

УДК 537.636

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ВНЕШНЕГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА РОСТ КЛАСТЕРОВ В СПЛАВЕ МЕДЬ-ЖЕЛЕЗО В ПРОЦЕССЕ ТЕРМИЧЕСКОГО ОТЖИГА

© Наумова А.В., Синеглазов Д.С., Покоев А.В.

*Самарский национальный исследовательский университет
имени академика С.П. Королева, г. Самара, Российская Федерация*

e-mail: ang_naumova@mail.ru

Экспериментально установлено наличие магнитопластического эффекта (МПЭ), заключающегося в изменении механических свойств диамагнитного сплава при наложении магнитного поля в процессе искусственного старения. И хотя эффект экспериментально обнаружен для ряда диамагнитных металлических сплавов [1], до сих пор нет модели, хорошо его описывающей.

Для моделирования магнитных полей методом молекулярной динамики в программе Lammmps [2] авторами пакета были рассчитаны параметры для интеграла обменного взаимодействия ферромагнетиков [3]. Из этих расчетов и табличных данных о магнитных свойствах очевидно, что наибольший вклад имеет железо. Также во всех экспериментах с МПЭ присутствует незначительная (доли процента) добавка железа, в связи с чем интересно изучить влияние этой добавки в чистом диамагнетике, например, в хорошо изученной на МПЭ меди с чистотой от 99 до 99.999 вес. %.

В данной работе проведен численный эксперимент роста кластеров железа в меди при наложении температуры и внешнего магнитного поля методом молекулярной динамики с использованием пакета Lammmps. Рассчитаны значения коэффициентов диффузии, согласующиеся с результатами других авторов [4]. Получены диаграммы напряжения-деформации для одноосного растяжения, согласующиеся с экспериментальными данными. Показано отсутствие влияния магнитного поля на структуры с равномерным распределением атомов железа и меди и на скорость движения дислокаций в исследованных структурах. Для структур с сегрегированными на дислокациях кластерами железа установлен эффект разного взаимодействия дислокаций, зависящий от величины индукции магнитного поля. Показано, что данные взаимодействия приводят к разным дислокационным структурам. Полученные результаты, являющиеся некоторыми из возможных механизмов МПЭ, были аппроксимированы в виде феноменологических формул для качественного прогнозирования МПЭ.

Библиографический список

1. Pokoev A.V., Osinskaya J.V. Manifestation of Magnetoplastic Effect in Some Metallic Alloys // Defect and Diffusion Forum, Vol. 383 (2017). P. 180–184.
2. URL: <http://lammmps.sandia.gov>.
3. Tranchida J. [et al.]. Massively parallel symplectic algorithm for coupled magnetic spin dynamics and molecular dynamics // J. Comput. Phys, Vol. 372 (2018). P. 406–425.
4. Львов П.Е., Крестина Н.С. Моделирование роста кластеров в сплавах на основе системы железо-медь в процессе термического отжига // Известия Самарского научного центра Российской академии наук. Т. 14 (2012), № 4. С. 1136–142.