

BULLETIN OF NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES
OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN

ISSN 1991-3494

Volume 6, Number 352 (2014), 16 – 21

**MODELING OF FORMATION OF NANOSTRUCTURES
IN THE MAGNETIC ORDERING OF IRON-BASED ALLOYS,
NICKEL AND CHROME**

**B. E. Vintaykin¹, N. A. Belyakov¹, V. S. Boruta¹,
T. A. Turambekov², P. A. Saidahmetov³, R. T. Abdraimov³**

¹Moscow State Technical University named after Bauman, Moscow, Russia;

²Ahmet Yasavi International Kazakh-Turkish University, Turkestan, Kazakhstan;

³M. Auezov South-Kazakhstan State University, Shymkent, Kazakhstan

Key words: ferromagnetic, nanostructure formation, damping.

Abstract. Nanoparticle systems are the structural basis of many of the materials used in modern technology. Analysis of the results of our work, and others shows that the optimal nanostructures are considered high-damping alloys, in which there are minor obstacles to the movement of domain walls. Such a structure can be so-called ferromagnetic sponge, in the matrix of the ferromagnetic phase which contains small particles isolated paramagnetic phase. Such nanostructures and, therefore, certain physical properties related arise under certain thermal treatment and the alloy composition – based solid solution of iron. In our work to determine the optimum heat treatment conditions and the composition of the alloy is proposed a method of modeling the formation of nanostructures in the case of the development of high-coercivity and semi-rigid system based alloys Fe-Cr-Co. This method is much more economical method of experimental research, which is also not always possible to find an optimum thermal treatment and composition of alloys. Using the method of modeling the formation of nanostructures possible to calculate the optimum compositions and heat treatment of two new classes of magnetic materials on the basis of the system Fe-Cr-Co and adjust the heat treatment and formulations already existing on the system type alloys. The model selected for the composition of the alloy of the first class of magnetic materials calculated temperature heat treatment steps to ensure the formation of the optimal structure. For the alloy composition selected from a second class of magnetic materials calculated temperature heat treatment steps to ensure formation of the optimal setpoints for the coercive force of the structure. In the future, the use of the model approach is provided to determine the composition and temperature of processing high-damping alloys.

УДК 669.15.112.228

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ФОРМИРОВАНИЯ
НАНОСТРУКТУР В МАГНИТНОУПОРЯДОЧЕННЫХ СПЛАВАХ
НА ОСНОВЕ ЖЕЛЕЗА, НИКЕЛЯ И ХРОМА**

**Б. Е. Винтайкин¹, Н. А. Беляков¹, В. С. Борута¹,
Т. А. Турмамбеков², П. А. Сайдахметов¹, Р. Т. Абдраймов¹**

¹Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана, Москва, Россия;

²Международный Казахско-Турецкий университет им. Ахмета Ясави, Туркестан, Казахстан;

³Южно-Казахстанский университет им. М. Ауезова, Шымкент, Казахстан

Ключевые слова: ферромагнит, формирования наноструктуры, демпфирования, наночастицы.

Аннотация. В данной работе рассматривается создание структуры и связанные с ней физические свойства в сплавах на основе железа. Путем моделирования процессов формирования наноструктуры в сплавах определяется их оптимальный состав и режим термообработки. Рассмотрены перспективы применения этого подхода для процессов формирования наноструктуры в сплавах высокого демпфирования и разработка на его основе схемы термообработок этих сплавов.

Введение. Системы наночастиц являются структурной основой многих материалов, применяемых в современной технике. Оптимальной для постоянных магнитов считается наноструктура, в которой вытянутые по одному направлению наночастицы ферромагнитной фазы изолированы тонкими прослойками парамагнитной фазы [1, 2]. Оптимальной структурой для полужестких магнитных сплавов являются взаимопроникающие области фаз, в которой ни ферро-, ни парамагнитные наночастицы нельзя считать ни матрицей, ни выделениями [3, 4]. Для сплавов высокого демпфирования оптимальными считаются структуры, в которых имеются незначительные препятствия для движения доменных стенок, такой структурой может быть так называемая ферромагнитная губка [5], в которой в матрице – ферромагнитной фазы имеются мелкие изолированные частицы парамагнитной фазы.

