

Моделирование отдельных гармоник магнитоэлектрического эффекта в программном пакете COMSOL Multiphysics

М.В. Джапаридзе,^{*} Л.Ю. Фетисов,[†] Ф.А. Федулов[‡]
МИРЭА — Российский технологический университет,
НОЦ «Магнитоэлектрические материалы и устройства»
Россия, 119454, Москва, проспект Вернадского, д. 78
(Поступила в редакцию 09.06.2024; подписана в печать 30.08.2024)

В работе предложен новый алгоритм расчета магнитоэлектрического эффекта в программном пакете COMSOL Multiphysics 6.0. В его основе лежало составление линейной композиции полученных в различные моменты времени решений дифференциальных уравнений, описывающих магнитоэлектрический эффект. Преимуществом описанного метода являлась возможность выделения из общего спектра магнитоэлектрического напряжения отдельных составляющих, соответствующих различным гармоникам магнитоэлектрического сигнала. В ходе проведения работы данный метод был использован для вычисления полевых и амплитудных зависимостей амплитуд первых трех гармоник магнитоэлектрического эффекта в двухслойных композитных структурах на основе магнитоэлектрического никеля и различных широкозонных пьезополупроводников (нитрида алюминия, нитрида галлия и оксида галлия). Показано, что полученные при помощи описанного в работе метода зависимости не противоречат существующим на сегодня данным, следовательно, данный метод расчета пригоден для моделирования перспективных магнитоэлектрических систем и в дальнейшем сможет найти широкое применение.

PACS:75.85.+t; 02.70.-c

УДК: 537.633.9; 519.688

Ключевые слова: магнитоэлектрический эффект, численное моделирование, COMSOL Multiphysics, нелинейный эффект.

ВВЕДЕНИЕ

Магнитоэлектрический (МЭ) эффект, представляющий собой изменение поляризации материала под действием магнитного поля (прямой эффект) или намагниченности при воздействии внешнего электрического поля (обратный эффект), был теоретически предсказан Л.Д. Ландау, Е.М. Лившицем и И.Е. Дзялошинским в 1957 г., а два года спустя Д.Н. Астров обнаружил его в оксиде хрома Cr_2O_3 [1]. В течение следующих нескольких десятилетий ученые по всему миру пытались обнаружить МЭ-эффект в других монокристаллических мультиферроиках — материалах, обладающих несколькими видами упорядочения (например, ферромагнитным и сегнетоэлектрическим). Было выявлено несколько десятков подходящих кристаллов, однако все они отличались двумя существенными недостатками: малой величиной эффекта ($\alpha < 10$ мВ/(см·Э)) и труднодостижимыми условиями его возникновения (требовалось охлаждение до гелиевых температур и наличие сильных магнитных полей).

Новой вехой в исследовании МЭ-эффекта стало создание в 2001 г. МЭ-композитов — искусственных мультиферроиков, состоящих из магнитоэлектрической и пьезоэлектрической фаз, механически связанных друг с другом [2]. При приложении магнитного поля к таким материалам их магнитоэлектрическая составляющая начинает деформироваться, что приводит

к возникновению механических напряжений в пьезоэлектрической фазе, и, как следствие, генерации электрического напряжения за счет прямого пьезоэффекта [3]. Таким образом, в МЭ-композитах под действием внешнего магнитного поля возникает электрическое напряжение, что делает эти материалы искусственными аналогами природных МЭ-монокристаллов. При этом МЭ-эффект в композитах возникает при комнатной температуре, а значения α в таких структурах может достигать от единиц до сотен В/(см·Э). Именно поэтому в настоящее время большинство работ, связанных с исследованием МЭ-эффекта, посвящены изучению свойств МЭ-композитов, состоящих из различных пьезоэлектриков и магнитоэлектрических материалов [4].

В целях предсказания МЭ-свойств композитных структур, а также количественной и качественной оценки МЭ-эффекта используют компьютерное моделирование, выполненное при помощи различных систем автоматизированного проектирования, в частности, COMSOL Multiphysics. Данная программа позволяет производить расчеты физических процессов, связанных с различными областями физики и, как следствие, подходит для расчета МЭ-эффекта, представляющего собой мультифизический процесс. Однако во многих случаях исследователям необходимо знать особенности поведения не только МЭ-напряжения в целом, но и отдельных его гармоник (особенно первых трех), а программный пакет COMSOL Multiphysics не позволяет напрямую получить эти данные. Попытке решения этой немаловажной проблемы посвящена данная работа.

Для количественного описания прямого МЭ-

* dzhaparidze@mirea.ru

† fetisovl@yandex.ru

‡ ostsiolograf@ya.ru

эффекта, как правило, используют МЭ-коэффициент α , равный отношению напряженности возникшего в материале электрического поля E к напряженности внешнего возбуждающего переменного магнитного поля h :

$$\alpha = \frac{dE}{dh}. \quad (1)$$

Поскольку на практике чаще всего измеряют не напряженность электрического поля, а разность потенциалов u , возникающую на противоположных гранях образца толщиной b , то формулу (1) можно записать в виде [5]:

$$\alpha = \frac{d(u/b)}{dh} = \frac{1}{b} \cdot \frac{du}{dh} \approx \frac{u}{bh} \quad (2)$$

1. ЛИНЕЙНЫЙ И НЕЛИНЕЙНЫЙ МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ

Как правило, для генерации МЭ-эффекта на композитную структуру подают два вида магнитных полей: переменное поле h отвечает за изменение деформации магнитоэлектрического материала, а постоянное

поле подмагничивания H_0 необходимо для того, чтобы обеспечить смещение итогового поля в ту область, где колебания магнитоэлектрического слоя будут обладать наибольшей линейностью.

Однако даже в этом случае изменение деформации магнитоэлектрического материала и, как следствие, величина МЭ-напряжения, будут носить нелинейный характер. Появление нелинейности МЭ-напряжения связаны в первую очередь с нелинейными свойствами магнитоэлектрики.

