

缺陷对铁单质薄膜磁致伸缩与磁矩演化的影响

张硕 龙连春 刘静毅 杨洋

Effect of defects on magnetostriction and magnetic moment evolution of iron thin films

Zhang Shuo Long Lian-Chun Liu Jing-Yi Yang Yang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 017502 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20211177

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211177>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

## 缺陷对铁单质薄膜磁致伸缩与磁矩演化的影响\*

张硕<sup>1)</sup> 龙连春<sup>1)†</sup> 刘静毅<sup>1)</sup> 杨洋<sup>2)‡</sup>

1) (北京工业大学材料与制造学部, 北京 100124)

2) (中国科学院物理研究所, 北京 100190)

(2021年6月22日收到; 2021年9月8日收到修改稿)

磁致伸缩材料在传感、控制及能量与信息转换等领域应用前景广阔, 此类材料的性能提升及工程应用已成为研究热点, 但材料在制备与使用中不可避免会出现缺陷. 本文以常用的铁磁性材料铁单质为研究对象, 采用分子动力学方法分别建立无缺陷、孔洞缺陷与裂纹缺陷的铁单质磁致伸缩结构模型, 分析了缺陷形式对铁单质薄膜磁致伸缩行为的影响, 并从微观原子磁矩角度解释缺陷对磁致伸缩行为的影响机理. 结果表明: 缺陷会对其周围的原子磁矩产生影响, 从而影响铁单质薄膜磁致伸缩, 其中孔洞形缺陷对磁致伸缩的影响较小, 裂纹形缺陷对磁致伸缩的影响较大. 裂纹的方向会影响铁单质薄膜的磁致伸缩, 与磁化方向平行的裂纹会降低材料在磁化方向上由初始状态至磁化达到饱和的最大磁致伸缩量; 与磁化方向垂直的裂纹会提高材料在磁化方向上由初始状态至磁化达到饱和的最大磁致伸缩量.

**关键词:** 铁单质, 磁致伸缩, 缺陷, 分子动力学, 薄膜

**PACS:** 75.80.+q, 02.70.Ns, 13.40.Em

**DOI:** 10.7498/aps.71.20211177

## 1 引言

性能优良且成本低廉的铁磁性材料广泛应用于各类工程中, 其中磁致伸缩性能较好的材料在传感器、机械控制、线性马达、能量收集、能量转换、位移器件和水中声呐扫描等领域呈现出重要的应用价值及广阔的应用前景<sup>[1-3]</sup>. 磁致伸缩材料也常被用于制造多重铁性的磁电复合材料<sup>[4,5]</sup>, 而磁致伸缩效应的逆效应-压磁效应, 也被应用于铁磁性材料的无损检测领域<sup>[6]</sup>. 目前多数磁致伸缩材料是以铁为基础进行合金或掺杂制成, 如 Terfenol-D (铽镧铁合金)、Fe-Ga 合金等, 因此从微观结构层面研究铁单质的磁致伸缩对改善传统磁致伸缩材料性能和研制新型磁致伸缩材料均有一定帮助.

温度、应力、形变和缺陷等都会对材料的磁致

伸缩性能产生影响, 为了研究这些因素对磁致伸缩的影响规律, 学者们已取得了诸多研究成果. Ren 等<sup>[7]</sup>建立了描述多晶铁非线性、各向异性的磁致伸缩的有限元模型, 预测了多晶铁在 300—900 K 温度范围内的磁致伸缩曲线. M'Zali 等<sup>[8]</sup>提出了一种识别电工钢在机械载荷下的磁致伸缩行为的方法, 并与直接测量电工钢在不同应力下的磁致伸缩结果对比, 结果吻合良好.

缺陷对磁致伸缩材料影响的研究多集中在金属磁记忆检测技术<sup>[9]</sup>上. 金属磁记忆检测技术是以压磁效应为基础的新型无损检测技术, 它通过测量铁磁性材料的磁记忆信号来探测材料中的应力集中区域和微型损伤, 可用来评估铁磁性材料的早期损伤<sup>[10]</sup>. 这项技术首先由 Dubov<sup>[11]</sup>于 1997 年提出, 此后研究者们开展了一系列有关无损检测的理论和试验研究<sup>[12,13]</sup>, 快速发展形成了一套全新的无

\* 国家重点研发计划 (批准号: 2018YFB0703500) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: longlc@bjut.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: yang.yang@iphy.ac.cn

损检测技术. 其技术原理基于磁致伸缩效应中的 Villari 效应 (压磁效应), 当铁磁性材料在受力工作时, 在工作荷载的作用下, 应力会使材料内部微观磁畴发生变化, 使得应力集中的位置处磁畴产生不可逆的重新取向, 并且这种不可逆的变化与所受应力大小和方式有关, 因此使用金属磁记忆检测技术可以检测出材料的应力集中部位.

