

基于 LMTO 算法磁记忆屈服信号的量化分析*

刘斌, 曹阳, 王迪, 何璐瑶, 杨理践

(沈阳工业大学信息科学与工程学院 沈阳 110870)

摘要:磁记忆法对铁磁性金属构件的应力集中区域具有很好检测效果。但是,目前构件在弹性阶段和塑性阶段的磁记忆信号特征很难被区分,从而无法对构件的应力集中程度和使用寿命进行有效评估。基于固体电子理论建立了磁记忆效应的边界滑移模型,利用线性化 M-T 轨道算法(LMTO)计算了固体在弹性、塑性阶段,系统的能量变化、不同轨道电子的自旋态密度的变化情况,进而定量分析了构件发生屈服后的磁记忆信号变化规律。研究表明,应力集中程度与系统边界滑移能量呈线性正比例关系,与电子自旋态密度峰值、磁记忆信号呈线性反比例关系;构件发生塑性形变后,体系能量和电子自旋发生不可逆的变化,磁记忆信号曲线出现转折点;构件每发生一次塑性变形,磁记忆信号初始值都会变小,曲线斜率变小。

关键词:磁记忆;屈服;滑移;应力集中;铁磁性

中图分类号: TH878⁺.3 文献标识码: A 国家标准学科分类代码: 430.25

Quantitative analysis of the magnetic memory yielding signal characteristics based on the LMTO algorithm

Liu Bin, Cao Yang, Wang Di, He Luyao, Yang Lijian

(School of Information Science and Engineering, Shenyang University of Technology, Shenyang 110870, China)

Abstract: The magnetic memory method can effectively determine the stress concentration areas of ferromagnetic metal components. However, at present, the magnetic memory signals in the elastic stage and plastic stage of the components are hard to be distinguished, and the stress concentration degree and service life of the components cannot be evaluated effectively. In this paper, the boundary slip model of the magnetic memory effect is built based on the theory of solid-state electronics, and the linear muffin-tin orbital (LMTO) algorithm is used to calculate the variations of the system energy of the solid and the spin density of states of the electrons at different orbits in the elastic stage and plastic stage. Then, the changing rules of the magnetic memory signals of the components after yielding are quantitatively analyzed. The research results show that the stress concentration degree is in direct linear proportional relationship with the system boundary slip energy and in the inverse linear proportional relationship with the peak to peak value of the electron spin density of states and the magnetic memory signals. After the plastic deformation of the components, the system energy and electronic spin are changed irreversibly, and a turning point appears in the magnetic memory signal curve. The initial value of the magnetic memory signal is getting less and the slope of the curve is getting lower after every plastic deformation of the component.

Keywords: magnetic memory; yield; slip; stress concentration; ferromagnetism

1 引言

铁磁性金属构件长期在反复载荷作用下工作,往往局部会产生应力集中,这些应力集中区域有些已经达到临界屈服点或者已经发生塑性变形,这些区域给构件的

安全使用造成重大隐患^[1]。磁记忆法作为快捷的无损检测技术,通过检测地磁场环境下铁磁性构件的天然磁化信息,可以有效地对应力集中区域进行检测,且磁记忆检测设备具有体积小、质量轻、便于携带以及非接触等优点,所以磁记忆检测技术引起国内外专家广泛关注^[2-3]。然而,经典牛顿力学定理以及麦克斯韦方程没有明确的

力磁耦合关系,现有磁记忆模型包括应力磁畴磁化模型、磁偶极子模型等,但只能解释部分磁记忆现象,因此构件在弹性、塑性阶段的磁记忆信号特征无法区分,对应力集中程度难以量化分析,这严重影响了磁记忆法在构件使用寿命评估方面的应用^[4-5]。

本文利用固体电子理论建立了磁记忆效应的边界滑移模型,利用线性化 M-T 轨道 (linear muffin-tin orbital, LMTO) 算法,计算了系统在弹性、塑性阶段,体系的能量变化、不同轨道电子的自旋态密度的变化情况,进而定量分析了构件发生屈服后的磁记忆信号变化规律。

2 磁力学模型

实际工程应用的铁磁性材料内部含有多种掺杂元素,来改善构件的物理、化学性质。由于掺杂原子与晶格原子大小不同,所以晶体内部组织结构不完整,存在大量的热缺陷^[6]。当晶体处于弹性阶段时,铁磁性材料内部热缺陷在晶粒边界均匀分布,晶粒边界滑移对电子自旋运动的影响可以忽略^[7-8],所以撤销外力后,电子密度分布恢复到平衡状态,即,系统磁力学特性可以恢复;当晶体发生屈服后,热缺陷大量增加,并逐渐形成高密度的边

界滑移,材料开始发生塑性变形,电子自旋运动发生不可逆的变化,电子密度分布不可恢复,系统磁性特性发生改变^[9-10]。

根据固体能带理论^[11-12],晶体内部能量可以表示为:

$$E = T + U + E_{xc} \quad (1)$$

式中: T 为动能, U 为库伦能, E_{xc} 为交换关联能,包含了所有粒子之间相互作用。

在单电子近似条件下^[13],系统内部的电子动能 T 和电子势能 U 是 $\rho(\vec{r})$ 的唯一泛函^[14],则:

$$T = \sum_i \int d^3r \phi_i^*(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \phi_i(\mathbf{r}) \quad (2)$$

$$U = \frac{1}{2} \int d^3r d^3r' \rho(\mathbf{r}) \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \rho(\mathbf{r}') \quad (3)$$