МЭ-напряжение в общем случае пропорционально пьезомодулю пьезоэлектрического материала d и магнитоэлектрики $\lambda(H)$.

$$u = Ad\lambda(H), \quad (3)$$

где A — коэффициент пропорциональности, зависящий от параметров слоев композитной гетероструктуры и метода ее закрепления.

В свою очередь магнитоэлектрика $\lambda(H)$ зависит от магнитного поля $H = H_0 + h$. Из математического анализа известно, что любую непрерывную функцию $f(x)$ в окрестности точки a можно разложить в степенной ряд вида [6]:

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(a)}{k!} (x-a)^k = f(a) + \frac{\partial f(x)}{\partial x} (x-a) + \frac{1}{2} \cdot \frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} (x-a)^2 + \frac{1}{6} \cdot \frac{\partial^3 f(x)}{\partial x^3} (x-a)^3 + \dots \quad (4)$$

Для магнитоэлектрики в окрестности точки H_0 эта формула принимает вид (остальными слагаемыми мы пренебрегаем ввиду их малости):

$$\lambda(H) \approx \lambda(H_0) + \left(\frac{\partial \lambda}{\partial H} \Big|_{H=H_0} \right) \cdot h + \frac{1}{2} \cdot \left(\frac{\partial^2 \lambda}{\partial H^2} \Big|_{H=H_0} \right) \cdot h^2 + \frac{1}{6} \cdot \left(\frac{\partial^3 \lambda}{\partial H^3} \Big|_{H=H_0} \right) \cdot h^3. \quad (5)$$

Как правило, переменное магнитное поле, используемое для генерации МЭ-эффекта, изменяется по гармоническому закону $h(t) = h \cos(2\pi ft)$. Следовательно, формулу (5) можно переписать в виде:

$$\lambda(H) \approx \left[\lambda(H_0) + \frac{1}{4} \cdot \left(\frac{\partial^2 \lambda}{\partial H^2} \Big|_{H=H_0} \right) \cdot h^2 \right] + \left[\left(\frac{\partial \lambda}{\partial H} \Big|_{H=H_0} \right) \cdot h + \frac{1}{8} \cdot \left(\frac{\partial^3 \lambda}{\partial H^3} \Big|_{H=H_0} \right) \cdot h^3 \right] \cdot \cos(2\pi ft) + \left[\frac{1}{4} \cdot \left(\frac{\partial^2 \lambda}{\partial H^2} \Big|_{H=H_0} \right) \cdot h^2 \right] \cdot \cos(4\pi ft) + \left[\frac{1}{24} \cdot \left(\frac{\partial^3 \lambda}{\partial H^3} \Big|_{H=H_0} \right) \cdot h^3 \right] \cdot \cos(6\pi ft). \quad (6)$$

Подставив выражение (6) в формулу (4), получим

$$\lambda(H) \approx Ad \left[\lambda(H_0) + \frac{1}{4} \cdot \left(\frac{\partial^2 \lambda}{\partial H^2} \Big|_{H=H_0} \right) \cdot h^2 \right] + Ad \left[\left(\frac{\partial \lambda}{\partial H} \Big|_{H=H_0} \right) \cdot h + \frac{1}{8} \cdot \left(\frac{\partial^3 \lambda}{\partial H^3} \Big|_{H=H_0} \right) \cdot h^3 \right] \cdot \cos(2\pi ft) + Ad \left[\frac{1}{4} \cdot \left(\frac{\partial^2 \lambda}{\partial H^2} \Big|_{H=H_0} \right) \cdot h^2 \right] \cdot \cos(4\pi ft) + Ad \left[\frac{1}{24} \cdot \left(\frac{\partial^3 \lambda}{\partial H^3} \Big|_{H=H_0} \right) \cdot h^3 \right] \cdot \cos(6\pi ft) \quad (7)$$

Из формулы (7) следует, что полное МЭ-напряжение состоит не только из линейной составляющей, но также из высших гармоник: второй и третьей. Выражение (7) можно переписать в следующем виде [7]:

$$u = \sum_{k=0}^{\infty} u_k \cos(2\pi k ft) \approx u_0 + u_1 \cos(2\pi ft) + u_2 \cos(4\pi ft) + u_3 \cos(6\pi ft) \quad (8)$$

где

$$u_0 = Ad \left[\lambda(H_0) + \frac{1}{4} \cdot \left(\frac{\partial^2 \lambda}{\partial H^2} \Big|_{H=H_0} \right) \cdot h^2 \right],$$

$$u_1 = Ad \left[\left(\frac{\partial \lambda}{\partial H} \Big|_{H=H_0} \right) \cdot h + \frac{1}{8} \cdot \left(\frac{\partial^3 \lambda}{\partial H^3} \Big|_{H=H_0} \right) \cdot h^3 \right] \approx Ad \left[\left(\frac{\partial \lambda}{\partial H} \Big|_{H=H_0} \right) \cdot h \right], \quad (9)$$

$$u_2 = Ad \left[\frac{1}{4} \cdot \left(\frac{\partial^2 \lambda}{\partial H^2} \Big|_{H=H_0} \right) \cdot h^2 \right], \quad (10)$$

$$u_3 = Ad \left[\frac{1}{24} \cdot \left(\frac{\partial^3 \lambda}{\partial H^3} \Big|_{H=H_0} \right) \cdot h^3 \right]. \quad (11)$$

Как видно из формул (9)–(11), амплитуды каждой из гармоник МЭ-напряжения пропорциональны соответствующим производным магнитострикции по магнитному полю H и соответствующим степеням амплитуды магнитного поля h .

Для описания высших гармоник МЭ-эффекта по аналогии с (2) используются нелинейные МЭ-коэффициенты, которые рассчитываются по формулам:

$$\alpha_2 = \frac{u_2}{b \cdot h^2}, \quad \alpha_3 = \frac{u_3}{b \cdot h^3}.$$

2. ОСОБЕННОСТИ МОДЕЛИРОВАНИЯ МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА

В данной работе для моделирования МЭ-эффекта использовали программный пакет COMSOL Multiphysics 6.0. Основным преимуществом COMSOL Multiphysics перед аналогами является возможность проведения мультифизических расчетов, позволяющих одновременно моделировать процессы, связанные с различными областями физики. МЭ-эффект в композитных структурах также является мультифизическим процессом: для расчета требуется учитывать механические, магнитные и электрические процессы, происходящие в композитной структуре. Именно поэтому COMSOL Multiphysics является оптимальной для моделирования МЭ-структур.

