

Наименование научного мероприятия

Молекулярная динамика процесса формирования пористой структуры в кристаллическом никелиде титана

Никифоров Георгий Андреевич

Булат Наилевич Галимзянов, доцент кафедры вычислительной физики, канд. физ.-мат. наук

Казанский (Приволжский) федеральный университет
Россия, 420008, г. Казань, ул. Кремлёвская, д. 18
E-mail: GeANikiforov@stud.kpfu.ru

Пористый никелид титана $Ni_{50}Ti_{50}$ является наиболее известным и перспективным функциональным материалом для многих применений благодаря своим уникальным механическим свойствам, отличной коррозионной стойкости и биосовместимости [1, 2]. Эти свойства во многом определяются спецификой пористой структуры: наличием в системе просачивающихся сетей пор или изолированных пор, а также размерами и геометрией пор. Одним из значительных достижений является синтез металлических пен на основе никеля и титана с микронными или наноразмерными порами, низкой плотностью в сочетании с высокой прочностью, большой площадью поверхности и открытой пористостью.

Несмотря на успехи, достигнутые в разработке технологий получения пористых металлических сплавов, производство пористого никелида титана значительно сложнее, в первую очередь, из-за высокой температуры плавления. Более того, результаты моделирования пористой структуры иногда не удается корректно сопоставить с данными эксперимента из-за существенного различия в линейных размерах пор: на эксперименте поры миллиметрового размера, в то время как моделирование позволяет получать поры размером порядка ста нанометров.

В настоящем исследовании мы представляем метод генерации пористой структуры для классической молекулярной динамики, позволяющий задавать параметры пор, сопоставимые с параметрами пористых экспериментальных образцов. Предложен критерий масштабирования пористой структуры, позволяющий корректно сопоставлять результаты моделирования с экспериментальными данными для образцов с различной степенью пористости. Входными параметрами в предложенном методе являются координаты атомов модельной системы, экспериментальные значения среднего линейного размера пор и требуемое значение пористости. Рисунок 1 показывает мгновенный снимок пористого никелида титана при температуре 300 К, сгенерированного предложенным методом.

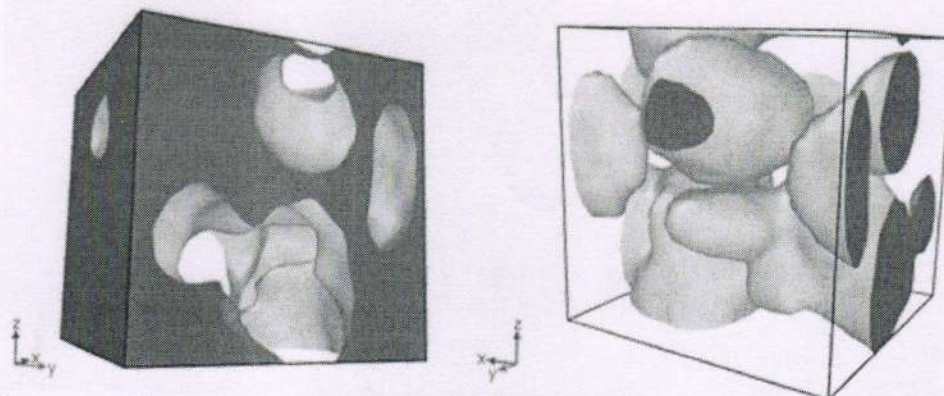



Рис. 1. Мгновенный снимок конфигурации пористой системы $Ni_{50}Ti_{50}$ (слева пористая матрица, справа - поры) с линейными размерами порядка 8.7 нм с пористостью 40% и размерами пор в пределах 2.1-5.7 нм.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект №19-12-00022).

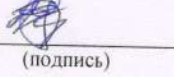
Список литературы:

1. Taheri A. M., Saedi S., Turabi A.S. et al., Mechanical and shape memory properties of porous alloys manufactured by selective laser melting, *J. Mech. Behav. Biomed. Mater.*, V. 68, 224, 2017
2. Zhou M., Shen L., Lin X. et al., Design and pharmaceutical applications of porous particles, *RSC Adv.*, V. 7, 39490–39501, 2017

Научный руководитель: _____

 / Галкин Б.И. /
(подпись) (ФИО)

Конкурсант: _____

 / Никифоров Т.А. /
(подпись) (ФИО)

Дата: 29.03.2022