Создание таких структур и связанных с ними физических свойств возможно в результате оптимально подобранных термообработки и состава сплава – твердого раствора на основе железа. Для решения этой задачи метод экспериментального поиска, состоящий в подборе составов и термообработок, оказывается очень длительным и дорогостоящим, и он не позволяет найти оптимальное, истинное решение. В таком случае весьма эффективным оказался метод, основанный на моделировании процессов формирования наноструктур в магнитноупорядоченных сплавах на основе железа, никеля и хрома [6-8]. При таком подходе огромное множество натурных экспериментов заменяется экспериментами вычислительными, с помощью которых ищется оптимальное решение задачи. По результатам расчетов выбираются оптимальные составы сплавов и их термообработки, с ними и проводится небольшое число экспериментов. Такой подход значительно экономит время и средства.

В данной работе проведен анализ успешного применения моделирования формирования наноструктур для случая разработки высококоэрцитивных и полужестких сплавов на основе системы Fe-Cr-Co и рассмотрены перспективы применения этого подхода для процессов формирования наноструктур для случая магнитномягких сплавов и разработки на его основе схем термообработок сплавов высокого демпфирования.

Типы наноструктур, формирующихся в твердых растворах. Наиболее удобной модельной системой для изучения многообразия структур, возникающих при расслоении однородного твердого раствора на фазы, можно считать систему Fe-Cr-Co. В этой системе можно сформировать 12 основных и множество переходных типов структуры, они систематизированы в работе [3]. В этой системе происходит распад твердого альфа раствора с ОЦК решеткой на две фазы – ферромагнитную 1, состоящую в основном из Fe Co, и парамагнитную 2, состоящую в основном из хрома [1, 2]. Область расслоения имеет асимметричную форму с острым гребнем (см. рисунок 1). Такая форма области расслоения позволяет даже на сплаве одного состава получать три типа наноструктур: 1) изолированные выделения ферромагнитной фазы в парамагнитной матрице, 2) взаимопроникающие области фаз, 3) изолированные выделения парамагнитной фазы в ферромагнитной матрице. В виде изолированных выделений выпадает фаза с меньшей объемной долей, чему соответствует минимальная поверхность раздела областей фаз и связанная с ней поверхностная энергия.

Образовавшиеся фазы 1 и 2 в сплавах на основе Fe-Cr-Co имеют очень близкие значения параметров решетки, они когерентно связаны с другом, так что кристаллическая решетка не нарушается значительно на границе раздела фаз. Легирование сплавов Fe-Cr-Co четвертым элементом позволяет менять разность параметров решетки фаз и связанную с ней энергию упругих деформаций их кристаллических решеток. Элементами увеличивающими разность параметров решетки являются молибден и вольфрам, распределяющиеся в парамагнитную фазу с большим параметром решетки. Такие элементы как Al, Nb, Ti, V уменьшают разность параметров решетки фаз из-за их распределения в ферромагнитную фазу с меньшим параметром решетки. Увеличение роли энергию упругих деформаций кристаллических решеток фаз приводит к формированию неравноосных областей фаз, длинные оси которых направлены вдоль направлений с минимальным модулем Юнга (в случае ОЦК сплавов Fe-Cr-Co – <100>). Тогда число типов структуры удваивается: в каждом из трех основных типов структуры появляются два подтипа – с равноосными и неравноосными областями фаз (см. рисунок 2).