Dubov<sup>[11]</sup> 指出铁磁性材料应力集中区域的切向磁信号会达到局部最大, 而法向磁信号会有归零的现象. Zhang 等<sup>[14]</sup> 研究了带肋钢筋疲劳损伤与压磁信号之间的关系, 通过对 HRB400 加肋钢筋进行单轴静态加载和循环拉伸加载试验, 证明了这种无损检测技术对分析带肋钢筋疲劳过程的有效性. 宋凯等<sup>[15]</sup> 将断裂机制与位错理论相结合, 建立了铁磁性材料在荷载作用下应力集中区和微观损伤区域磁信号变化的相关模型. 张卫民等<sup>[16]</sup> 通过研究中低碳钢静拉伸时的磁信号变化, 得到了试件拉伸至塑性变形之后表面磁场强度的变化规律, 为在弹性区域内检测低碳钢的应力变化提供了依据.

尽管学者们已经对磁致伸缩材料的制备<sup>[17]</sup>、改良<sup>[18]</sup>、测试<sup>[19]</sup> 和应用<sup>[20]</sup> 等领域进行了诸多研究, 但缺陷对铁磁性材料, 尤其是铁单质的磁致伸缩的影响仍缺乏系统的微观机理研究和仿真模拟机理解释. 本文采用分子动力学方法分别构建无缺陷、孔洞缺陷与裂纹缺陷的体心立方结构 (bcc) 铁薄膜磁致伸缩模型, 研究缺陷对其磁致伸缩性能的影响, 并从原子磁矩层面分析缺陷对其内部微观结构变化的影响机理.

## 2 计算方法

采用分子动力学方法分析 bcc 铁薄膜内缺陷对磁致伸缩和磁化构型演化的影响. 所使用的原子间势包括 EAM 势、spin/exchange 势<sup>[21–23]</sup> 和 spin/nel 势<sup>[21]</sup>. 模型原始尺寸为  $N_x \times N_y \times N_z$ , 其中  $N_x, N_y, N_z$  分别表示沿着  $x, y, z$  这 3 个方向的晶格数, 其中晶格常数为 2.86 Å, 模拟盒子的尺寸为  $160 \times 160 \times 1$  个晶格大小. 分别建立了无缺陷、孔洞缺陷及裂纹缺陷模型, 通过在模型中心删除掉  $10 \times 10 \times 1$  个晶格的原子构建孔洞缺陷, 通过在模型中心删除掉  $60 \times 2 \times 1$  和  $2 \times 60 \times 1$  个晶格的原子分别构建两个方向的裂纹缺陷.

边界条件为在  $x$  和  $y$  方向上设定非周期性边界条件,  $z$  方向设定为周期性边界条件, 铁原子的原子磁矩为  $2.2 \mu_B$ , 原子的初始磁矩方向设置为随机分布. 在 300 K 温度条件下进行模拟, 采用 nve/spin 系综, 并使用 langevin/spin 控温器控温, 积分步长为 5 fs, 数据输出间隔为 50 fs, 基于 LAMMPS 分子动力学模拟软件进行模拟.

## 3 结果与讨论

采用上述方法模拟驰豫 300 ps 并进行结构优化, 将驰豫平衡之后的模型输出作为初始模型, 初始模型内各原子磁矩投影到  $xy$  面上的磁化构型, 如图 1 所示. 图中颜色越深的区域表示其原子磁矩越接近  $x$  方向或  $y$  方向, 浅色区域表示原子磁矩与  $x$  方向或  $y$  方向间有较大夹角的偏转, 图中箭头表示该区域内原子的磁矩方向.

