

УДК 537.636

## МОДЕЛИРОВАНИЕ МАГНИТОПЛАСТИЧЕСКОГО ЭФФЕКТА В СПЛАВЕ Cu–Ni

© 2021 г. Д. С. Синеглазов<sup>a, \*</sup>, С. В. Дивинский<sup>a, b, \*\*</sup>, А. В. Покоев<sup>a, \*\*\*</sup>

<sup>a</sup>Самарский университет, Самара, 443086 Россия

<sup>b</sup>Университет Мюнстера, Мюнстер, 86692 Германия

\*e-mail: [dima.cineglazov@yandex.ru](mailto:dima.cineglazov@yandex.ru)

\*\*e-mail: [divin@uni-muenster.de](mailto:divin@uni-muenster.de)

\*\*\*e-mail: [a.v.pokoev46@mail.ru](mailto:a.v.pokoev46@mail.ru)

Поступила в редакцию 17.01.2021 г.

После доработки 03.03.2021 г.

Принята к публикации 07.03.2021 г.

Методом молекулярной динамики было выполнено численное моделирование процессов в металлических сплавах меди и никеля с целью уточнения механизмов магнитоэластического эффекта, экспериментально наблюдаемого в медных, титановых, алюминиевых и магниевых сплавах. Проведен численный эксперимент деформации растяжением для различных исходных структур в системе Cu–10% Ni при наложении внешнего магнитного поля. Получены результаты, показывающие, что наложение магнитного поля разной величины приводит к разному взаимодействию дислокаций между собой, при условии, что в дислокациях находятся атомы с отличной магнитной проницаемостью.

**Ключевые слова:** Lammps, внешнее магнитное поле, диамагнетика, дислокации, магнитоэластический эффект, молекулярная динамика, искусственное старение.

**DOI:** 10.31857/S1028096021100186

### ВВЕДЕНИЕ

Наложение слабого магнитного поля (МП) в процессе искусственного старения может приводить к изменению прочностных свойств диамагнитных сплавов. Данное явление было названо магнитоэластическим эффектом (МПЭ). На данный момент МПЭ был обнаружен в ряде диамагнитных металлов и сплавов на основе меди, алюминия, титана [1–5]. Те не менее, удовлетворительная модель МПЭ в диамагнитных металлах и сплавах пока отсутствует. В связи с этим в данной работе предлагается численный эксперимент для обнаружения возможных механизмов МПЭ.

### МЕТОДИКА

В работе исследовалась идеальная ГЦК-решетка с наложением периодических граничных условий и добавлением четырех симметричных винтовых дислокаций по краям кристалла и дислокационного кольца в центре (рис. 1). В частном случае число атомов равно 1728.

Для данной структуры рассматривались случаи: чистого никеля; чистой меди, Cu–10 ат. % Ni со случайным распределением никеля; Cu–10 ат. % Ni с никелем, сегрегированным на дислокациях;

Ni–10 ат. % Cu со случайным распределением никеля; Ni–10 ат. % Cu с медью, сегрегированной на дислокациях.

В программе Lammps [6, 7] методом молекулярной динамики был поставлен численный эксперимент на растяжение данной структуры при разных величинах индукции внешнего МП и при температуре равновесия энергии тепловых колебаний атомов и спинового обменного интеграла для никеля, равной ~700 К для выбранных потенциалов обменного взаимодействия.

Для расчетов использовался EAM-потенциал, разработанный для системы FeCuNi [8]. Взаимодействие спинов (атомов никеля) учитывалось согласно работе [6]. Так как исходный EAM-потенциал был оптимизирован для описания структуры никеля при температуре 0 К без учета спин-спин взаимодействий, вклад коллинеарных спинов был вычтен добавлением эффективного парного Ni–Ni-потенциала, который компенсирует спиновые взаимодействия в ферромагнитном состоянии. Показано, что когезионная энергия, энергия точечных и протяженных дефектов при  $T = 0$  К описывается правильно.