式中: $\phi_i(\mathbf{r})$ 为基态电子波函数, $\rho_{xc}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ 表示交换关联空穴函数, \mathbf{r} 为电子坐标。

假设粒子之间的相互影响都并入交换关联能量 E_{xc} 中,系统内动能和势能不包含粒子之间的相互作用,则:

$$E_{xc}[\rho(\mathbf{r})] = \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{\rho(\mathbf{r})\rho_{xc}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \quad (4)$$

$$\int d\mathbf{r}' \rho_{xc}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -1 \quad (5)$$

系统能量泛函 $E[\rho(\mathbf{r})]$ 对电子密度分布函数变分可以得到单电子态下能量泛函的最佳形式,如式(6)。

$$\frac{\delta \left\{ \sum_i \int d^3r \phi_i^*(\mathbf{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \phi_i(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \int d^3r d^3r' \rho(\mathbf{r}) \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \rho(\mathbf{r}') + \iint d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{\rho(\mathbf{r})\rho_{xc}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right\}}{\delta \rho(\vec{r})} = 0 \quad (6)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) \right] \phi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \phi_i(\mathbf{r}) \quad (7)$$

式中: ε_i 为拉格朗日乘子, $V_{\text{eff}}(\mathbf{r})$ 为有效势,由晶格周期式 $V(\mathbf{r})$ 、库伦势 $V_c(\mathbf{r})$ 和交换关联势 $V_{xc}(\mathbf{r})$ 组成,即:

$$V_{\text{eff}} = V(\mathbf{r}) + \int d^3r' \rho(\mathbf{r}') \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + \frac{\delta E_{xc}[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{r})} \quad (8)$$

式中:基态密度函数 $\rho(\mathbf{r})$ 可由基态电子波函数 $\phi_i(\mathbf{r})$ 组成。当固体受到外力作用时,通过求解式(7)中的基态电子波函数 $\phi_i(\mathbf{r})$,可得到电子密度分布函数 $\rho(\mathbf{r})$ 的具体形式,进而研究铁磁性材料在外力场作用下的磁力学特性。

3 算法

3.1 经典算法

对于复杂的多粒子体系,构造电子基态波函数的经典算法是将基态电子波函数 $\phi_i(\mathbf{r})$ 用平面波的形式展开^[15],电子在周期性势场中运动,其波函数可表示为:

$$\phi_i(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N\Omega}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \sum_i a(\mathbf{K}_i) e^{i\mathbf{K}_i\cdot\mathbf{r}} \quad (9)$$

式中: $1/\sqrt{N\Omega}$ 为归一化因子, Ω 为晶体中基本单位, \mathbf{K} 为

倒格矢, k 为波矢, $a(\mathbf{K}_i)$ 为展开系数,将式(9)代入式(7)中得:

$$\frac{1}{\sqrt{N\Omega}} \sum_i \left[\frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} + \mathbf{K}_i) - E(\mathbf{k}) + \sum_m V(\mathbf{K}_m) e^{i\mathbf{K}_m\cdot\mathbf{r}} \right] a(\mathbf{K}_i) e^{i(\mathbf{k} + \mathbf{K}_i)\cdot\mathbf{r}} = 0 \quad (10)$$

对式(10)左乘 $1/\sqrt{N\Omega} e^{-i(\mathbf{k} + \mathbf{K}_i)\cdot\mathbf{r}}$,再对整个空间积分,可得到关于 $a(\mathbf{K}_i)$ 的线性方程组为:

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} + \mathbf{K}_i) - E(\mathbf{k}) \right] \delta_{\mathbf{K}_i} a(\mathbf{K}_i) + \sum_{i \neq j} V(\mathbf{K}_j - \mathbf{K}_i) a(\mathbf{K}_i) = 0 \quad (11)$$

线性方程组(11)求解过程属于自治运算,由给定的电子分布函数 $\rho(\mathbf{r})$ 确定系统能量 $E(\mathbf{k})$,进而确定新的电子分布函数 $\rho(\mathbf{r})'$ 。但在实际计算中,晶体处于塑性阶段,热缺陷形成边界滑移带,波函数震荡较快,系统能量较大,导致平面波收敛较慢,计算困难。

3.2 线性化 M-T 轨道算法

为简化求解过程,LMTO 算法以一个原胞中电子为基础构造合理的基函数,电子波函数可用此基函数展开^[16]。

设原胞内的周期性势场具有球对称性,则可将基函

数取为:

$$\chi_L(E, \mathbf{k}, \mathbf{r}) = i^l Y_{lm}(\hat{r}) \begin{cases} \psi_l(E, \mathbf{r}) + kJ_l(\mathbf{kr}) \cot\eta_l, & r \leq s \\ kN_l(\mathbf{kr}), & r \geq s \end{cases} \quad (12)$$