Рассмотрим процесс моделирования МЭ-эффекта в данной программной среде. В первую очередь необходимо отметить, что единого мультифизического модуля (интерфейса), отвечающего за расчет МЭ-эффекта в программе нет, поэтому для расчета необходимо совмещать мультифизические интерфейсы, предназначенные для расчета магнитострикции и пьезоэффекта. Рассмотрим эти модули подробнее.

Мультифизический интерфейс *Магнитострикция (Magnetostriction)* позволяет объединить возможности модулей *Механика твердого тела (Solid Mechanics)*

и *Магнитные поля (Magnetic Fields)* для анализа магнитострикционных материалов и устройств. Доступна возможность как линейного, так и нелинейного расчета деформаций и намагниченности в модели, вследствие чего возможно моделирование как эффекта Джоуля (магнитострикции), так и эффекта Виллари (магнитоупругого эффекта).

При работе данного мультифизического модуля интерфейс *Магнитные поля (Magnetic Fields)* решает уравнения Максвелла методом векторного потенциала, определяя распределение магнитного поля внутри исследуемой структуры. Модуль *Механика твердого тела (Solid Mechanics)* в это же время анализирует структуру объекта и посредством решения уравнения Навье определяет его деформации и механические напряжения, вызванные магнитострикцией.

При создании модели чаще всего предполагается, что кривая намагничивания магнитострикционного материала описывается функцией Ланжевена:

$$M = M_{sat} \left(\operatorname{cth} \left(\frac{3\chi_0 \left(H + \frac{3\lambda_{sat}}{\mu_0 M_{sat}^2} \right)}{M_{sat}} \right) - \frac{M_{sat}}{3\chi_0 \left(H + \frac{3\lambda_{sat}}{\mu_0 M_{sat}^2} \right)} \right),$$

где M_{sat} и λ_{sat} — намагниченность и магнитострикция насыщения, а μ_0 и χ_0 — магнитные проницаемость и восприимчивость в отсутствии магнитного поля.

На основании полученных кривых намагничивания программой рассчитываются значения магнитострикции. При этом учитывается и анизотропия магнитных свойств магнитострикционного ферромагнетика.

Мультифизический модуль *Пьезоэлектрические устройства (Piezoelectric Devices)* позволяет рассчитывать характеристики пьезоэлектриков за счет объединения возможностей интерфейсов *Механика твердого тела (Solid Mechanics)* и *Электроста-*

мика (*Electrostatics*). Возможности программного пакета позволяют как решать уравнения, описывающие прямое пьезоэлектрическое взаимодействие, так и производить расчет обратного пьезоэффекта.

При работе интерфейса *Пьезоэлектрические устройства (Piezoelectric Devices)* модуль *Механика твердого тела (Solid Mechanics)*, решая уравнение Навье, рассчитывает деформацию пьезоэлектрика. Одновременно с этим интерфейс *Электростатика (Electrostatics)* вычисляет при данных условиях распределение электрического поля, электрической индукции и электростатического потенциала по объему пьезоэлектрического материала. Возможен стационарный, а также расчеты во временной и частотной области [8, 9].

2.1. Выделение отдельных гармоник

Проблема моделирования переменного МЭ-эффекта в COMSOL состоит в том, что данный программный пакет не способен отфильтровывать отдельные гармоники и сразу рассчитывает суммарное МЭ-напряжение по формуле (8), делая невозможным расчет отдельных гармоник напряжения. В данной работе предложен способ, позволяющий обойти данное ограничение.

В основе данного способа лежит возможность программного пакета COMSOL Multiphysics составлять линейные комбинации из полученных ранее решений при помощи функции *join*. Кроме того, данная программа способна находить значения МЭ-напряжения в любой заданный момент времени (что обычно трудно сделать экспериментально). Следовательно, если осуществить расчет МЭ-напряжения в нескольких разных моментах времени t , а затем построить линейную комбинацию полученных решений, то удастся получить выражение, близкое по своему значению к амплитуде той или иной гармоники с определенной точностью. Основной задачей здесь является выбор нужного момента времени для расчета. Рассмотрим один из вариантов его решения.

Поскольку $\cos(0) = 1$, то в момент времени $t = 0$ МЭ-напряжение равняется сумме постоянной составляющей u_0 и амплитуд всех гармоник:

$$u(0) = \sum_{k=0}^{\infty} u_k \cos 0 = \sum_{k=0}^{\infty} u_k = u_0 + u_1 + u_2 + u_3 + u_4 + u_5 + \dots \quad (12)$$

В момент времени $t = 1/(2f)$ все аргументы косинусов в формуле (8) равны πk , следовательно, значения самих косинусов равны либо $+1$ (для четных k), либо

-1 (для нечетных k):

$$\begin{aligned} u\left(\frac{1}{2f}\right) &= \sum_{k=0}^{\infty} u_k \cos(\pi k) = \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k u_k = u_0 - u_1 + u_2 - u_3 + u_4 - u_5 + \dots \end{aligned} \quad (13)$$

Складывая (12) и (13), можно получить удвоенную сумму амплитуд четных гармоник, а вычитая (13) из (12) — удвоенную сумму нечетных.

$$\begin{aligned} u(0) + u\left(\frac{1}{2f}\right) &= \sum_{k=0}^{\infty} u_k + \\ &+ \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k u_k = 2 \sum_{k=0}^{\infty} u_{2k}, \end{aligned}$$

$$u(0) - u\left(\frac{1}{2f}\right) = \sum_{k=0}^{\infty} u_k - \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k u_k = 2 \sum_{k=0}^{\infty} u_{2k+1}.$$

Таким образом,

$$\frac{1}{2} \cdot \left(u(0) + u\left(\frac{1}{2f}\right) \right) = \sum_{k=0}^{\infty} u_{2k}, \quad (14)$$

$$\frac{1}{2} \cdot \left(u(0) - u\left(\frac{1}{2f}\right) \right) = \sum_{k=0}^{\infty} u_{2k+1}. \quad (15)$$

Для того, чтобы получить амплитуду первой гармоники, необходимо из суммы амплитуд всех нечетных гармоник (15) изъять один или несколько членов, следующих за u_1 . Чем больше членов удастся удалить, тем точнее будет результат. Для этих целей нам потребуется ряд, содержащий амплитуды только нечетных гармоник, но часть этих амплитуд должна входить в ряд с положительным коэффициентом, а часть — с отрицательным.