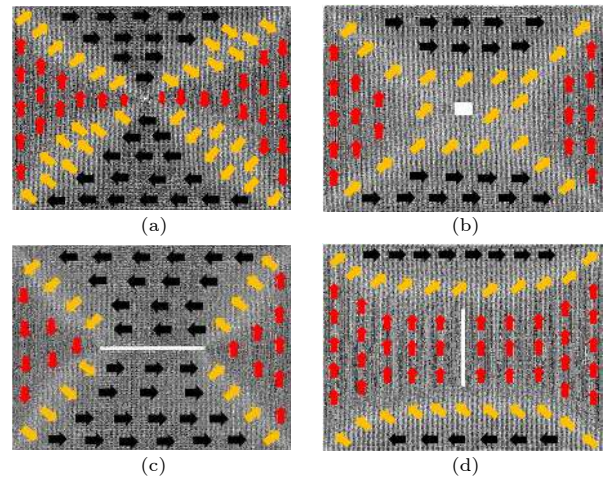


图 1 模型初始磁化构型 (a) 无缺陷; (b) 中心  $10 \times 10 \times 1$  缺陷; (c) 中心  $60 \times 2 \times 1$  缺陷; (d) 中心  $2 \times 60 \times 1$  缺陷  
Fig. 1. Initial magnetized configuration diagram of the model: (a) No defect; (b)  $10 \times 10 \times 1$  defect in the center; (c)  $60 \times 2 \times 1$  defect in the center; (d)  $2 \times 60 \times 1$  defect in the center.

无缺陷薄膜内原子磁矩出现了顺时针旋转的磁化漩涡, 其中磁化漩涡的中心位于模型中心处, 漩涡中心到模型的四边分成了 4 个三角形区域, 上下边界处的三角形区域内原子磁化方向分别沿  $x$  轴正方向和负方向, 左右边界处的三角形区域内原子磁化方向分别沿  $y$  轴正方向和负方向, 中心空白处原子磁矩沿  $z$  轴正方向, 在  $x, y$  方向上无偏转, 因此在  $xy$  面上的投影为空白. 如图 1(a) 所示.

与无缺陷薄膜的初始磁化构型对比, 中心有缺陷的薄膜不再产生磁化漩涡, 而是形成了, 3 种不同的磁化构型, 其中中心  $10 \times 10 \times 1$  缺陷模型弛豫完成后, 模型的整体磁化强度不再为 0, 而是沿  $x$  轴与  $y$  轴正方向, 其中模型上下边界处原子磁矩沿  $x$  轴正方向, 左右边界处原子磁矩沿  $y$  轴正方向, 缺陷周围大量原子磁矩沿  $x$  轴与  $y$  轴之间的过渡方向偏转. 如图 1(b) 所示.

中心  $60 \times 2 \times 1$  缺陷模型弛豫完成后, 模型的整体磁化强度仍大约为 0, 由于缺陷的存在, 模型在缺陷与模型上下边界之间形成了两个梯形区域, 梯形区域内原子磁矩分别沿  $x$  轴负、正方向, 缺陷与模型左右边界之间形成了两个三角形区域, 三角形区域内原子磁矩分别沿  $y$  轴负、正方向, 4 个区域之间的原子磁矩则处于过渡方向. 如图 1(c) 所示.

中心  $2 \times 60 \times 1$  缺陷模型弛豫完成后, 模型的整体磁化强度沿  $y$  轴正方向,  $x, z$  方向的磁化强度依然为 0, 模型内形成了由左至右将整个缺陷包含在内的区域, 该区域内原子磁矩沿  $y$  轴正方向, 只有上下边界处少部分原子磁矩分别沿  $x$  轴正、负方向, 各区域之间有部分原子磁矩处于过渡方向. 如图 1(d) 所示.

分别将弛豫完成后的模型作为模拟的初始模型, 对初始模型沿  $x$  轴正方向进行磁化, 改变磁场大小并得出磁致伸缩应变数据, 取不同磁场下磁致伸缩平衡后的应变数据, 做出不同磁场下磁致伸缩拟合曲线图, 如图 2 和图 3 所示. 图中横坐标为归一化磁场强度,  $H$  为外加磁场大小,  $H_m$  为使模型磁致伸缩饱和的最大外加磁场.