式中: \hat{r} 表示电子坐标 \mathbf{r} 的角度, s 为原胞半径; $Y_{lm}(\hat{r})$ 表示球谐函数, $N_l(\mathbf{kr})$ 为球诺依曼函数, $\cot\eta_l$ 为积分常数, $\psi_l(E, \mathbf{r})$ 表示分波波函数。

令波矢 \mathbf{k} 固定, 假设最合适的分波能量导数为 $\dot{\psi}_l(E, \mathbf{r})$, 则式(12)可写为:

$$\dot{\chi}_L(E, \mathbf{k}, \mathbf{r}) = \dot{\psi}_l(E, \mathbf{r}) + kJ_l(\mathbf{kr}) \dot{\cot}\eta_l(E) \quad r \leq s \quad (13)$$

对 $\dot{\psi}_l(E, \mathbf{r})$ 进行归一化处理, 将归一化后的函数设为 $\phi_l(E, \mathbf{r})$, 则:

$$\phi_l(E, \mathbf{r}) = \langle \dot{\psi}_l^2(E, \mathbf{r}) \rangle^{-\frac{1}{2}} \dot{\psi}_l(E, \mathbf{r}) \quad (14)$$

$$\langle \dot{\psi}_l^2(E, \mathbf{r}) \rangle = \int_0^s d\mathbf{r} \dot{\psi}_l^2(E, \mathbf{r}) r^2 \quad (15)$$

若将每个本征能量 E 取定值 E_ν , 则:

$$\begin{cases} \phi_\nu(\mathbf{r}) \equiv \phi_l(E_\nu, \mathbf{r}) \\ \dot{\phi}_\nu(\mathbf{r}) \equiv \frac{\partial \phi_l(E, \mathbf{r})}{\partial E} \Big|_{E=E_\nu} \end{cases} \quad (16)$$

对式(16)进行径向对数求导, 得:

$$\begin{cases} D_\nu = s \frac{\phi'_\nu(s)}{\phi_\nu(s)} = s \frac{\dot{\psi}'_\nu(s)}{\dot{\psi}_\nu(s)} \\ D_\nu = s \frac{\dot{\phi}'_\nu(s)}{\dot{\phi}_\nu(s)} \end{cases} \quad (17)$$

式中: “ $'$ ”表示对 r 求微商, 这里任意一个 $\dot{\phi}_\nu$ 和 ϕ_ν 的线性组合函数都具有正交性, 将 $\dot{\phi}_\nu$ 和 ϕ_ν 作线性组合有:

$$\Phi(D, \mathbf{r}) = \phi_\nu + w(D) \dot{\phi}_\nu \quad (18)$$

$$w(D) = -\frac{\phi_\nu D - D_\nu}{\dot{\phi}_\nu D - D_\nu} \quad (19)$$

根据式(18)和(19), 可将式(17)改写为:

$$\Phi(D) = \phi_\nu \frac{D_\nu - D}{D - D_\nu} \quad (20)$$

根据式(14)和(18)可求得分波能量导数 $\dot{\psi}_l(E, \mathbf{r})$ 为:

$$\begin{aligned} \dot{\psi}_l(E, \mathbf{r}) &= \dot{\psi}_l(E_\nu, \mathbf{r}) = \langle \dot{\psi}_\nu^2 \rangle^{\frac{1}{2}} \phi_l(E_\nu, \mathbf{r}) + \\ &\langle \dot{\psi}_\nu^2 \rangle^{\frac{1}{2}} \dot{\phi}_l(E_\nu, \mathbf{r}) = \langle \dot{\psi}_\nu^2 \rangle^{\frac{1}{2}} \Phi[D(\dot{\psi}_l), \mathbf{r}] \end{aligned} \quad (21)$$

将式(21)代入式(13)中, 且在定值 E_ν 的近似下, 可得到与能量无关的基函数为:

$$\chi_L(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = i^l Y_{lm}(\hat{r}) \begin{cases} \frac{kJ_l(ks)}{\Phi_l[D(J_l), s]} \Phi_l[D(J_l), \mathbf{r}], & r \leq s \\ kN_l(\mathbf{kr}), & r \geq s \end{cases} \quad (22)$$

则电子波函数可用基函数 $\chi_L(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ 构成为:

$$\phi_l(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = \sum_l^i c_l(\mathbf{k}) \chi_L(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \quad (23)$$

式中: $c_l(\mathbf{k})$ 为展开系数。

LMTO 算法构造了一个与能量无关的基函数, 将晶体发生塑性形变过程中复杂的能量变化均归结到基函数 $\chi_L(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ 中, 极大地减小了计算量, 使得铁磁性材料在塑性形变过程中的磁力学关系计算成为可能。

4 计算步骤及结果分析

4.1 模型建立

实际工程应用中, X70 钢的试件成分组成中, Fe 原子成分占 97% 以上, 铁磁性金属构件掺杂少量的 C、Mn、Si 等元素, 掺杂元素对材料有一定影响^[17], 导致材料内部存在少量的热缺陷^[18-19]。然而, 在铁磁性金属构件发生边界滑移后, 少量的掺杂原子对材料性能的影响可以忽略不计, 为研究构件在屈服后的磁力学特性, 本文利用 CASTEP 软件, 建立了无掺杂的边界滑移结构的铁晶体力磁耦合模型, 采用 3 个基矢方向分别进行扩展得到 $3 \times 3 \times 12$ 超原胞结构, 如图 1 所示。