Выполнены предварительные расчеты коэффициента теплового расширения рассматриваемой

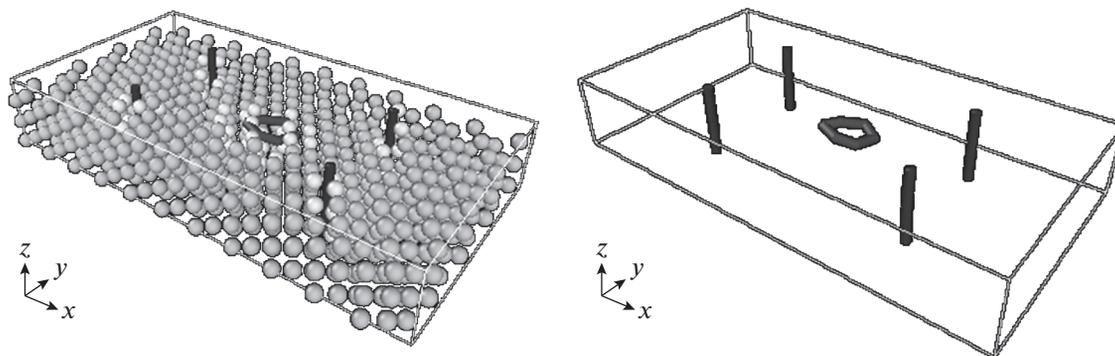


Рис. 1. Моделируемая структура: а – положение атомов, б – дислокационная структура.

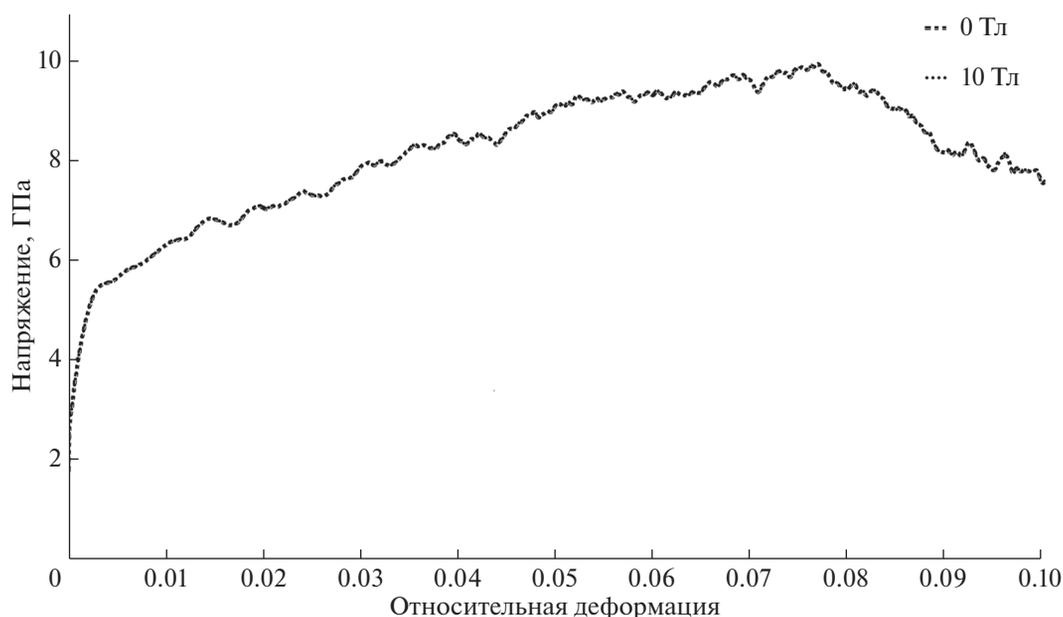


Рис. 2. Диаграмма деформирования чистого никеля.

мых материалов без учета и с полным учетом спинного взаимодействия. Показано, что учет взаимодействия спинов приводит к улучшенному соответствию результатов расчетов и эксперимента. Все эти предварительные расчеты были выполнены при отсутствии внешнего поля.

## РЕЗУЛЬТАТЫ

В результате анализа расчетов с учетом приложенного внешнего магнитного поля были получены следующие результаты. Наложение МП разной величины фактически не приводило к каким-либо изменениям структуры, дислокаций, скорости движения дислокаций, напряжений для чистого никеля, меди и сплавов Cu–Ni со случайным распределением добавки (рис. 2). Линии для

других значений поля не приведены, так как близки к данным значениям.