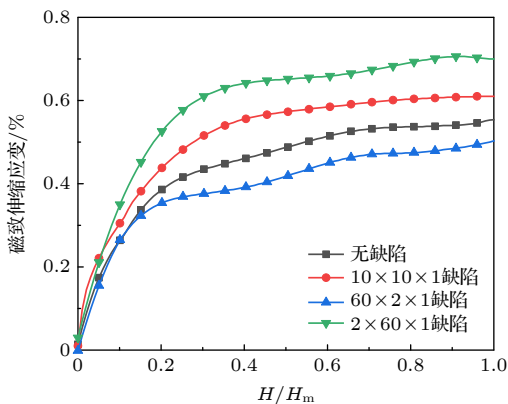


图 2 不同缺陷模型在  $x$  方向上磁致伸缩应变

Fig. 2. Magnetostrictive strain in the  $x$  direction for different defect models.

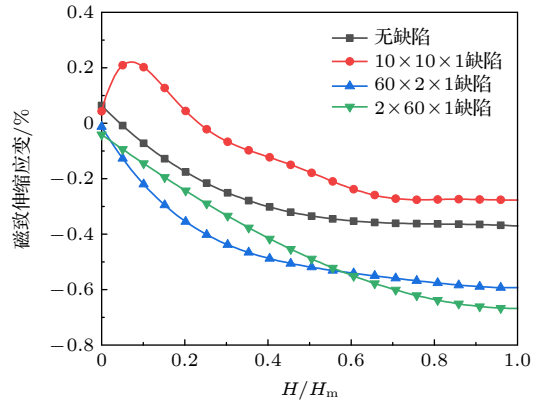


图 3 不同缺陷模型在  $y$  方向上磁致伸缩应变

Fig. 3. Magnetostrictive strain in the  $y$  direction for different defect models.

由图 2 可以看出, 对比  $x$  方向上的磁致伸缩应变, 与无缺陷薄膜相比, 中心  $60 \times 2 \times 1$  缺陷薄膜最易达到饱和磁致伸缩, 其达到饱和后的磁致伸缩应变也最小; 中心  $10 \times 10 \times 1$  与  $2 \times 60 \times 1$  缺陷薄膜则需要较大磁场才能接近饱和, 其中中心  $2 \times 60 \times 1$  缺陷薄膜达到饱和后的磁致伸缩应变最大.

图 3 为模型沿  $x$  轴正方向磁化过程中,  $y$  方向上的磁致伸缩应变曲线图.

由图 3 可知, 对比  $y$  方向上的磁致伸缩应变, 与无缺陷薄膜相比, 中心  $10 \times 10 \times 1$  缺陷薄膜的收缩量有所下降. 中心  $60 \times 2 \times 1$  与  $2 \times 60 \times 1$  缺陷薄膜的收缩量有所增大, 达到饱和后, 中心  $2 \times 60 \times 1$  缺陷薄膜的收缩应变最大.

为进一步探索磁化时缺陷对铁单质磁化构型演化的影响, 分别做出了铁单质薄膜在不同磁场强度磁化作用下达到平衡后的磁化构型图. 图 4 为无缺陷铁单质磁化构型演化图.

由图 4 可看出, 在外加  $0.025H_m$  磁场磁化作用下, 无缺陷模型中心的磁化漩涡消失, 原子磁矩转向磁化方向, 磁矩沿  $y$  方向的原子迅速减少. 在外加  $0.0625H_m$  磁场磁化作用下, 模型原子磁矩沿  $x$  轴正方向的区域面积增大, 但大多数是由磁矩沿过渡方向的原子转变而来, 原子磁矩沿  $y$  方向的区域面积变化不大. 在外加  $0.375H_m$  磁场磁化作用下, 多数原子磁矩转向  $x$  轴正方向, 此时铁单质磁化已接近饱和, 磁致伸缩曲线也变得平缓. 在外加  $1H_m$  磁场磁化作用下, 此时在强磁场磁化作用下, 铁单质薄膜内已经没有了原子磁矩沿  $y$  轴方向的区域, 除了左右边界处有少量原子磁矩尚未完全转向  $x$  轴方向外, 其余原子磁矩均已转向  $x$  轴正方向.