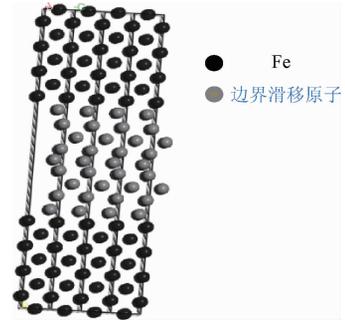


图 1 力磁耦合模型

Fig. 1 Force magnetic coupling model

综合考虑计算精度及计算资源后, 在仿真计算过程中, 布里渊区采样点取 $24 \times 24 \times 24$, 平面波截止能取 500 eV^[20], 为保证计算精度, 原子结合能的设定在 0.01 eV 内, 并采用广义梯度近似 (generalized gradient approximation, GGA) 来处理电子之间的交换关联能^[21-22]。

4.2 系统能量计算

在外力场作用下, 晶体内热缺陷数量随外力作用程度的增加逐渐增多, 局部热缺陷集中逐渐以高密度的边界滑移形式存在, 在不同受力阶段, 系统能量的变化情况如图 2 所示。

在图 2 中, 平衡态、弹性阶段以及塑性阶段的平面波截止能在 500 eV 之内均能满足收敛, 证明模型的平面波截止能取值准确。由图 2 可见, 在平衡状态下, 系统能量

