998061303) 和国家自然科学基金 (批准号: 59971063) 资助的课题.

布(W型)和较窄分布(N型). 计算退磁曲线的有限元法(以下简称 FEM)参见文献[7,8]. 我们使用了 40000 个有限元对样品进行了剖分; 模拟所采用的磁饱和和极化强度  $J_s$  为 1.6T、各向异性常数  $K$  为  $5.567\text{MJ/m}^3$ 、交换积分常数  $A$  为  $7.7 \times 10^{-12}\text{J/m}$ .

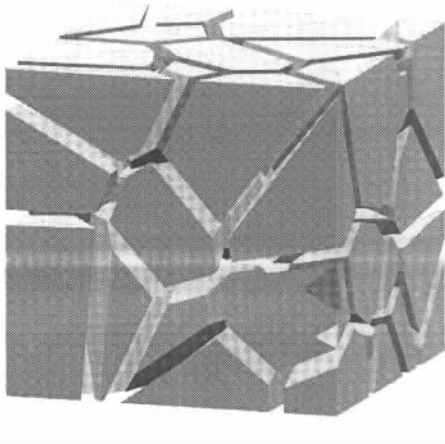


图2 64个多面体晶粒构成的模拟样品

曲线与实验相差较大,但 FEM 得到的结果要优于 Stoner-Wohlfarth 模型的结果. 这说明晶间交换耦合作用在纳米晶体系中起到了非常重要的作用. 晶粒尺寸的较宽分布使矫顽力附近的反磁化分步进行, 这可能是源于大尺寸晶粒与小尺寸晶粒之间的磁化反转场的不同.

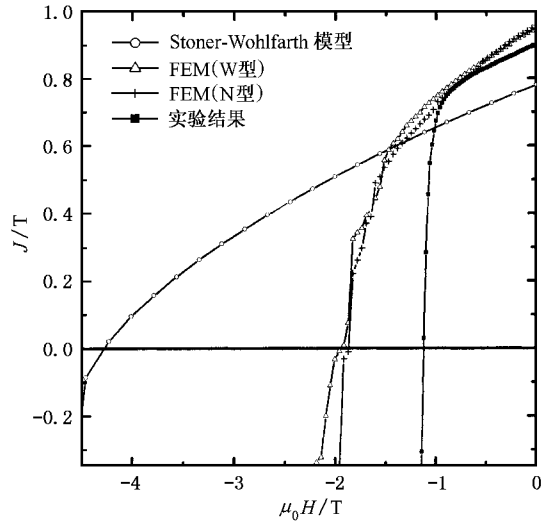


图4 退磁曲线的比较

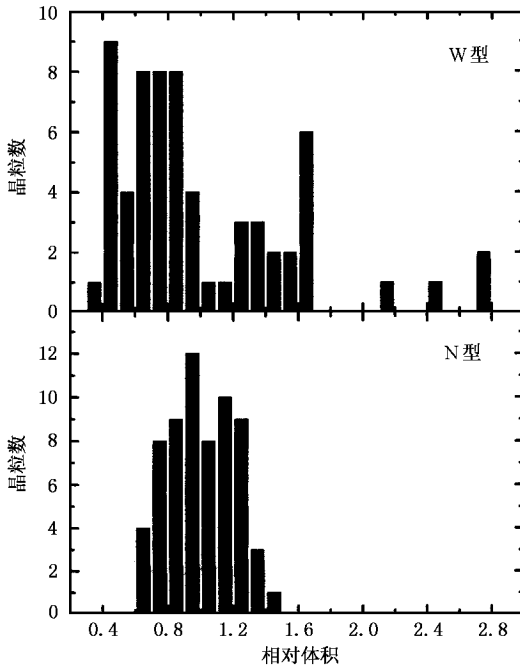


图3 晶粒大小分布图

### 3. 结果与讨论

图4 比较了实验样品的退磁曲线与由 Stoner-Wohlfarth 模型和 FEM 计算得到的退磁曲线,其中 FEM 计算的曲线为理想晶界条件. 尽管计算的退磁