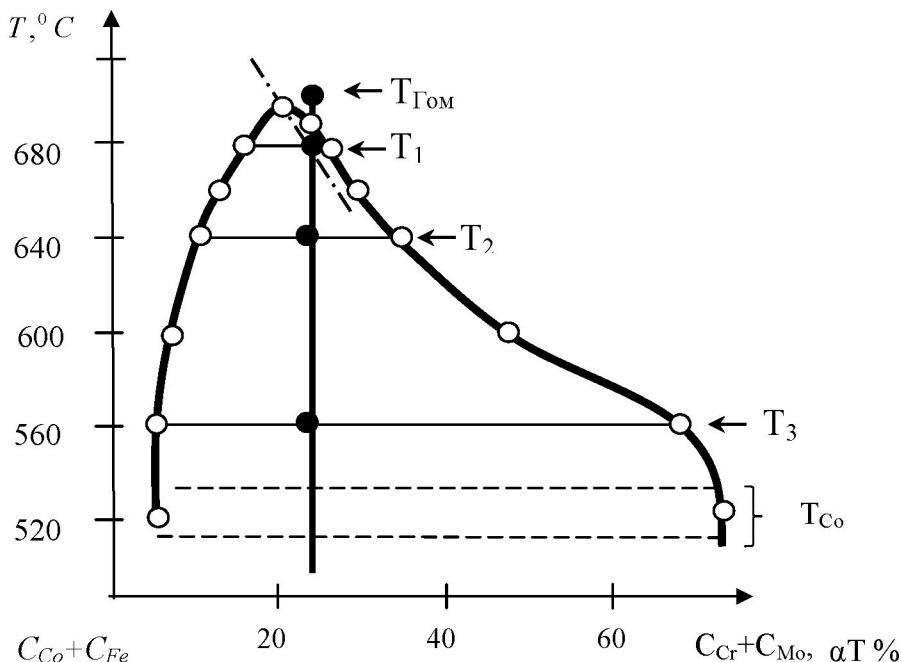


Рисунок 1 – Область расслоения в сплавах на основе Fe-Cr-Co,
три типичные температуры формирования главных типов структуры

Главный тип ТКС	H=0			H = 200 kA/m		
	1	2	3	1	2	3
A						
U						

Рисунок 2 – Основные типы структуры, возникающие при расслоении в сплавах на основе Fe-Cr-Co.
Показаны схематически изолированные частицы и системы взаимопроникающих областей фаз.
Черным цветом показаны области ферромагнитной фазы, а светлым – парамагнитной фазы

Применение внешнего магнитного поля в процессе термообработки, особенно, на ее начальном этапе, когда начинается формирование структуры, приводит к выстраиванию равноосных областей длинными осями вдоль направления магнитного поля, чему соответствуют меньшие значения магнитостатической энергии. В случае сильно неравноосных областей отсутствуют игольчатые выделения фаз с длинными осями перпендикулярными направлению магнитного поля. В случае пакетов пластинчатых областей фаз отсутствуют пакеты с пластинками, перпендикулярными направлению магнитного поля.

Всего получается 12 основных типов структуры с сильно различающимися магнитными свойствами. Изолированным выделениям ферромагнитной фазы в парамагнитной матрице соответствуют магнитные свойства оптимальные для постоянных магнитов – высокие значения коэрцитивной силы и магнитной энергии [1, 2]. Взаимопроникающим областям фаз отвечают средние значения коэрцитивной силы, необходимые для магнитно-пружинистых сплавов [4]. Изолированным выделениям парамагнитной фазы в ферромагнитной матрице соответствуют малые значения коэрцитивной силы, оптимальные для магнитомягких сплавов высокого демпфирования [5].

Получать эти 12 типов структур можно за счет оптимального выбора состава сплава и температур многоэтапной термообработки, поскольку получение структуры за один этап не всегда возможно. Высокая скорость протекания диффузионных процессов также накладывает ограничения на выбор режимов термообработки [5]. Получение первого типа структуры облегчается после гомогенизирующей обработки (ГО на рисунке 1), а получение второго типа после ГО возможно при достаточно быстром охлаждении. Проведение ступенчатого отпуска (СО на рис. 1) мелкими ступенями при понижающейся температуре позволяет сохранять тип структуры, сформировавшейся при трех указанных на рисунке 1 температурах. Подбор такого большого количества параметров термообработки удавалось проводить с помощью моделирования процессов распада в этих сплавах.

Моделирование процесса разделения на фазы в сплавах Fe-Cr-Co. Термодинамическая модель сплавов на основе Fe-Cr-Co учитывала вклады в свободную энергию химический, магнитного упорядочения в ферромагнитной фазе, атомного упорядочения, энергии упругих деформаций фаз, намагничения ферромагнитных областей во внешнем магнитном поле. Подробно модель описана в работах [6-8]. Параметры модели были уточнены по специально разработанным методикам полного или частичного определения составов фаз, возникающих в процессе распада [9-12].

Построенная модель очень точно воспроизводила наблюдающуюся экспериментально область расслоения с особым гребнем, как бы переходящим в поверхность точек Кюри твердых тройных растворов на основе Fe-Cr-Co. Модель позволяла также определять спинодальные области (где вторая производная свободной энергии по некоторым направлениям в пространстве концентраций меньше нуля, из-за чего сплав неустойчив) в многокомпонентных сплавах. Также оказалось возможным определять области температур и составов сплавов, отвечающих метастабильным состояниям, где, в частности, вторая производная свободной энергии по некоторым направлениям в пространстве концентраций близка к нулю.