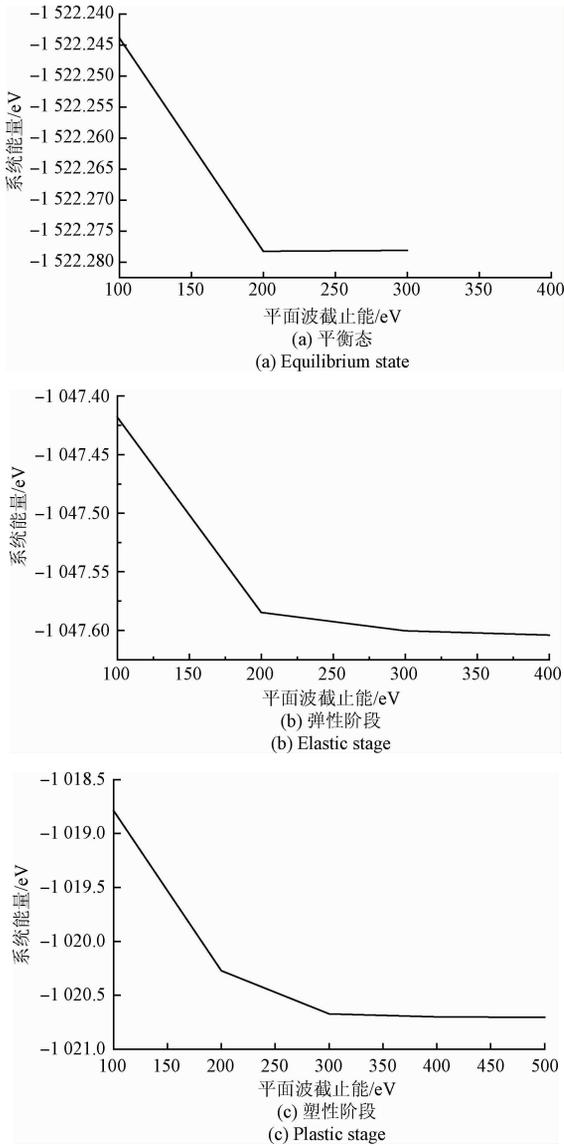


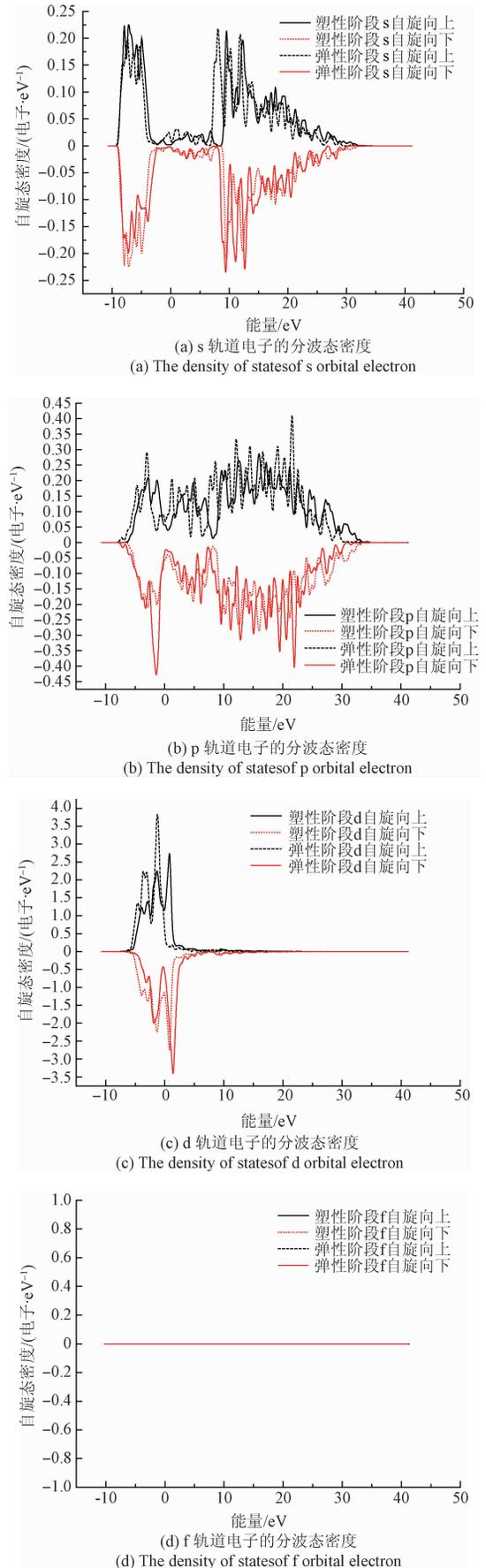
图2 力磁耦合系统能量计算

Fig.2 The energy calculation for force magnetic coupling system

随电子平面波函数截止能的增加而逐步收敛,截止能为200 eV时,系统能量趋于稳定;在弹性阶段,系统能量初始值减小,截止能为200 eV时,系统能量趋于稳定;在塑性阶段,系统能量初始值进一步减小,截止能为300 eV时,只能在弹性形变和塑性形变过程中,系统能量均随压能量趋于稳定。由此可见,外力场作用使得系统能量初值减小,系统磁特性减弱;晶体发生屈服后,系统能量收敛出现过渡区,收敛速度变慢,说明电子密度分布和电子自旋运动发生不可逆变化。

4.3 电子自旋态密度计算

应力集中在晶体弹性阶段及塑性阶段下的不同轨道电子分波态密度曲线如图3所示。



(d) The density of states of f orbital electron

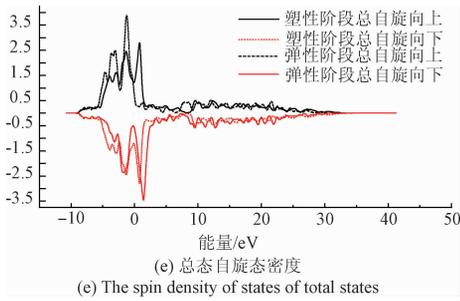


图3 弹性形变及塑性阶段自旋态密度分布

Fig.3 The spin density distribution of states in elastic deformation and plastic stages

由图3可见,晶体受力在弹性范围内,f轨道电子对体系磁性没有贡献,s、p轨道电子的分波态密度曲线峰峰值较小,d轨道电子的分波态密度与体系总自旋态密度最为相似,且态密度曲线的自旋向上态与自旋向下态在费米能级附近劈裂状态显著,说明d轨道电子对体系磁性贡献最大,晶体在弹性形变范围内,体现出较强的磁性。在塑性阶段,f轨道电子对体系磁性仍然没有贡献。当晶体发生屈服变形后,s、p、d轨道电子自旋态密度峰值减小,并且自旋向上和自旋向下态密度曲线对称性增强,说明体系磁性减弱,磁力学关系敏感度降低。

4.4 磁力学关系计算

对图1所示模型反复施加载荷,第1次从0 MPa 加压到20 MPa,第2次及第3次均从0 MPa 加压到15 MPa,计算得到体系的总自旋态密度峰峰值随应力的变化关系如图4所示。

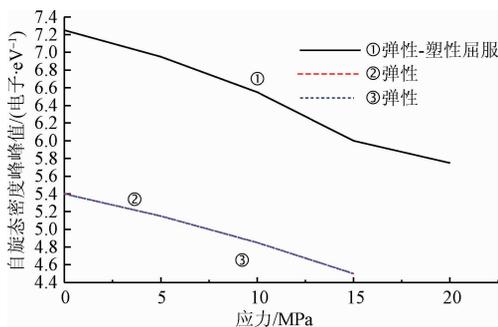


图4 不同压力下总自旋态密度曲线峰峰值

Fig.4 Peak to peak value of the total spin density curve of states under different pressures

由图4可以看出,第1次加压过程中,曲线①在15 MPa左右处曲线斜率突然发生变化,说明此时晶体发生屈服^[23];第2次及第3次加载过程中,曲线②及曲线③随压力增加均呈线性减小的趋势,但其初始值远远小于曲线①,说明晶体发生屈服后,热缺陷集中并形成边界