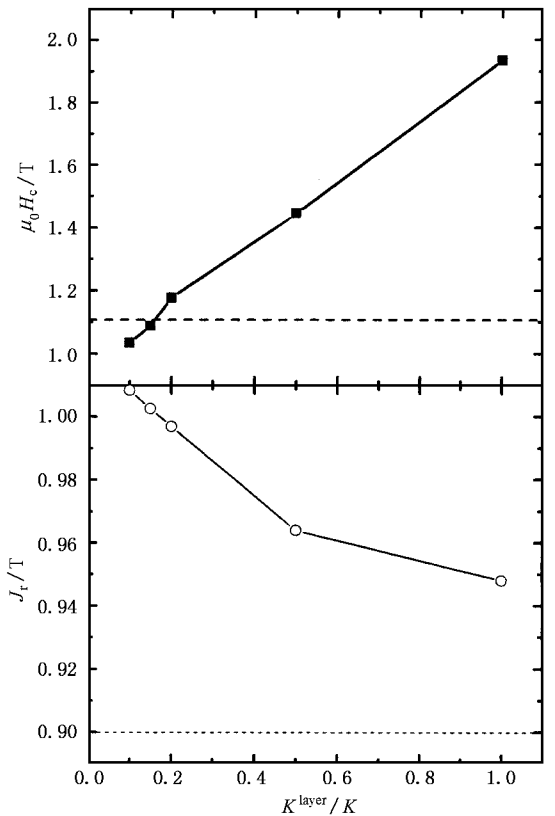


图5 晶界处参数  $K^{\text{layer}}$  对剩磁和矫顽力的影响 虚线为实验结果

对于理想晶界条件, FEM 计算的矫顽力和剩磁值均大于实验结果. 鉴于实际样品中晶粒边界处存在缺陷的事实, 我们对晶界处的参数  $K$  和  $A$  做了调整. 图 5 给出晶界处参数  $K^{layer}$  对剩磁和矫顽力的影响. 由图 5 可以看出, 晶界处  $K^{layer}$  的下降使矫顽力减小, 并在  $K^{layer} \approx 0.15K$  时计算值与实验值相等. 但是, 计算的剩磁值随  $K^{layer}$  的下降而增大, 这使得剩磁的计算值与实验值差距加大.

图 6 给出晶界处参数  $A^{layer}$  对剩磁和矫顽力的影响. 可以看出, 随着  $A^{layer}$  的下降, 剩磁值减小, 而矫顽力增大. 这一趋势与文献 [8, 10] 的结果相近. 但在数值变化速率上均小于文献 [10] 的值. 我们认为, 这主要是在样品构造和有限元形状方面的不同所致. 与文献 [8] 的计算结果相比, 在剩磁值与  $A^{layer}/A$  近似呈线性关系上是一致的, 但我们计算的矫顽力却与  $A^{layer}/A$  不呈线性关系. 我们认为矫顽力呈线性依赖于  $A^{layer}/A$  [8] 不合理 (详见文献 [4, 13]). 与实验值相比较, 剩磁值在  $A^{layer} \approx 0.15A$  时与实验值相近, 但矫顽力却随着  $A^{layer}$  的下降与实验值相差变大.

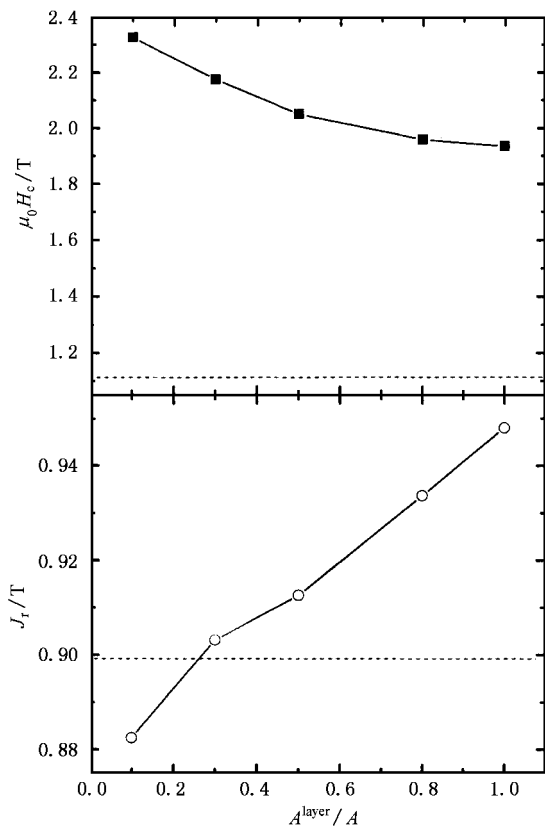


图 6 晶界处参数  $A^{layer}$  对剩磁和矫顽力的影响 虚线为实验结果

由图 5 和图 6 的结果得出, 单独调整  $K^{layer}$  或  $A^{layer}$  值是很难同时拟合出实验上的矫顽力和剩磁值. 我们进一步同时调整了  $K^{layer}$  和  $A^{layer}$  值, 图 7 和图 8 分别给出 W 型和 N 型晶粒大小分布样品的典型计算结果. 对于适当的  $K^{layer}$  和  $A^{layer}$  值, 可以拟合出接近实验上的矫顽力和剩磁值, 但是在退磁曲线的形状上有较大差距. 这说明我们在模拟实验曲线上还存在关键问题尚未找到. 进一步的研究仍在进行中.