Чтобы получить искомый ряд, посмотрим, какие значения принимает выражение (8) в моменты времени $t = 1/(8f)$ и $t = 3/(8f)$.

$$\begin{aligned} u\left(\frac{1}{8f}\right) &= \sum_{k=0}^{\infty} u_k \cos\left(\frac{\pi k}{4}\right) = \\ &= u_0 + \frac{\sqrt{2}}{2} u_1 - \frac{\sqrt{2}}{2} u_3 - u_4 - \frac{\sqrt{2}}{2} u_5 + \frac{\sqrt{2}}{2} u_7 + u_8 + \dots = \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k u_{4k} + \frac{\sqrt{2}}{2} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k (u_{4k+1} - u_{4k+3}), \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned}
 u\left(\frac{3}{8f}\right) &= \sum_{k=0}^{\infty} u_k \cos\left(\frac{3\pi k}{4}\right) = \\
 &= u_0 - \frac{\sqrt{2}}{2}u_1 + \frac{\sqrt{2}}{2}u_3 - u_4 + \frac{\sqrt{2}}{2}u_5 - \frac{\sqrt{2}}{2}u_7 + u_8 + \dots = \\
 &= \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k u_{4k} - \frac{\sqrt{2}}{2} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k (u_{4k+1} - u_{4k+3}).
 \end{aligned}
 \tag{17}$$

Выражения (16) и (17) отличаются только знаком при амплитудах нечетных гармоник, следовательно, при вычитании (16) из (17) амплитуды четных гар-

моник взаимно компенсируются, а коэффициенты при амплитудах нечетных гармоник удвоятся. Поделив полученную разность на $\sqrt{2}$, получим:

$$\frac{\sqrt{2}}{2} \left(u\left(\frac{1}{8f}\right) - u\left(\frac{3}{8f}\right) \right) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k (u_{4k+1} - u_{4k+3})
 \tag{18}$$

В полученное выражение входят амплитуды только нечетных гармоник, при этом часть из них с коэффициентом -1 , в том числе и нужные нам u_3 и u_5 . Значит, сложив (18) и (15) и поделив полученную сумму на 2, можно получить выражение для первой гармоники:

$$\frac{1}{2} \left(\left(\frac{\sqrt{2}}{2} \left(u\left(\frac{1}{8f}\right) - u\left(\frac{3}{8f}\right) \right) \right) + \left(\frac{1}{2} \cdot \left(u(0) - u\left(\frac{1}{2f}\right) \right) \right) \right) \approx u_1
 \tag{19}$$

Разумеется, помимо амплитуды u_1 в формулу (19) входят амплитуды и других гармоник: u_7, u_9, u_{15}, u_{17} и т.д., но величина амплитуды седьмой и последующих гармоник, как правило, значительно меньше линейной амплитуды u_1 , поэтому этими членами в выражении (19) можно пренебречь.

Аналогичным способом можно получить из (8) и выражение для амплитуды третьей гармоники. Для этого потребуются значения МЭ-напряжения в моменты $t = 1/(6f)$ и $t = 1/(3f)$.

$$\begin{aligned}
 u\left(\frac{1}{6f}\right) &= \sum_{k=0}^{\infty} u_k \cos\left(\frac{\pi k}{3}\right) = u_0 + \frac{1}{2}u_1 - \frac{1}{2}u_2 - u_3 - \frac{1}{2}u_4 + \frac{1}{2}u_5 + u_6 + \frac{1}{2}u_7 - \dots = \\
 &= \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k u_{3k} + \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k (u_{3k+1} - u_{3k+2})
 \end{aligned}
 \tag{20}$$

$$\begin{aligned}
 u\left(\frac{1}{3f}\right) &= \sum_{k=0}^{\infty} u_k \cos\left(\frac{2\pi k}{3}\right) = u_0 - \frac{1}{2}u_1 - \frac{1}{2}u_2 + u_3 - \frac{1}{2}u_4 - \frac{1}{2}u_5 + u_6 - \frac{1}{2}u_7 - \dots = \\
 &= \sum_{k=0}^{\infty} u_{3k} - \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{\infty} (u_{3k+1} + u_{3k+2})
 \end{aligned}
 \tag{21}$$

Амплитуды четных гармоник входят в обе формулы с одинаковыми коэффициентами, следовательно, при вычитании (21) из (20) они взаимно компенсируются:

$$u\left(\frac{1}{6f}\right) - u\left(\frac{1}{3f}\right) = \sum_{k=0}^{\infty} (u_{6k+1} + u_{6k+5}) - 2 \sum_{k=0}^{\infty} u_{3 \cdot (2k+1)}$$

Полученное выражение содержит только амплитуды нечетных гармоник, при этом амплитуды тех гармоник, чей номер кратен 3, входят в сумму с коэффициентом -2 . Если вычесть его из суммы всех нечетных гармоник (15), то можно получить утроенную сумму амплитуд всех гармоник с нечетными номерами, кратными 3:

$$\frac{1}{2} \cdot \left(u(0) - u\left(\frac{1}{2f}\right) \right) - \left(u\left(\frac{1}{6f}\right) - u\left(\frac{1}{3f}\right) \right) = 3 \sum_{k=0}^{\infty} u_{3 \cdot (2k+1)}
 \tag{22}$$

Учитывая, что амплитуды девятой, 15-й и последующих гармоник существенно меньше u_3 , выражение для амплитуды третьей гармоники можно получить, просто поделив (22) на 3.