滑移,电子自旋运动发生不可逆变化,系统磁性减弱。根据 Stoner 定理^[24],自旋态密度与磁记忆信号有如下关系:

$$B = B_0 + B_1 = \mu_0(H + M) \tag{24}$$

式中: B_0 表示外部磁场的磁感应强度, B_1 表示材料的磁感应强度, μ_0 表示真空磁导率, H 表示外部磁场强度, M 表示磁化强度,具体为:

$$M = \mu_B(\phi_{i+} - \phi_{i-}) \tag{25}$$

式中: μ_B 表示原子磁矩, ϕ_{i+} 为自旋向上态密度, ϕ_{i-} 为自旋向下态密度。

由式(24)及(25)可知,磁记忆信号与自旋态密度具有一一对应的线性变化规律,通过自旋态密度曲线的变化,可预测构件发生屈服后的磁记忆信号的变化特征。

5 实验分析

5.1 实验方法及步骤

为了验证理论研究结果,本文设计了钢板拉伸试验,试验钢板材质为 X70 型钢,钢板长 325 mm,宽 50 mm,壁厚为 6 mm;利用 SHT-4106 微机电控拉伸机对实验钢板进行拉伸。在钢板中部位置上安装应变片和磁记忆探头,用以监测构件在拉伸过程中构件的应力-应变情况及磁记忆信号的变化特征,拉伸过程中利用高精度磁通门传感器对磁记忆信号进行采集,利用自主研发的软件对采集信号计算转换得到磁记忆信号,采集精度可达 nT 级,实验装置如图5所示。

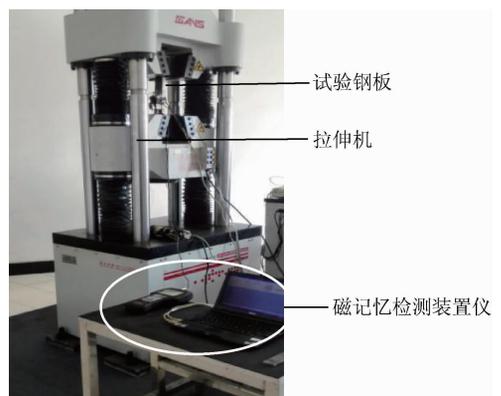


图5 实验装置

Fig.5 The experiment device

5.2 实验结果及分析

对钢板进行反复拉伸3次,第1次拉伸至试件出现屈服后,将压力卸载到0 MPa;第2次及第3次均在试件的弹性范围内进行拉伸,测得3次拉伸过程中试件的应力-应变曲线的分布情况如图6所示。

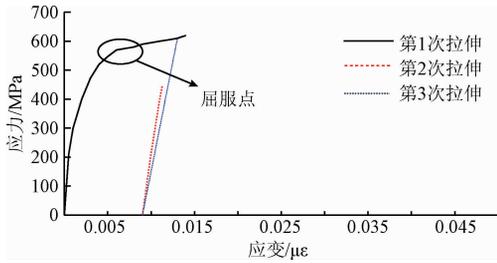


图6 三次拉伸过程中的应力-应变曲线

Fig. 6 Stress-strain curves in three stretching process

由图6可知,3次拉伸过程中,随拉力的增大,3条应力-应变曲线整体均呈线性变化的趋势;第1次拉伸过程中,应变约为 $0.005 \mu\epsilon$ 时,构件出现屈服,然后继续拉伸至应变为 $0.009 \mu\epsilon$ 时,停止拉伸并泄压。第2次及第3次弹性拉伸过程中,应力应变曲线体现出良好的重复性。

3次拉伸过程中磁记忆信号曲线随应力的变化规律如图7所示。

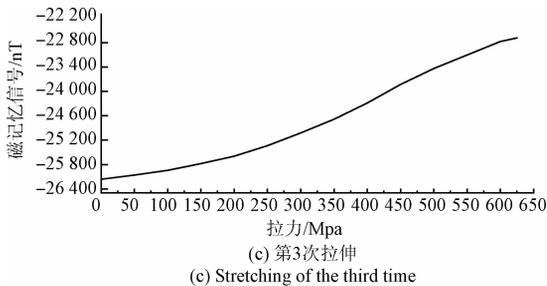
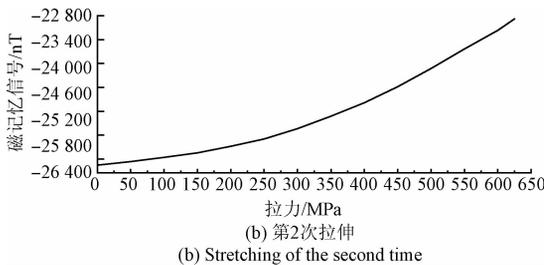
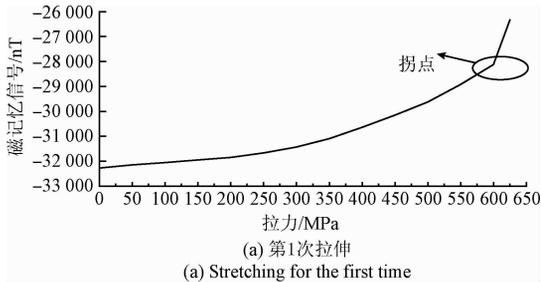