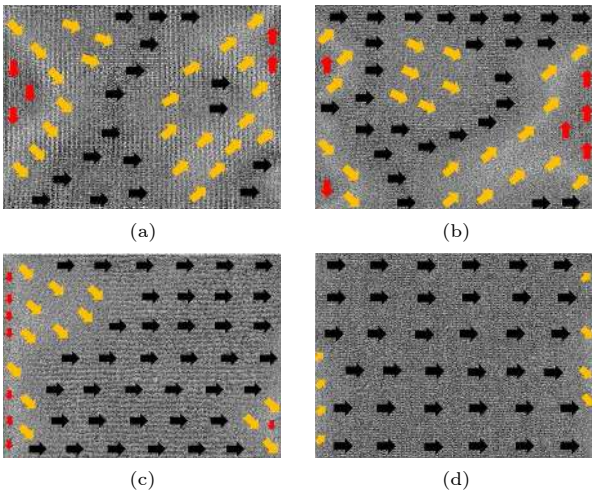


图 4 无缺陷铁单质磁化构型演化图 (a)  $0.025H_m$ ; (b)  $0.0625H_m$ ; (c)  $0.375H_m$ ; (d)  $1H_m$   
 Fig. 4. Evolution of magnetization structure in iron film without defect: (a)  $0.025H_m$ ; (b)  $0.0625H_m$ ; (c)  $0.375H_m$ ; (d)  $1H_m$ .

图 5 为中心  $10 \times 10 \times 1$  缺陷铁单质在不同强度磁场作用下的磁化构型演化图. 与无缺陷模型相比, 在外加  $0.025H_m$  磁场磁化作用下, 模型内部并未出现较大的原子磁矩相同的区域. 在外加  $0.0625H_m$  磁场磁化作用下, 模型内上下边界处两个原子磁矩沿  $x$  轴正方向的区域有融合的趋势, 但在缺陷的影响下, 连接处的原子磁矩仍是处于过渡方向. 外加磁场增大到  $0.375H_m$ , 模型内多数原子磁矩转向  $x$  轴正方向, 在缺陷影响下, 缺陷周围仍有部分原子磁矩处于过渡方向. 当外加磁场增大到  $1H_m$ , 此时在强磁场磁化作用下, 缺陷周围的原子磁矩也转向  $x$  轴正方向, 只有左右边界处有少量原子磁矩尚未完全转向  $x$  轴方向.

图 6 为中心  $60 \times 2 \times 1$  缺陷铁单质在不同强度磁场作用下的磁化构型演化图. 在外加  $0.025H_m$  磁场磁化作用下, 模型在磁化作用下, 4 个磁矩方向不同的区域以缺陷为中心沿顺时针方向发生了一定的位移和形变, 但各区域所占面积变化不大. 外加磁场增大到  $0.0625H_m$ , 模型在磁化作用下, 原本原子磁矩沿  $x$  轴负方向的区域消失, 原子磁矩沿  $x$  轴正方向区域迅速增大. 外加磁场增大到  $0.375H_m$ , 模型磁化已接近饱和, 原子磁矩沿  $x$  轴正方向的区域已将整个裂纹完全包含在内. 当外加磁场增大到  $1H_m$ , 此时模型磁化构型图与无缺陷模型磁化构型图相似, 除了左右边界处有少量原子磁矩尚未完全转向  $x$  轴方向, 其余原子磁矩均已转向  $x$  轴正方向.

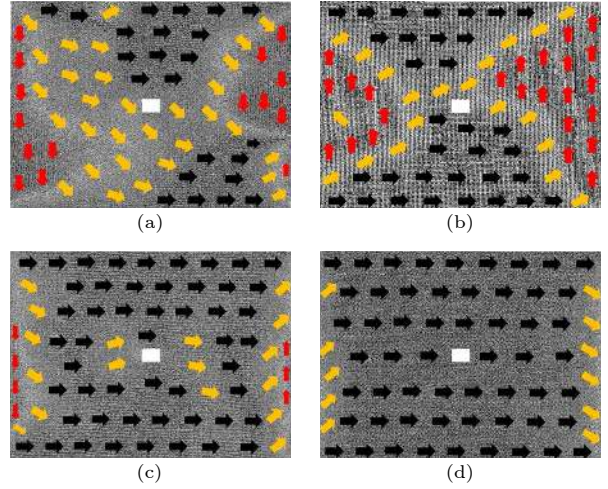


图 5 中心  $10 \times 10 \times 1$  缺陷铁单质磁化构型演化 (a)  $0.025H_m$ ; (b)  $0.0625H_m$ ; (c)  $0.375H_m$ ; (d)  $1H_m$   
 Fig. 5. Evolution of magnetization structure in iron film with  $10 \times 10 \times 1$  defect: (a)  $0.025H_m$ ; (b)  $0.0625H_m$ ; (c)  $0.375H_m$ ; (d)  $1H_m$ .