С помощью этой модели были вычислены оптимальные составы и термообработки двух новых классов магнитных материалов на основе системы Fe-Cr-Co и скорректированы термообработки и составы уже существующих на этой системы типов сплавов, рассмотрим их.

Высокоэнергетические монокристалльные постоянные магниты на основе системы Fe-Cr-Co были разработаны в [13, 14] на основе структуры из игольчатых выделений-наночастиц ферромагнитной фазы вытянутых по одному направлению и изолированных тонкими прослойками парамагнитной фазы, то есть первого типа структуры. С помощью модели для выбранного состава сплава вычисляли температуры ступеней термообработки, обеспечивающие формирование оптимальной структуры. Состав сплава выбирали так, чтобы обеспечить заданные значения разности параметров решеток фаз и их объемные доли при температуре, обеспечивающей формирование частиц оптимального размера.

Магнитно-пружинистые сплавы широкого назначения Fe-Cr-Co с заданными значениями коэрцитивной силы были разработаны в [4] на основе структуры второго типа. С помощью модели для выбранного состава сплава вычисляли температуры ступеней термообработки, обеспечивающие формирование оптимальной для получения заданных значений коэрцитивной силы структуры. Состав сплава выбирали так, чтобы обеспечить заданные (малые) значения разности параметров решеток фаз и их объемные доли при температуре, обеспечивающей формирование частиц оптимального размера.

Сплавы для высокопластичных постоянных магнитов Fe-Cr-Co были уточнены в [15] путем минимизации разности параметров решетки в фазах, возникающих при распаде в широком диапазоне температур.

Модель успешно применялась и для анализа процессов в сплавах систем Fe-Cr, Fe-Ni, Fe-Cr-Ni [16]. С ее помощью были вычислены области расслоения и неустойчивых состояний в этих сплавах, совпавшие с экспериментально найденными в ряде работ.