$$\frac{1}{3} \cdot \left(\frac{1}{2} \cdot \left(u(0) - u\left(\frac{1}{2f}\right) \right) - \left(u\left(\frac{1}{6f}\right) - u\left(\frac{1}{3f}\right) \right) \right) = \sum_{k=0}^{\infty} u_{3 \cdot (2k+1)} \approx u_3$$

Для получения комбинации амплитуд только четных гармоник, необходимо, чтобы значения косинусов при амплитудах нечетных гармоник были равны 0, то есть чтобы аргументы этих косинусов были кратны $\pi/2$. Легко видеть, что эти условия достигаются при $t = 1/(4f)$.

$$u\left(\frac{1}{4f}\right) = \sum_{k=0}^{\infty} u_k \cos\left(\frac{\pi k}{2}\right) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k u_{2k} = u_0 - u_2 + u_4 - u_6 + u_8 - \dots \quad (23)$$

Амплитуды гармоник с номерами, кратными 4, входят в сумму (23) с коэффициентом 1, а остальные — с коэффициентом -1 , следовательно, если получившееся выражение вычесть из (14), останутся только амплитуды гармоник с четными номерами, не делящимися на 4 (в том числе и u_2). Половина этой разности приблизительно равна амплитуде второй гармоники:

$$\frac{1}{2} \cdot \left(\frac{1}{2} \cdot \left(u(0) - u\left(\frac{1}{2f}\right)\right) - u\left(\frac{1}{4f}\right)\right) = \sum_{k=0}^{\infty} u_{4k+2} = u_2 + u_6 + u_{10} + u_{14} + u_{18} + \dots \approx u_2.$$

Следует отметить, что описанные здесь комбинации для получения различных гармоник являются не единственными возможными. Например, получить значение амплитуды третьей гармоники МЭ-эффекта можно, не прибегая к формуле (22), а воспользовавшись значениями выражения (8) в моменты времени $t = 1/(12f)$ и $t = 5/(12f)$

$$\begin{aligned} u\left(\frac{1}{12f}\right) &= \sum_{k=0}^{\infty} u_k \cos\left(\frac{\pi k}{6}\right) = u_0 + \frac{\sqrt{3}}{2}u_1 + \frac{1}{2}u_2 - \frac{1}{2}u_4 - \frac{\sqrt{3}}{2}u_5 - u_6 + \frac{\sqrt{3}}{2}u_7 - \dots = \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k u_{6k} + \frac{\sqrt{3}}{2} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k (u_{6k+1} - u_{6k+5}) + \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k (u_{6k+2} - u_{6k+4}), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} u\left(\frac{5}{12f}\right) &= \sum_{k=0}^{\infty} u_k \cos\left(\frac{5\pi k}{6}\right) = u_0 - \frac{\sqrt{3}}{2}u_1 + \frac{1}{2}u_2 - \frac{1}{2}u_4 + \frac{\sqrt{3}}{2}u_5 - u_6 - \frac{\sqrt{3}}{2}u_7 - \dots = \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k u_{6k} - \frac{\sqrt{3}}{2} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k (u_{6k+1} - u_{6k+5}) + \frac{1}{2} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k (u_{6k+2} - u_{6k+4}), \end{aligned}$$

$$u\left(\frac{1}{12f}\right) - u\left(\frac{5}{12f}\right) = \sqrt{3} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k (u_{6k+1} - u_{6k+5}),$$

$$\begin{aligned} \frac{\sqrt{3}}{3} \left(u\left(\frac{1}{12f}\right) - u\left(\frac{5}{12f}\right)\right) - \frac{\sqrt{2}}{2} \left(u\left(\frac{1}{8f}\right) - u\left(\frac{3}{8f}\right)\right) &= \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k (u_{12k+3} - u_{12k+9}) - \\ - 2 \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k (u_{24k+7} - u_{24k+17}) &= u_3 - 2u_7 - u_9 - u_{15} + 2u_{17} + \dots \approx u_3. \quad (24) \end{aligned}$$

Таким образом, алгоритм моделирования отдельных гармоник МЭ-эффекта в программном пакете COMSOL Multiphysics следующий. Сначала в моделируемом образце проводится параметрический расчет магнитоэлектрического напряжения при различных амплитудах h и подмагничивающих полях H в момент времени $t = 0$. Затем полученное решение сохраняется путем создания его копии в памяти программы. Это делается при помощи операции *Create Solution Copy*. Полученная копия получает наименование «0». Затем в параметрах модели значение времени заменяется на

$t = 1/(2f)$, после чего производится новый расчет, который сохраняется в памяти программы под названием « $t = 1/(2f)$ ». Аналогичные операции делаются и для других моментов времени.

Когда получены все необходимые решения, с помощью функции *join* составляются комбинации этих решений. Один вызов функции *join* позволяет создать комбинацию лишь двух решений, поэтому для получения амплитуд первой, второй и третьей гармоник функция *join* вызывается неоднократно. Например, для получения второй гармоники сначала составляет-

Таблица. Параметры материалов, используемые в модели

Материал	c_{11} , ГПа	c_{12} , ГПа	c_{13} , ГПа	c_{22} , ГПа	c_{23} , ГПа	c_{33} , ГПа	c_{44} , ГПа	c_{55} , ГПа	c_{66} , ГПа
GaN	344.8	133.4	93.9	344.8	93.9	379.6	89.6	89.6	123
AlN	392	141.6	105.5	392	105.5	372.2	112.5	112.5	112
Ga ₂ O ₃	354.77	165.45	142.2	316.08	150.21	302.61	82.75	61.75	102.61

Материал	ρ , кг/м ³	ϵ	e_{15} , мКл/м ²	e_{24} , мКл/м ²	e_{31} , мКл/м ²	e_{32} , мКл/м ²	e_{33} , мКл/м ²
GaN	6150	8.9	-300	-300	-360	-360	1000
AlN	3255	8.5	-480	-480	-580	-580	155
Ga ₂ O ₃	4800	10	595	194	11	-319	941

Материал	E , ГПа	ν	c_{11} , ГПа	c_{12} , ГПа	c_{44} , ГПа	H_k , Э	χ_0	λ_{sat} , 10 ⁻⁶	M_{sat} , кА/м
Ni	204	0.28	302.47	135.13	167.2	5	12	-36.5	510

ся комбинация решений «0» и « $t = 1/(2f)$ », соответствующая формуле (15), а затем уже эта комбинация с помощью новой функции *join* сочетается с решением « $t = 1/(4f)$ » в соответствии с выражением (23).

