

Молекулярно-динамическое моделирование механической деформации сплавов системы медь-железо при наложении внешнего магнитного поля

© Синеглазов*⁺ Дмитрий Сергеевич, Покоев Александр Владимирович
и Пурыгин Пётр Петрович

Самарский университет. ул. Московское шоссе, 34. г. Самара, 443086. Россия.

E-mail: dima.cineglazov@yandex.ru

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: Lammps, внешнее магнитное поле, медь, железо, магнитоэластический эффект, молекулярная динамика.

Аннотация

Несмотря на то, что уже несколько десятилетий процессы искусственного старения при наложении внешнего магнитного поля тщательно изучаются многими исследователями, интерес к изучению данных процессов не ослабевает как у практиков так и у теоретиков, специалистов в области фазовых превращений. Экспериментально установлено влияние наложения слабого внешнего магнитного поля на процессы старения диамагнитных металлических сплавов, названное магнитоэластическим эффектом. Интерес к данной теме не угасает, во-первых, из-за отсутствия общей физической теории, объясняющей данные процессы и из-за сложности природы данного явления, во-вторых, из-за большого числа сплавов, в которых обнаружен магнитоэластический эффект. Однако, теоретической модели данного явления всё ещё нет. В связи с этим актуально моделирование процессов старения при наложении магнитного поля. Наиболее полно магнитоэластический эффект изучен в медных сплавах. Описаны используемые в работе метод молекулярной динамики, потенциалы межатомного взаимодействия, учёт магнитного поля как выражение для гамильтониана N взаимодействующих спинов на неподвижной решетке. В виду того, что в настоящее время при моделировании методами молекулярной динамики возможен учёт влияния магнитного поля лишь для ферромагнетиков, для моделирования была выбрана система медь-железо, которая характерна для большого числа экспериментально изученных сплавов. Проведён численный эксперимент деформации растяжением при наложении постоянного внешнего магнитного поля. Полученные результаты численного эксперимента показывают, что увеличение индукции прикладываемого магнитного поля приводит к уменьшению плотности дислокаций при соблюдении определённых условий.