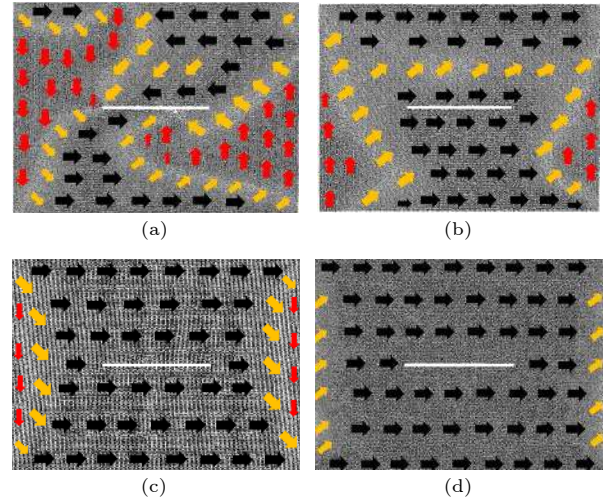


图 6  $60 \times 2 \times 1$  缺陷铁单质磁化构型演化图 (a)  $0.025H_m$ ; (b)  $0.0625H_m$ ; (c)  $0.375H_m$ ; (d)  $1H_m$   
 Fig. 6. Evolution of magnetization structure in iron film with  $60 \times 2 \times 1$  defect: (a)  $0.025H_m$ ; (b)  $0.0625H_m$ ; (c)  $0.375H_m$ ; (d)  $1H_m$ .

图 7 为中心  $2 \times 60 \times 1$  缺陷铁单质在不同强度磁场作用下的磁化构型演化图. 在外加  $0.025H_m$  磁场磁化作用下, 模型在磁化作用下, 原子磁矩沿  $y$  方向的区域面积缩小, 但由于缺陷的存在, 模型内附近的原子磁矩仍沿  $y$  轴方向. 外加磁场增大到  $0.0625H_m$ , 模型内原子磁矩沿  $y$  方向的区域继续缩小, 但由于缺陷的存在, 该区域仍占有较大面积. 外加磁场增大到  $0.375H_m$ , 此时其余模型磁化已接近饱和, 缺陷对模型的磁化构型有较大影响, 缺陷附近的原子磁矩处于过渡方向, 其在  $x$  方向的

磁化效率是4个模型中最差的. 当外加磁场增大到  $1H_m$ , 此时模型内缺陷周围有部分原子磁矩尚未完全转向  $x$  轴正方向.

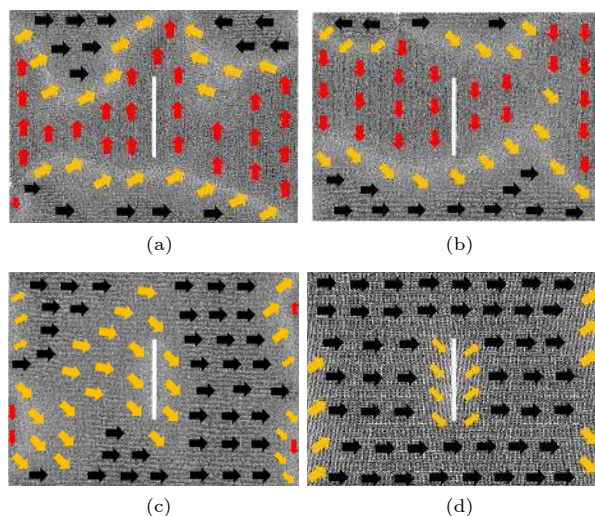


图7  $2 \times 60 \times 1$  缺陷铁单质磁化构型演化图 (a)  $0.025H_m$ ; (b)  $0.0625H_m$ ; (c)  $0.375H_m$ ; (d)  $1H_m$

Fig. 7. Evolution of magnetization structure in iron film with  $2 \times 60 \times 1$  defect: (a)  $0.025H_m$ ; (b)  $0.0625H_m$ ; (c)  $0.375H_m$ ; (d)  $1H_m$ .