3. ПРИМЕР МОДЕЛИ МАГНИТОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО КОМПОЗИТА

Для иллюстрации приложенного в данной работе метод расчета отдельных гармоник МЭ-эффекта, в программном пакете COMSOL Multiphysics были созданы модели двухслойных МЭ структур на основе никеля (Ni), в которых в роли пьезоэлектрика выступали нитрид алюминия (AlN), нитрид галлия (GaN) и оксид галлия (Ga₂O₃). Все эти соединения являются широкозонными пьезополупроводниками и находят широкое применение в мощных СВЧ-устройствах. Создание МЭ-композитов на основе данных материалов позволило бы в перспективе разработать полупроводниковые СВЧ-устройства, управляемые магнитным полем. Именно поэтому создание моделей таких структур весьма актуально в настоящее время.

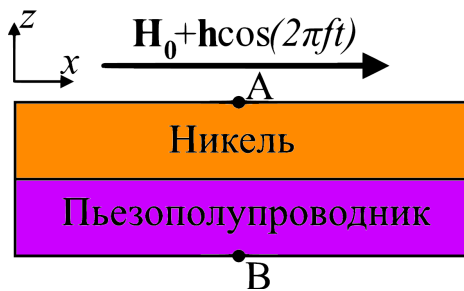


Рис. 1. Схематическое изображение исследуемого образца

Схематическое изображение моделируемой структуры приведены на рис. 1, а остальные параметры модели — в таблице. Толщины слоя Ni и пьезополупроводника были равны и составляли 2 мм. Длина струк-

туры вдоль оси X составляла 16 мм, а ширина 8 мм. В целях упрощения вычислений все расчеты производились для сечения в плоскости XZ. Разбиение структуры на конечные элементы производилось при помощи стандартной для программного пакета COMSOL операции *Physics-Controlled Mesh*, которая разделяет область расчета на треугольные элементы. Чтобы получить более гладкое распределение рассчитываемых величин, в контекстном меню *Element Size*, определяющем максимальный размер конечного элемента, был выбран пункт *Extra Fine*. При таких параметрах исследуемая модель разбивается на 1644 элемента.

При расчете предполагалось, что композит закреплен в точках A и B, а магнитное поле направлено вдоль оси X. При расчете значение H изменялось в диапазоне (0–1800) Э с шагом 2 Э, а h — в диапазоне (0–4) Э с шагом 1 Э, частота переменного магнитного поля составляла 8352 Гц, что близко к значению резонанса. В качестве измеряемого параметра использовалось максимальное значение напряжения внутри слоя пьезополупроводника.

Зависимости линейного МЭ-напряжения, которое представляет собой амплитуду первой гармоники u_1 , от напряженности внешнего магнитного поля H для каждого из трех образцов приведены на рис. 2, а. Видно, что напряжение сначала возрастало с ростом напряженности магнитного поля до некоторого максимального значения, при котором наблюдается максимальная 1-я производная магнитострикции от магнитного поля $\partial\lambda/\partial H$, а при дальнейшем росте поля монотонно уменьшалось, так как магнитострикция Ni в этой области магнитных полей достигала значения насыщения. Такая форма зависимости $u_1(H)$ является классической и неоднократно наблюдалась экспериментально [10], что говорит о том, что созданная модель действительно смогла выделить 1-ю гармонику МЭ-эффекта из суммарного МЭ-напряжения.

Зависимость линейного МЭ-напряжения от амплитуды переменного магнитного поля h представлена на рис. 2, б. Из рисунка видно, что данная зависимость

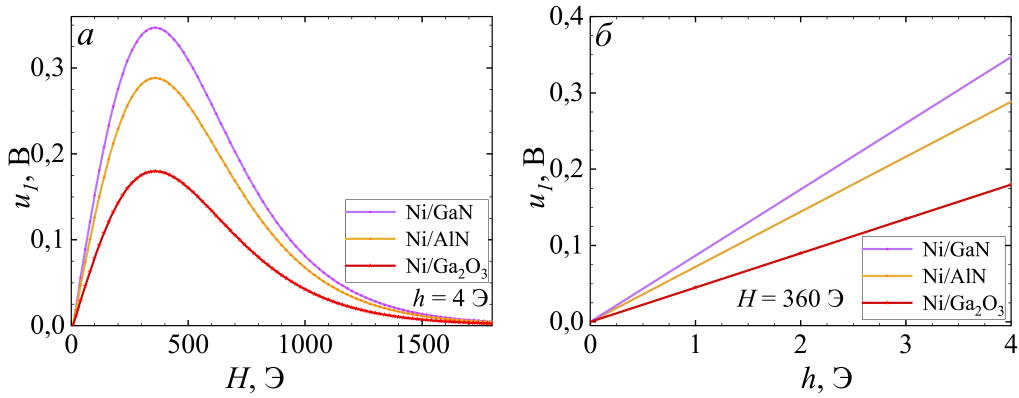


Рис. 2. Графики зависимостей линейного МЭ-напряжения u_1 от (а) напряженности постоянного магнитного поля H и (б) амплитуды переменного магнитного поля h