Перспективы применения модели. Данная модель может быть, несомненно, полезна для разработки сплавов высокого демпфирования на основе структуры типа ферромагнитной губки [5]. Также модель позволяет определять расчетным путем области критических точек твердых растворов и области абсолютно неустойчивых и метастабильных состояний на диаграммах состояния, то есть те области составов и температур, в которых следует ожидать формирование неоднородных по составуnano- и микроструктур сплавов. Именно такие структуры, согласно теории перемагничивания магнитных материалов, должны обеспечивать получение петель магнитного гистерезиса, отвечающих сплавам, эффективно рассеивающим энергию механических колебаний.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Kaneko H., Homma M., Nakamura Y. New ductile permanent magnet of Fe-Cr-Co system // AIP Conf. Proc. – 1972. – N 5. – P. 1088-1092.
- [2] Беляцкая И.С. О формировании высококоэрцитивного состояния в сплавах на основе Fe-Cr-Co // Металлы. – 1984. – № 1. – С. 97-103.
- [3] Винтайкин Б.Е., Кузьмин Р.Н., Сухарева Е.А. Классификация типов кристаллической структуры, возникающих при магнитном распаде в монокристаллах ОЦК твердых растворов на основе Fe-Cr-Co // Кристаллография. – 1990. – Т. 35, вып. 2. – С. 414-417.
- [4] Винтайкин Б.Е., Либман М.А., Потапов Н.Н., Борута В.С. Магнитнотвердые сплавы системы Fe-Cr-Co – универсальные материалы для роторов синхронных гистерезисных электродвигателей // Известия ВУЗ. Электричество. – 1992. – № 2. – С. 52-54.
- [5] Винтайкин Б.Е., Голиков В.А., Дударев В.В., Сапкова И.Г. О структуре типа ферромагнитной губки в сплавах системы Fe-Cr-Co // Физика металлов и металловедение. – 1991. – № 10. – С. 105-110.
- [6] Винтайкин Б.Е., Кузьмин Р.Н. Термодинамическое исследование процесса расслоения в высококоэрцитивных сплавах Fe-Cr-Co, Fe-Cr-Co-Mo, Fe-Cr-Co-Nb // Металлофизика. – 1987. – Т. 9, № 3. – С. 16-21.
- [7] Беляков Н.А., Винтайкин Б.Е. Роль энергии упругих деформаций кристаллических решеток когерентно сопряженных фаз в формировании фазового равновесия в многокомпонентных сплавах на основе системы железо-хром-кобальт // Металловедение и термообработка металлов (МИТОМ). – 2011. – № 1. – С. 44-50.
- [8] Беляков Н.А., Винтайкин Б.Е. Исследование влияния энергии упругих деформаций когерентно-сопряжённых фаз на фазовое равновесие в сплавах на основе системы Fe-Cr-Co методами термодинамического моделирования // Вестник МГТУ. Естественные науки. – 2012. – № 5. – С. 65-74.
- [9] Винтайкин Б.Е., Кузьмин Р.Н. Определение состава фаз в многокомпонентных твердых растворах при совместном использовании мессбауэровской спектроскопии и рентгеновской дифрактометрии // Письма в ЖТФ. – 1986. – Т. 12, вып. 24. – С. 1531-1534.
- [10] Винтайкин Б.Е., Винтайкин Е.З., Мильчарек Я., Микке К. Влияние энергии магнитного упорядочения на форму области расслоения в спинодально распадающихся сплавах Fe-Cr-Co // Металлы. – 1999. – № 6. – С. 89.
- [11] Винтайкин Б.Е., Кузьмин Р.Н. Об особенностях фазового равновесия в высококоэрцитивных сплавах Fe-Cr-Co-Mo // Физика металлов и металловедение. – 1987. – Т. 64, вып. 1. – С. 101-106.
- [12] Винтайкин Б.Е., Голиков В.А., Дударев В.В., Сапкова И.Г. О фазовом равновесии в магнитножестких сплавах Fe-Cr-Co-V и Fe-Cr-Co-V-Mo // Физика металлов и металловедение. – 1991. – № 4. – С. 73-78.
- [13] Alekseev N.A., Sidorov E.V., Vintaikin B.E. Commercial single-crystal permanent magnets from alloy Fe-Cr-Co-Mo // Intern. conference Intermag-90. – Brighton (UK). – GP-34.
- [14] Винтайкин Б.Е., Сидоров Е.В. К вопросу изготовления монокристаллических магнитов из сплава системы Fe-Cr-Co-Mo // Металловедение и термич. обработка металлов. – 1990. – № 1. – С. 47-48.
- [15] Винтайкин Б.Е., Винтайкин Б.Е., Перспективы разработки пластичных магнитнотвердых материалов // Сталь. – 1999. – № 4. – С. 75-78.
- [16] Винтайкин Б.Е., Кузьмин Р.Н. О природе расслоения на магнитную и парамагнитную фазы в системе Fe-Ni // ДАН СССР. – 1987. – Т. 293, № 6. – С. 1386-1389.

REFERENCES

- [1] Kaneko H., Homma M., Nakamura Y. New ductile permanent magnet of Fe-Cr-Co system. AIP Conf. Proc. 1972. N 5. P. 1088-1092.
- [2] Belyatskaya IS On production of a high status in alloys based on Fe-Cr-Co. Metals. 1984. N 1. S. 97-103.