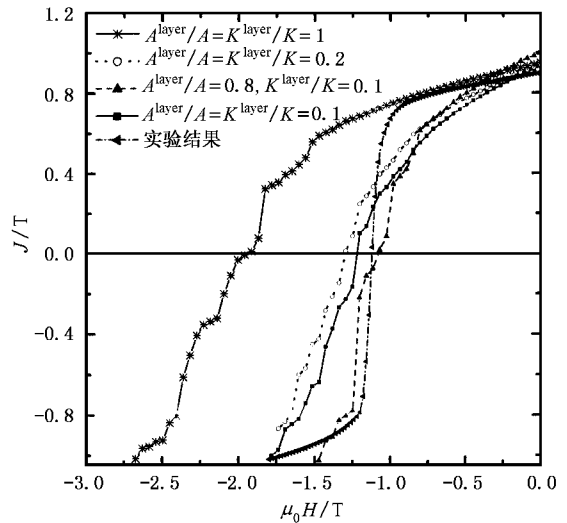


图 7 W 型分布的退磁曲线模拟

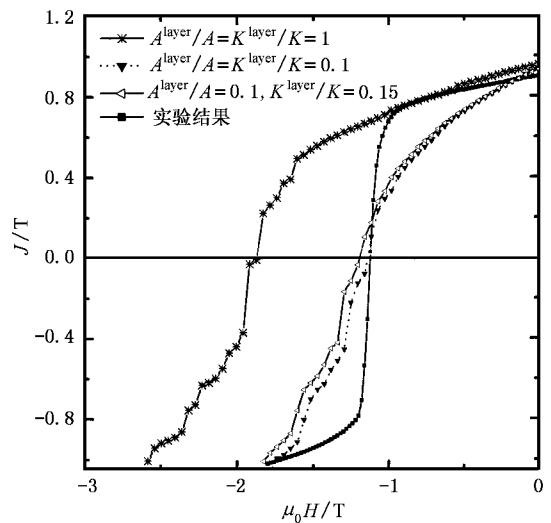


图 8 N 型分布的退磁曲线模拟

- [ 1 ] Skomski R and Coey J M D 1993 *Phys. Rev. B* **48** 15812
- [ 2 ] Goll D , Seeger M and Kronmüller H 1998 *J. Magn. Magn. Mater.* **185** 49
- [ 3 ] Hadjipanayis G C 1999 *J. Magn. Magn. Mater.* **200** 373
- [ 4 ] Zhang H W , Sun Z G , Zhang S Y , Shen B G , Tung I C and Chin T S 1999 *Phys. Rev. B* **60** 64
- [ 5 ] Zhang H W , Li B H , Wang J , Zhang J , Zhang S Y and Shen B G 2000 *J. Phys. D : Appl. Phys.* **33** 3022
- [ 6 ] Zhang X Y , Guan Y , Yang L and Zhang J W 2001 *Appl. Phys. Lett.* **79** 2426
- [ 7 ] Fischer R , Leineweber T and Kronmüller H 1998 *Phys. Rev. B* **57** 10723
- [ 8 ] Fischer R and Kronmüller H 1998 *J. Magn. Magn. Mater.* **184** 166
- [ 9 ] Zhao S F , Jin H M , Wang X F and Yan Y 2001 *J. Phys. : Condens. Matter* **13** 3865
- [ 10 ] Wang X F , Jin H M , Zhao S F and Yan Y 2001 *Chin. Phys.* **10** 555
- [ 11 ] Zhao S F , Jin H M , Wang X F and Yan Y 2001 *Chin. Phys.* **10** 1157
- [ 12 ] Zern A 1999 *PhD Thesis* Stuttgart :Max-Planck-Institute
- [ 13 ] Kronmüller H , Durst K D and Sagawa M 1988 *J. Magn. Magn. Mater.* **74** 291

## Simulation of magnetization behaviour in nanocrystalline $\text{Pr}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$ by micromagnetic finite element method<sup>\*</sup>

Zhang Hong-Wei Rong Chuan-Bing Zhang Jian Zhang Shao-Ying Shen Bao-Gen

( State Key Laboratory of Magnetism , Institute of Physics and Center for Condensed Matter Physics , Chinese Academy of Sciences , Beijing 100080 ,China )

( Received 20 June 2002 ; revised manuscript received 19 July 2002 )

### Abstract

Magnetization behaviour in the nanocrystalline  $\text{Pr}_2\text{Fe}_{14}\text{B}$  has been simulated by micromagnetic finite element method. The decrease of anisotropy in an interlayer leads to the drop of coercivity and enhancement of remanence , while the decline of intergrain exchange coupling increases the coercivity and decreases the remanence. The experimental coercivity and remanence may be simultaneously obtained by selecting proper parameters for the interlayer. Unfortunately , it is difficult to simulate the demagnetization curve of the ribbons before many efforts mustbe paid in future.

**Keywords** : nanocrystalline permanent magnet , magnetic hysteresis , coercivity , remanence

**PACC** : 7560E , 7550V

<sup>\*</sup> Project supported by the State Key Program of Basic Research of China ( Grant No. G1998061303 ) , and the National Natural Science Foundation of China ( Grant No. 59971063 ) .