图7 三次拉伸过程中磁记忆信号变化情况

Fig. 7 The changes of the magnetic memory signals in three stretching process

由图7可见,磁记忆信号与应力成一一对应的线性变化关系;试件达到屈服时,晶体中热曲线发生边界滑

移,磁记忆信号出现转折点;试件发生屈服后,电子自旋和电子分布出现不可逆变化,系统磁性减弱,磁力学特性减弱,磁记忆信号初始值明显减小,且曲线斜率变小,由此可有效判断试件是否发生过屈服形变。本次试验用相同性质的五根试样进行了相同试验,对比每次试验中屈服点处的磁记忆信号值并计算误差,计算误差在5%以内,具有很好的重复性。本文随机选取一组数据进行分析。各组试验的误差分析表如表1所示,实验结果与理论计算具有很好的一致性。

表1 各组实验屈服点处磁记忆信号对比表

Table 1 The comparison of the magnetic memory signals at the yielding points in each group of experiments

实验序号	屈服点/MPa	磁记忆信号/nT
1	632	-30 530
2	640	-32 658
3	638	-30 687
4	605	-29 865
5	630	-31 094
平均值	629	-30 966.8
最大误差/%	4	5

6 结 论

铁磁晶体在外力作用下,晶体中热缺陷呈现出非均匀分布,晶体局部形成边界滑移带。虽然在边界滑移区域,系统应力能增加,但是边界滑移导致电子自旋运动的动能减小,系统磁性特性减小。在铁磁构件发生屈服时,边界滑移造成电子态密度分布发生不可逆变化,磁记忆信号出现转折点,当外力消除后,磁力学特性停留在构件屈服瞬间;构件在发生屈服变形后继续使用,磁记忆信号曲线斜率变小,没发生一次屈服,磁记忆信号的初始值就会减小一次,当由此可以很好地判断构件在使用过程中是否发生过屈服。

参考文献

- [1] GORKUNOV E S. Different remanence states and their resistance to external effects. Discussing the so-called magnetic memory method [J]. Russian Journal of Nondestructive Testing, 2015, 50(11): 617-633.
- [2] HUANG H, QIAN Z, YANG C, et al. Magnetic memory signals of ferromagnetic weldment induced by dynamic bending load[J]. Nondestructive Testing and Evaluation, 2017, 32(2): 166-184.
- [3] 于敏, 蔡瑞宾, 张春雨, 等. 基于金属磁记忆的局部屈服诊断新方法研究[J]. 热加工工艺, 2014,

- 43(14): 87-89.
- YU M, GOU R B, ZHANG CH Y, et al. Research on new test method for local yield based on metal magnetic memory[J]. Hot Working Technology, 2014, 43(14): 87-89.
- [4] 权大赫, 丁红胜, 金光秀. 弹塑性变形阶段力磁效应的有限元模拟[J]. 测试技术学报, 2015, 29(3): 200-207.
- QUAN D H, DING H SH, JIN G X. Finite element simulation of magneto-mechanical effect in elastic-plastic deformation phases[J]. Journal of Test and Measurement Technology, 2015, 29(3): 200-207.
- [5] 杨理践, 余文莱, 高松巍, 等. 管道漏磁检测缺陷识别技术[J]. 沈阳工业大学学报, 2010, 32(1): 65-69.
- YANG L J, YU W L, GAO S W, et al. Defect identification technology for pipeline leakage detection[J]. Journal of Shenyang University of Technology, 2010, 32(1): 65-69.
- [6] AFSHAR M, DOOST H. Magnetic properties of cobalt single layer added on graphene: A density functional theory study [J]. Modern Physics Letters B, 2015, 29(2): 1450262.
- [7] 钱正春, 黄海涛, 姜石林, 等. 铁磁性材料拉/压疲劳磁记忆信号研究[J]. 电子测量与仪器学报, 2016, 30(4): 506-517.
- QIAN ZH CH, HUANG H H, JIANG SH L, et al. Research on magnetic memory signal of ferromagnetic material under tensile and compressive fatigue loading[J]. Journal of Electronic Measurement and Instrumentation, 2016, 30(4): 506-517.
- [8] 郭国明, 丁红胜, 谭恒, 等. 铁磁性材料的力磁效应机理探讨与实验研究[J]. 测试技术学报, 2012, 26(5): 369-376.
- GUO G M, DING H SH, TAN H, et al. Research on mechanism and experiment about stress-magnetism effect for ferromagnetic materials [J]. Journal of Test Measurement Technology, 2012, 26(5): 369-376.
- [9] YANG L J, LIU B, CHEN L J, et al. The quantitative interpretation by measurement using the magnetic memory method (MMM)-based on density functional theory[J]. NDT&E International, 2013, 55(3): 15-20.
- [10] 杨理践, 郭天昊, 高松巍, 等. 油气管道特殊部件的漏磁检测信号特征分析[J]. 沈阳工业大学学报, 2017, 39(1): 43-47.
- YANG L J, GUO T H, GAO S W, et al. Feature analysis on magnetic flux leakage detection signal for special parts of oil and gas pipeline [J]. Journal of Shenyang University of Technology, 2017, 39(1): 43-47.
- [11] VITOS L, NILSSON J O, JOHANSSON B. Alloying effects on the stacking fault energy in austenitic stainless steels from first-principles theory [J]. Acta Materialia, 2006, 54(14): 3821-3826.
- [12] 刘斌, 张威, 杨茗涵, 等. 基于第一性原理的力磁耦合模型研究[J]. 仪器仪表学报, 2014, 35(3): 76-78.
- LIU B, ZHANG W, YANG M H, et al. Study on the force-magnetic coupling model based on first-principle[J]. Chinese Journal of Scientific Instrument, 2014, 35(3): 76-78.
- [13] KOHN W. Density functional theory for systems of very many atoms [J]. International Journal of Quantum Chemistry, 1995, 56(4): 229-232.
- [14] ZHANG H Y, WANG H Y, WANG C, et al. First-principles calculations of generalized stacking fault energy in Mg alloys with Sn, Pb and Sn + Pb dopings [J]. Materials Science & Engineering A, 2013, 584(11): 82-87.
- [15] SOULAIROL R, FU C C, BARRETEAU C. Structure and magnetism of bulk Fe and Cr: From plane waves to LCAO methods[J]. Journal of Physics Condensed Matter, 2010, 22(29): 5626-5628.
- [16] BOUDIA K, AMERI M, AL-DOURI Y, et al. Investigations of structural, elastic, electronic and thermodynamic properties of lutetium filled skutterudite LuFe₄P₁₂ under pressure effect: FP-LMTO method[J]. Materials Science-Poland, 2015, 33(4): 867-878.
- [17] 刘斌, 何璐瑶, 霍晓莉, 等. 基于 K_p 微扰算法的磁场中 MMM 信号特征的研究[J]. 仪器仪表学报, 2017, 38(1): 151-158.
- LIU B, HE L Y, HUO X L, et al. study on the MMM signal characteristics in magnetic field based on kp perturbation algorithm[J]. Chinese Journal of Scientific Instrument, 2017, 38(1): 151-158.
- [18] 李桂荣, 王宏明, 李沛思, 等. 磁致塑性效应下的位错动力学机制 [J]. 物理学报, 2015, 64(14): 148102-1-148102-10.
- LI G R, WANG H M, LI P S, et al. Mechanism of dislocation kinetics under magneto plastic effect [J]. Acta Physica Sinica, 2015, 64(14): 148102-1-148102-10.
- [19] LIAO M, LI B, HORSTEMEYER M F. Unstable dissociation of a prismatic dislocation in magnesium[J]. Scripta Materialia, 2013, 69(3): 246-249.
- [20] 刘斌, 付英, 于慧, 等. 基于 GGA 算法磁记忆检测模型的研究 [J]. 仪器仪表学报, 2014, 35(10):