- [3] Vintaykin B.E., Kuzmin R.N., Sukharev E.A. The classification of the crystal structure, resulting in a magnetic decay in single crystals of bcc solid solutions based on Fe-Cr-Co. Kristallografiya. 1990. T. 35, vol. 2. S. 414-417.
- [4] Vintaykin B.E., Liebman M.A., Potapov N.N., Borut V.S. Magnitnotverdye alloys of the Fe-Cr-Co – versatile materials for rotor synchronous hysteresis elektrodvigateley. Proceedings university. Elektrichestvo. 1992. N 2. S. 52-54.
- [5] Vintaykin B.E., Golikov V.A., Dudarev V.V., Sapkova I.G. On the structure of the ferromagnetic type sponge in alloys of Fe-Cr-Co. Physics of Metals and metallovedenie. 1991. N 10. S. 105-110.
- [6] Vintaykin B.E., Kuzmin R.N. Termodinamicheskoe study of the separation of high-coercivity alloys of Fe-Cr-Co, Fe-Cr-Co-Mo, Fe-Cr-Co-Nb. Metallofizika. 1987. T. 9, N 3. S. 16-21.
- [7] Belyakov N.A., Vintaykin B.E. The role of the elastic deformation energy of the crystal lattices of coherently coupled phases in the formation of the phase equilibrium in multicomponent alloys based on iron-chromium-cobalt. Metallurgy and heat treatment of metals (Mitomo). 2011. N 1. S. 44-50.
- [8] Belyakov N.A., Vintaykin B.E. Investigation of the effect of the elastic deformation energy of the coherently conjugate phases on phase equilibria in alloys based on the system Fe-Cr-Co thermodynamic modeling methods // Herald Bauman, Science. 2012. N 5. S. 65-74.
- [9] Vintaykin B.E., Kuzmin R.N. Determination of the composition of phases in multicomponent solid solutions when used in conjunction Mossbauer spectroscopy and X-ray diffraction. Letters to ZHTF. 1986. Vol. 12, vyp. 24. S. 1531-1534.
- [10] Vintaykin B.E., Vintaykin E.Z., Milcharek J., Micke C. The influence of the energy of magnetic ordering on the form of the separation region in the spinodal decay alloys Fe-Cr-Co. Metals. 1999. N 6. S. 89.
- [11] Vintaykin B.E., Kuzmin R.N. Ob features of phase equilibrium in vysokokoertsiv-alloys is Fe-Cr-Co-Mo. Physics of Metals and metallovedenie. 1987. T. 64, vol. 1. S. 101-106.
- [12] Vintaykin B.E., Golikov V.A., Dudarev V.V., Sapkova I.G. Phase equilibrium in magnitnozhestkikh alloys Fe-Cr-Co-V and Fe-Cr-Co-V-Mo. Physics of Metals and metallovedenie. 1991. N 4. S. 73-78.
- [13] Alekseev N.A., Sidorov E.V., Vintaikin B.E. Commercial single-crystal permanent magnets from alloy Fe-Cr-Co-Mo. Intern. conference Intermag-90. Brighton (UK). GP-34.
- [14] Vintaykin B.E., Sidorov E.V. On the question of the single crystal manufacturing-cal magnet alloy system Fe-Cr-Co-Mo. Metallurgy and therm. processing metallov. 1990. N 1. P. 47-48.
- [15] Vintaykin B.E., Vintaykin B.E. Prospects for the development of plastic magnitnotverdyh materialov. Steel. 1999. N 4. S. 75-78.
- [16] Vintaykin B.E., Kuzmin R.N. On the nature of the bundle on the magnetic and paramagnetic phases in the system Fe-Ni. DAN SSSR. Moscow, 1987. T. 293, N 6. P. 1386-1389.

ТЕМІР, НИКЕЛЬ ЖӘНЕ ХРОМ НЕГІЗІНДЕГІ МАГНИТТІ РЕТТЕЛГЕН ҚОРТПАЛАДАҒЫ НАНОҚҰРЫЛЫМНЫҢ ҚАЛЫПТАСУ ПРОЦЕСІН МОДЕЛЬДЕУ

**Б. Е. Винтайкин¹, Н. А. Беляков¹, В. С. Борута¹,
Т. А. Турамбеков², П. А. Сайдахметов³, Р. Т. Абдраимов³**

¹Н. Э. Бауман атындағы Мәскеу мемлекеттік техникалық университеті, Мәскеу, Ресей;

²К. А. Ясаяу атындағы Халықаралық қазак-түрік университет, Туркестан, Қазақстан;

³М. Әуезов атындағы Оңтүстік Қазақстан мемлекеттік университеті, Шымкент, Қазақстан

Тірек сөздер: ферромагнит, наноқұрылымды қалыптастыру, демпфирлі, нанобөлшек.

Аннотация. Жұмыста темір негізінде қортпалардың құрылымның пайда болуы және соған байланысты физикалық қасиеттері қарастырылады. Қортпалардағы наноқұрылымның қалыптасусы процесінің моделін жасау арқылы олардың құрамы және термиялық өндөу жолдары анықталады. Дефирлік қасиеті жоғары қортпалардағы наноқұрылымдық қалыптасусы үшін осы әдістеменің келешегі және осының негізінде қортпалардың термиялық өндөу схемасының келешегі қарастырылған.

Поступила 23.10.2014 г.