## 4 结 论

采用分子动力学方法, 建立了含缺陷磁致伸缩 bcc 铁薄膜模型, 研究了无缺陷、孔洞缺陷与裂纹缺陷对铁单质薄膜磁致伸缩行为的影响, 并分析了沿  $x$  轴正方向磁化作用时, 铁单质磁致伸缩过程中内部微观结构的变化, 得到以下结论:

1) 缺陷的形状和方向均影响铁单质薄膜的磁致伸缩性能, 其中孔洞形缺陷对磁致伸缩的影响较小, 裂纹形缺陷对磁致伸缩的影响较大.

2) 裂纹的方向影响铁单质薄膜的磁致伸缩性能, 若构件中的裂纹方向与磁化方向平行, 则裂纹周围的原子更容易被磁化, 从而降低构件在磁化方向上由初始状态至磁化达到饱和的最大磁致伸缩量; 若构件中的裂纹方向与磁化方向垂直, 则裂纹周围的原子更难被磁化, 会提高构件在磁化方向上由初始状态至磁化达到饱和的最大磁致伸缩量.

3) 若构件中为孔洞缺陷, 则当外加磁场较小时, 孔洞对周围的原子磁矩的影响较为明显, 若外

加磁场较大时, 孔洞对周围原子磁矩的影响会越来越小.

## 参考文献

- [1] Makarova L A, Alekhina Y A, Isaev D A, Khairullin M F, Perov N S 2021 *J. Phys. D-Appl. Phys.* **54** 15003
- [2] Garcia M H, Barrera D, Amat R, Kurlyandskaya G V, Sales S 2016 *Measurement* **80** 201
- [3] Pei H F, Jing J H, Zhang S Q 2020 *Measurement* **151** 107172
- [4] Yu G L, Li Y X, Zeng Y Q, Li J, Zuo L, Li Q, Zhang H W 2013 *Chin. Phys. B* **22** 077504
- [5] Zhou Y, Li C J, Pan Y R 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 077702 (in Chinese) [周勇, 李纯健, 潘昱融 2018 物理学报 **67** 077702]
- [6] Su S Q, Liu X W, Wang W, Zuo F L, Deng R Z, Qin Y L 2020 *Chin. J. Eng.* **42** 1557 (in Chinese) [苏三庆, 刘馨为, 王威, 左付亮, 邓瑞泽, 秦彦龙 2020 工程科学学报 **42** 1557]
- [7] Ren W P, Xu K, Dixon S, Zhang C 2019 *NDT E Int.* **101** 34
- [8] M'Zali N, Martin F, Aydin U, Belahcen A, Benabou A, Henneron T 2020 *J. Magn. Mater.* **500** 166299
- [9] Shi P P, Hao S 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 034101 (in Chinese) [时朋朋, 郝帅 2021 物理学报 **70** 034101]
- [10] Zhao B X, Yao K, Wu L B, Li X L, Wang Y S 2020 *Appl. Sci. -Basel* **10** 7083
- [11] Dubov A A 1997 *Met. Sci. Heat Treat.* **39** 401
- [12] Wang P, Zhang Y, Yao E T, Mi Y, Zheng Y, Tang C L 2021 *Measurement* **168** 108187
- [13] Bao S, Gu Y B, Fu M L, Zhang D, Hu S N 2017 *J. Magn. Mater.* **423** 191
- [14] Zhang J, Jin W L, Mao J H, Xia J, Fan W J 2020 *Constr. Build. Mater.* **239** 117885
- [15] Song K, Ren J L, Ren S K, Tang J H 2007 *Nondestruct. Test.* **29** 312 (in Chinese) [宋凯, 任吉林, 任尚坤, 唐继红 2007 无损检测 **29** 312]
- [16] Zhang W M, Liu H G, Sun H T 2004 *Trans. Beijing Inst. Technol.* **24** 571 (in Chinese) [张卫民, 刘红光, 孙海涛 2004 北京理工大学学报 **24** 571]
- [17] Li C, Liu J H, Chen L B, Jiang C B, Xu H B 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 097505 (in Chinese) [李川, 刘敬华, 陈立彪, 蒋成保, 徐惠彬 2011 物理学报 **60** 097505]
- [18] Kharel P, Talebi S, Ramachandran B, Dixit A, Naik V M, Sahana M B, Sudakar C, Naik R, Rao M S R, Lawes G 2009 *J. Phys. -Condes. Matter.* **21** 36001
- [19] Zhang H, Zeng D C 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 2808 (in Chinese) [张辉, 曾德长 2010 物理学报 **59** 2808]
- [20] Suzuki S, Kawamata T, Simura R, Asano S, Fujieda S, Umetsu R Y, Fujita M, Imafuku M, Kumagai T, Fukuda T 2019 *Mater. Trans.* **60** 2235
- [21] Tranchida J, Plimpton S J, Thiabaudeau P, Thompson, A P 2018 *J. Comput. Phys.* **372** 406
- [22] Jeong J, Goremychkin E A, Guidi T, Nakajima K, Jeon G S, Kim S A, Furukawa S, Kim Y B, Lee S, Kiryukhin V, Cheong S W, Park J G 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 077202
- [23] Kvashnin Y O, Cardias R, Szilva A, Di Marco I, Katsnelson M I, Lichtenstein A I, Nordstrom L, Klautau A B, Eriksson O 2016 *Phys. Rev. Lett.* **116** 217202