Для структур Cu с сегрегированной на дислокациях добавкой Ni и для структур Ni с сегрегированной добавкой Cu МП также не повлияло на скорость движения дислокаций. Но при этом изменились напряжения (рис. 3).

Изменение напряжений не коррелирует с величиной поля. Начало изменения напряжений связано с первыми взаимодействиями дислокаций между собой. При разной величине индукции внешнего МП это взаимодействие слегка отличается и после него изменяется дислокационная структура. Так, первое взаимодействие дислокаций для Cu–10 ат. % Ni с атомами Ni, сегрегированными в дислокациях, произошло при относительной деформации 0.034. А спустя какое-то время при относительной деформации, равной

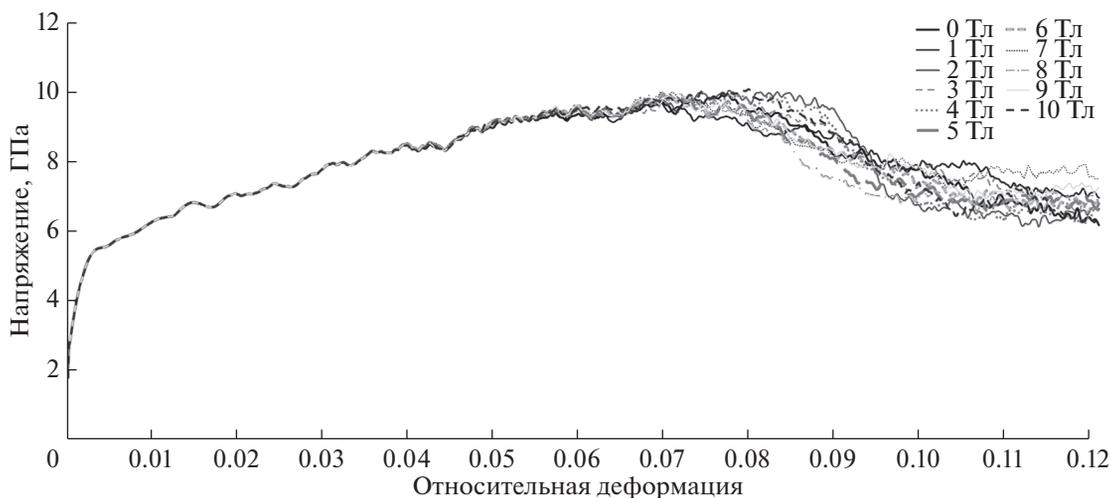


Рис. 3. Диаграмма деформирования никеля, сегрегированного в дислокациях.

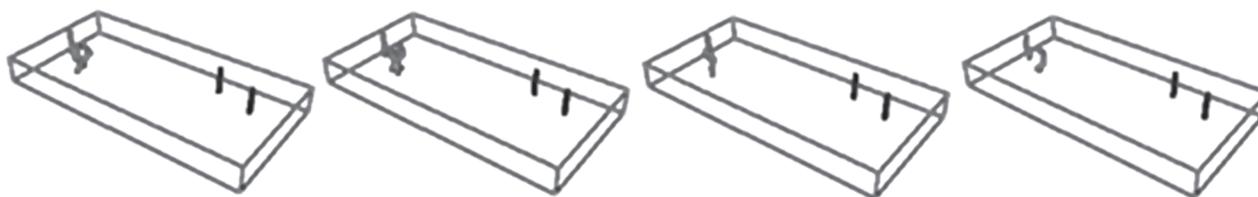


Рис. 4. Дислокационная структура при различных значениях индукции внешнего поля в Тл: а – 0, б – 1 в – 5, г – 10 Тл.

0.051, уже очевидно (рис. 4), что изменения дислокационной структуры напрямую зависят от величины индукции внешнего МП.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведен численный эксперимент на растяжение Cu–Ni разного состава во внешнем МП. Показано отсутствие влияния МП на структуры с равномерным распределением атомов и на скорость движения дислокаций в исследованных структурах. Для структур с отличной магнитной проницаемостью атомов, сегрегированных на дислокациях, установлен эффект разного взаимодействия дислокаций, зависящего от величины индукции МП. Показано, что данные взаимодействия приводят к разным дислокационным структурам. На основании всего вышесказанного логично заключить, что данный эффект многофакторный, и для его реализации должны соблюдаться ряд условий: наличие магниточувствительных атомов, элементная и дислокационная структура, величина МП, определенная температура.