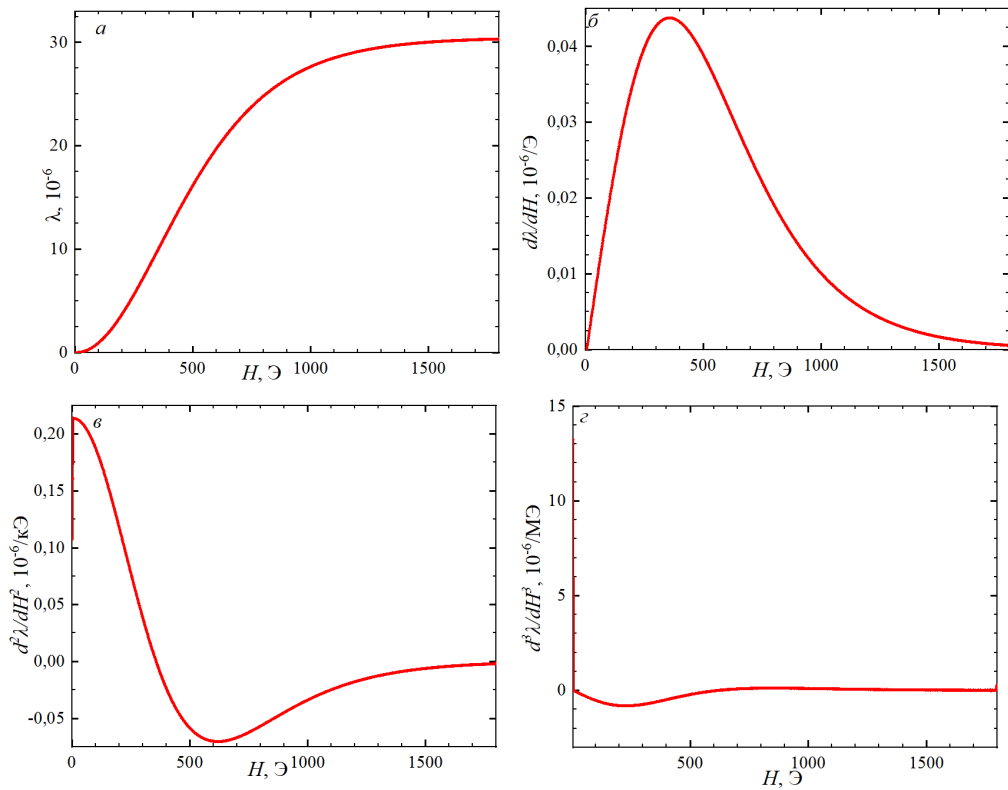


Рис. 3. Графики полевых зависимостей (а) магнитострикции и ее (б) первой, (в) второй и (г) третьей производных по магнитному полю H

носила линейный характер, что также соответствует экспериментальным данным. Из обоих графиков на рис. 2 видно, что при любых значениях H и h МЭ-напряжение в образце на основе GaN выше, чем у аналогов с другими пьезополупроводниками.

Чтобы лишний раз удостовериться в правильности работы модели, сравним график $u_1(H)$ с графиком первой производной магнитострикции Ni по напряженно-

сти H , представленный на рис. 3, б. Полевая зависимость магнитострикции была получена путем расчета в COMSOL, а ее производные вычислены на основании полученного графика с помощью программного пакета Origin 2018. Сравнение данных графиков показало, что они имеют идентичную форму, следовательно, первая гармоника МЭ-напряжения оказалась пропорциональной первой производной магнитострикции по

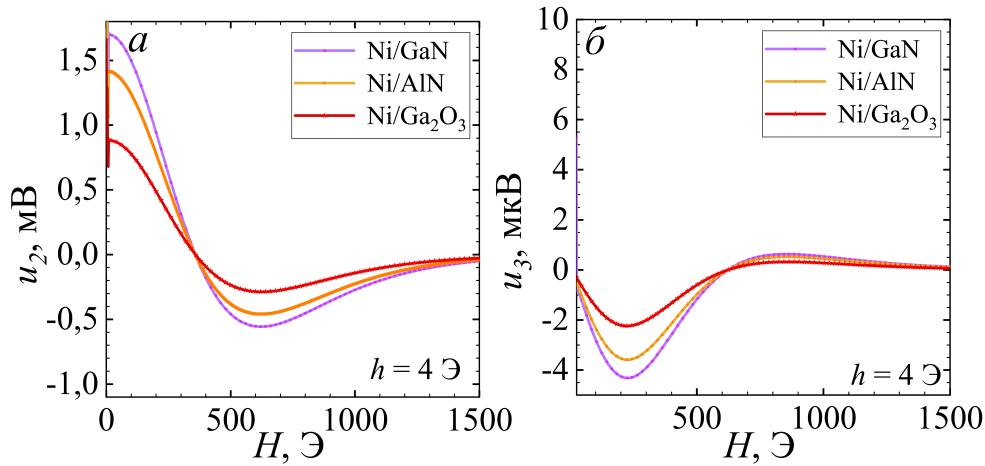


Рис. 4. Графики зависимостей амплитуды (а) второй и (б) третьей гармоники МЭ-напряжения от напряженности постоянного магнитного поля H

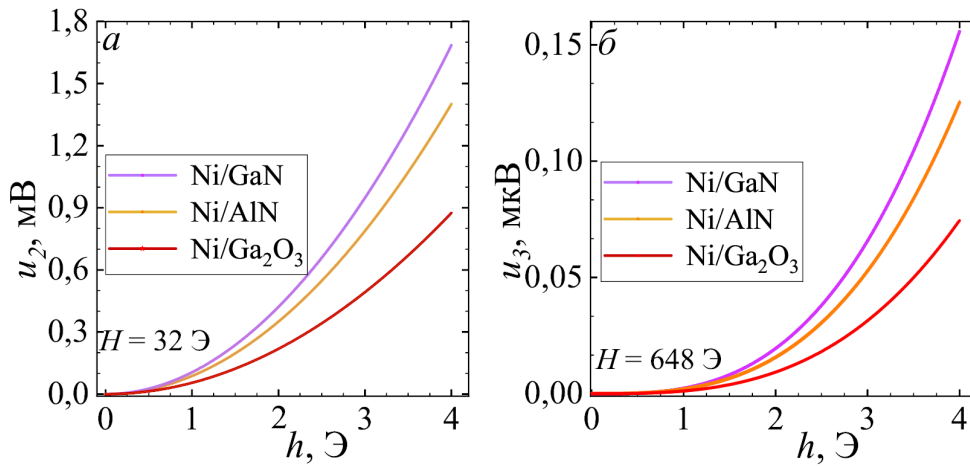


Рис. 5. Графики зависимостей амплитуды (а) второй и (б) третьей гармоники МЭ-напряжения от амплитуды переменного магнитного поля h

магнитному полю, что также находится в соответствии с имеющей на данный момент теорией [10].