# Effect of defects on magnetostriction and magnetic moment evolution of iron thin films<sup>\*</sup>

Zhang Shuo<sup>1)</sup> Long Lian-Chun<sup>1)†</sup> Liu Jing-Yi<sup>1)</sup> Yang Yang<sup>2)‡</sup>

1) (*Faculty of Materials and Manufacturing, Beijing University of Technology, Beijing 100124, China*)

2) (*Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China*)

( Received 22 June 2021; revised manuscript received 8 September 2021 )

## Abstract

Magnetostrictive materials have broad application prospects in sensing, control, energy conversion, and information conversion. The improving of the performances and applications of such materials has become a research hotspot, but defects will inevitably appear in the preparation and use of materials. In this study, the magnetostrictive structure model of iron elemental material with no defect or hole defect or crack defect is established by the molecular dynamics method. The influences of different defects on the magnetostrictive behavior of iron thin films are analyzed, and the mechanism of the influence of defects on the magnetostrictive behavior is depicted from the perspective of atomic magnetic moment. The results show that the films with  $60 \times 2 \times 1$  defects in the center are the easiest to reach saturation magnetostriction, and the magnetostriction is the least after reaching saturation, with respect to the films without defects. The films with  $10 \times 10 \times 1$  and  $2 \times 60 \times 1$  defects in the center require a larger magnetic field to approach to saturation, and the magnetostriction of the film with  $2 \times 60 \times 1$  defects in the center reaches a maximum value after saturation. This is because the defects will affect the magnetic moment of the surrounding atoms and make them deflect to the direction parallel to the defects, thus affecting the magnetostriction of the iron thin film. Among them, the hole defects have less influence on the magnetostriction, while the crack defects have stronger influence on the magnetostriction. The direction of the crack also has an effect on the magnetostriction of Fe thin film. When the crack is parallel to the direction of magnetization, the maximum magnetostriction of the film in the direction of magnetization from the initial state to the saturation of magnetization will decrease. When the crack is perpendicular to the direction of magnetization, the maximum magnetostriction of the film in the direction of magnetization from the initial state to the saturation of magnetization will increase. These results suggest that the defects affect the magnetostriction of the model as a whole during magnetization by affecting the initial magnetic moment orientation of the surrounding atoms.

**Keywords:** elemental iron, magnetostriction, defects, molecular dynamics, thin film

**PACS:** 75.80.+q, 02.70.Ns, 13.40.Em

**DOI:** 10.7498/aps.71.20211177

\* Project supported by the National Key R&D Program of China (Grant No. 2018YFB0703500).

† Corresponding author. E-mail: [longlc@bjut.edu.cn](mailto:longlc@bjut.edu.cn)

‡ Corresponding author. E-mail: [yang.yang@iphy.ac.cn](mailto:yang.yang@iphy.ac.cn)