Таким образом, данные работы могут быть полезны для определения одного из механизмов МПЭ с помощью сопоставления условий наблю-

дения эффекта в реальном и численном эксперименте.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Zagulyaev D.V., Konovalov S.V., Yaropolova N.G., Ivanov Y.F., Komissarova I.A., Gromov V.E. // J. Surface Investigation. X-Ray, Synchrotron and Neutron Techniques. 2015. № 2. P. 410. <https://doi.org/10.1134/S1027451015010188>
2. Осинская Ю.В., Покоев А.В. // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтрон. исслед. 2018. №. 2. С. 58. <https://doi.org/10.7868/S0207352818020026>
3. Сейдаметов С.В., Лоскутов С.В., Щетинина М.О. // Metallofiz. Noveishie Tekhnol. 2015. V. 37. № 5. P. 615.
4. Краев М.В. // Физика металлов и металловедение. 2016. Т. 117. № 5. С. 528.
5. Pokoev A.V., Osinskaya J.V. // Defect and Diffusion Forum. 2018. № 383. P. 180. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/DDF.383.180>
6. Tranchida J., Plimpton S., Thibaudeau P., Thompson A. // Journal of Computational Physics. 2018. № 372. P. 406. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2018.06.042>
7. URL: <http://lammps.sandia.gov/>.
8. Bonny G., Pasianot R., Castin N., Malerba L. // Philosophical Magazine. 2009. № 89. P. 3531. <https://doi.org/10.1080/14786430903299824>

9. *Andoh C.N., Gyeabour A., Banini G.* // J. Appl. Sci. Technol. 2017. № 22. P. 1.
10. *Daw M., Foiles S., Baskes M.* // Materials Science Reports. 1993. № 9. P. 251.
11. *Konovalov S., Zagulyaev D., Chen X.-Z., Gromov V., Ivanov Y.* // Chinese Physics B. 2017. № 26, P. 126203. <https://doi.org/10.1088/1674-1056/26/12/126203>
12. *Soika A.K., Sologub I.O., Shepelevich V.G., Sivtsova P.A.* // Phys. Solid. State. 2015. № 57. P. 1997.
13. *Pokoev A., Osinskaya J., Shakhbanova S., Yamtshikova K.* // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. 2018. № 82. P. 870. <https://doi.org/10.3103/S106287381807033X>
14. *Alshits V., Darinskaya E., Koldaeva M., Kotowski R., Petrzhik E., Tronczyk P.* // Polish Journal of Applied Sciences. 2016. № 2. P. 21.
15. *Davoudi K., Vlassak J.* // J. Applied Physics. 2014. № 116. P. 123. <https://doi.org/10.1063/1.5013213>

## Simulation Magnetoplastic in Cu–Ni Alloy

D. S. Sineglazov<sup>1,\*</sup>, S. V. Divinski<sup>1,2,\*\*</sup>, A. V. Pokoev<sup>1,\*\*\*</sup>

<sup>1</sup>*Samara University, Samara, 443086 Russia*

<sup>2</sup>*Institute of Materials Physics, University of Münster, Münster, 86692 Germany*

\**e-mail: dima.cineglazov@yandex.ru*

\*\**e-mail: divin@uni-muenster.de*

\*\*\**e-mail: a.v.pokoev46@mail.ru*

In this paper, we introduce a numerical study of the magnetoplastic effect. Molecular dynamics simulation of deformation processes in Cu–Ni metal alloys are performed, in order to clarify the mechanisms of magnetoplastic effect, which has experimentally been observed in copper, titanium, aluminum and magnesium alloys. A numerical experiment with tensile deformation of various initial structures under external magnetic field is carried out. It is shown that the application of a constant magnetic field does not lead to any changes in the structure and velocity of dislocations. However, the obtained results substantiate that the application of a constant magnetic field of different magnitudes influences dislocation interactions provided that the dislocation structures contain atoms with different magnetic moments.

**Keywords:** Lammmps, external magnetic field, diamagnets, dislocations, magnetoplastic effect, molecular dynamics, artificial aging.