На рис. 4,а приведена полевая зависимость амплитуды второй гармоники МЭ-сигнала $u_2(H)$, а на рис. 4,б — зависимость $u_3(H)$, полученная при помощи формулы (24). Графики обеих зависимостей совпали по форме с графиками второй и третьей производной магнитострикции по магнитному полю соответственно (см. рис. 3,б и в). Из этого следует, что u_2 и u_3 пропорциональны соответствующим производным магнитострикции по магнитному полю, следовательно, полученные в результате расчета значения u_2 и u_3 действительно являются амплитудами второй и третьей гармоник МЭ-напряжения [11, 12].

Зависимости u_2 и u_3 от амплитуды переменного магнитного поля h представлены на рис. 5,а и б соответственно. Из рисунков видно, что амплитуда второй

гармоники МЭ-напряжения была пропорциональна h^2 , а третьей — h^3 , что также подтвердилось экспериментально [11, 12].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе был представлен новый уникальный метод расчета, позволяющий при помощи программного пакета COMSOL Multiphysics рассчитывать поведение отдельных гармоник МЭ-напряжения. В основе метода лежало составление линейной композиции полученных в различные моменты времени решений дифференциальных уравнений, описывающих МЭ-эффект. Метод был применен для вычисления полевых и амплитудных характеристик МЭ-эффекта в композитных структурах на основе широкозонных пьезопо-

лупроводников AlN, GaN, Ga₂O₃ и магнитоэлектрического Ni. Форма полученных при расчете кривых качественно совпадала с полученными ранее экспериментальными результатами. Представленный метод дает возможность проводить моделирование и оценку линейного и нелинейного МЭ-взаимодействия в композитных структурах на основе различных ферромагнитных и пьезоэлектрических слоев, что позволяет оптимизировать разработку устройств электроники на ос-

нове подобных структур, среди которых сверхчувствительные датчики магнитных полей, компактные антенны низкочастотного диапазона, перестраиваемые индукторы и др.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 23-72-01053, <https://rscf.ru/project/23-72-01053/>).

-
- [1] Бичурин М.И., Петров В.М., Филиппов Д.А. и др. Магнитоэлектрические материалы. Академия естествознания. М., 2006.
- [2] Морозов А.И. Физика твердого тела. Электроны в кристалле. Металлы. Полупроводники. Диэлектрики. Магнетики. Сверхпроводники: Учебн. Пособие. МИРЭА. М., 2014.
- [3] Cho K.-H., Priya S. // APL. **98**, N 23. 232904 (2011).
- [4] Морозов А.И. Магнитоэлектроника: Учебн. Пособие. МИРЭА. М., 2011.
- [5] Боровик-Романов А.С. Лекции по низкотемпературному магнетизму. Магнитная симметрия антиферромагнетиков. ИФП им. П.Л. Капицы РАН. М., 2010.
- [6] Ворович Е.И., Золотых С.А., Коровина К.С., Туколова О.М. Ряды. Часть II. Учеб.-метод. пособие. ДГТУ. Ростов-на-Дону, 2016.
- [7] Мусатов В.И., Федулов Ф.А., Савельев Д.В. и др. // РТЖ. **11**, № 5. 63 (2023).
- [8] Лобекин В.Н., Снисаренко Д.В., Татаренко А.С. // Вестник НовГУ. № 4(110). 39 (2018).
- [9] Никитин А.О. // Вестник НовГУ. № 3(109). 27 (2018).
- [10] Fetisov L., Chashin D., Saveliev D. et al. // EPJ Web of Conferences. **185**. 07005 (2018).
- [11] Fetisov L.Y., Saveliev D.V., Fedulov F.A. et al. // J. of Communication Technology and Electronics. **68**, N 3. S299 (2023).
- [12] Фетисов Л.Ю., Савельев Д.В., Турутин А.В. и др. // Сборник трудов X Международной конференции «Актуальные проблемы физики твёрдого тела». 156 (2023).

Modeling of individual harmonics of the magnetoelectric effect using the COMSOL Multiphysics software package

M.V. Dzhaparidze^a, L.Y. Fetisov^b, F.A. Fedulov^c

Scientific and Educational Centre «Magnetoelectric Materials and Devices», MIREA — Russian Technological University
Moscow 119454, Russia

E-mail: ^adzhaparidze@mirea.ru, ^bfetisovl@yandex.ru, ^costsilograf@ya.ru

A new algorithm for calculating the magnetoelectric effect in the COMSOL Multiphysics software package is proposed. It was based on the compilation of a linear composition of solutions of differential equations obtained at various points in time describing the magnetoelectric effect. The advantage of the described method was the possibility of isolating individual components corresponding to different harmonics of the magnetoelectric signal from the general spectrum of the magnetoelectric voltage. During the work, this method was used to calculate the field and amplitude dependences of the amplitudes of the first three harmonics of the magnetoelectric effect in two-layer composite structures based on magnetostrictive nickel and various wide-band piezoelectric conductors (aluminum nitride, gallium nitride and gallium oxide). It is shown that the dependences obtained using the method described in the work do not contradict the data available today, therefore, this calculation method is suitable for modeling promising magnetoelectric systems and will be able to find wide application in the future.

PACS: 75.85.+t; 02.70.-c

Keywords: magnetoelectric effect, numeric modelling, COMSOL Multiphysics, nonlinear effect.

Received 09 June 2024.

Сведения об авторах

1. Джaparидзе Михаил Валерьевич — аспирант, стажер-исследователь; e-mail: dzhaparidze@mirea.ru.
2. Фетисов Леонид Юрьевич — доктор физ.-мат. наук, профессор; e-mail: fetisovl@yandex.ru.
3. Федулов Федор Александрович — канд. тех. наук, науч. сотрудник; e-mail: ostsilografi@ya.ru.