2200-2207.

LIU B, FU Y, YU H, et al. Study on magnetic memory testing model based on GGA algorithm [J]. Chinese Journal of Scientific Instrument, 2014, 35 (10): 2200-2207.

- [21] 刘斌, 曹阳, 付英, 等. 基于 NCPP 平面波算法磁记忆信号特征研究[J]. 仪器仪表学报, 2015, 36(7): 1538-1545.

LIU B, CAO Y, FU Y, et al. Study on magnetic memory signal characteristics based on NCPP plane wave algorithm[J]. Chinese Journal of Scientific Instrument, 2015, 36(7): 1538-1545.

- [22] 杨理践, 王国庆, 高松巍, 等. 基于 OPWP 算法力磁耦合磁记忆信号特征研究[J]. 仪器仪表学报, 2016, 37(7): 1588-1595.

YANG L J, WANG G Q, GAO S W, et al. Study on the force magnetic coupling magnetic memory signal characteristics based on OPWP algorithm [J]. Chinese Journal of Scientific Instrument, 2016, 37 (7): 1588-1595.

- [23] 刘斌, 曹阳, 王国庆. 基于 LAPW 算法磁记忆信号相变特性的研究[J]. 仪器仪表学报, 2016, 37(8): 1825-1832.

LIU B, CAO Y, WANG G Q. Study on the characteristics of magnetic memory signal of phase transition point based on the LAPW algorithm[J]. Chinese

Journal of Scientific Instrument, 2016, 37 (8): 1825-1832.

- [24] SANCHEZ J, FULLEA J, ANDRADE C, et al. Hydrogen in-iron: stress and diffusion [J]. Physical Review B Condensed Matter, 2011, 78(1):113-131.

作者简介



刘斌, 分别在 2004 年、2007 年和 2013 年于沈阳工业大学获得学士学位、硕士学位和博士学位, 现为沈阳工业大学副教授, 主要研究方向为油气长输管道应力内检测技术及相关理论、无损检测技术等。

E-mail: syuotwenwu@sina.com

Liu Bin received his B. Sc., M. Sc. and Ph. D. degrees all from Shenyang University of Technology in 2004, 2007 and 2013, respectively. Now he is an associate professor in Shenyang University of Technology. His main research interest covers in-detection technology of long distance oil and gas pipeline and related theory, nondestructive testing technology.



曹阳, 2014 年于渤海大学获得学士学位, 现为沈阳工业大学硕士研究生, 主要研究方向为材料力学、材料表征检测。

E-mail: momocao529@sina.com

Cao Yang received her B. Sc. from Bohai University in 2014. Now she is a master student in Shenyang University of Technology. Her main research interest covers mechanics of materials and material characteristic detection.