

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

**ПЕРСПЕКТИВНЫЕ МАТЕРИАЛЫ
КОНСТРУКЦИОННОГО И ФУНКЦИОНАЛЬНОГО
НАЗНАЧЕНИЯ**

Сборник научных трудов
Международной научно-технической
молодежной конференции

17–21 октября 2022 г.

Томск 2022

УДК 620.22(063)

ББК 30.3л0

П27

Перспективные материалы конструкционного и функционального назначения : сборник научных трудов Международной научно-технической молодежной конференции / под ред. С.П. Буяковой ; Томский политехнический университет. – Томск : Изд-во Томского политехнического университета, 2022. – 391 с.

ISBN 978-5-4387-1111-7

Международная научно-техническая молодежная конференция «Перспективные материалы конструкционного и функционального назначения» посвящена вопросам разработки передовых материалов, к которым относятся композиционные материалы, умные материалы, покрытия, тонкие пленки и др. Использование таких материалов в современном производстве позволит получать изделия с принципиально новыми эксплуатационными характеристиками. Результаты исследований, представленные в сборнике, охватывают полный жизненный цикл перспективных материалов от подготовки исходных компонентов, условий формирования уникальных свойств характеристик до тестирования в условиях, близких к эксплуатационным. Традиционно на конференции «Перспективные материалы конструкционного и функционального назначения» представлены результаты научных изысканий в области материалов медицинского назначения.

Материалы сборника трудов представляют интерес как для студентов, так и для молодых ученых, занимающихся проблемами материаловедения, разработкой технологий получения изделий из новых перспективных материалов.

УДК 620.22(063)

ББК 30.3л0

Редакционная коллегия

С.П. Буякова, доктор технических наук, профессор ТПУ;

Б.С. Зенин, кандидат физико-математических наук, доцент ТПУ;

И.Э. Васильева, старший преподаватель ТПУ;

Е.А. Даренская, кандидат технических наук, доцент ТПУ.

Редакционная коллегия предупреждает, что за содержание представленной информации ответственность несут авторы докладов

ISBN 978-5-4387-1111-7

© ФГАОУ ВО НИ ТПУ, 2022

Рассчитанные цветовые координаты $m\text{-Y}_2\text{O}_3:\text{Eu}^{3+}$ после отжига при 750 °С имеют значения (0.66, 0.33), что гораздо ближе к эталонному красному цвету (0.67, 0.33) по сравнению с $c\text{-Y}_2\text{O}_3:\text{Eu}^{3+}$ (0.64, 0.34). Таким образом, цветовые координаты, высокая чистота цвета (> 96 %) и высокий абсолютный квантовый выход ФЛ указывают на возможность использования полученного нанолюминофора в многочисленных люминесцентных приложениях.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 22-73-00106

Список литературы

1. Jadhav, J.P., Pawar, A.U., Pal U., et. al. Red emitting $\text{Y}_2\text{O}_3:\text{Eu}^{3+}$ nanophosphors with >80% down conversion efficiency // J. Mater. Chem. C. – 2014. – V. 2. – P. 496.
2. Kostyukov, A.I., Snytnikov, V.N., Snytnikov et. al. Luminescence of monoclinic $\text{Y}_2\text{O}_3:\text{Eu}$ nanophosphor produced via laser vaporization // Opt. Mater. – 2020. – V. 104. – P. 109843.
3. Nashivochnikov, A.A., Kostyukov, A.I., Zhuzhgov, A.V., et. al. Shaping the photoluminescence spectrum of $\text{ZrO}_2:\text{Eu}^{3+}$ phosphor in dependence on the Eu concentration // Opt. Mater. – 2021. – V. 121. – P. 111620.

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ПОРИСТОГО НИТИНОЛА ПРИ РАСТЯЖЕНИИ

Г.А. НИКИФОРОВ¹, Б.Н. ГАЛИМЗЯНОВ¹, А.В. МОКШИН¹

¹Казанский (Приволжский) Федеральный Университет

E-mail: nikiforov121998@mail.ru

Сегодня активно набирают популярность умные материалы за счет своих уникальных физических свойств [1]. Большой интерес представляют материалы с эффектом памяти формы – способности под действием температуры восстанавливать форму после пластической деформации. Материалом с наиболее выдающейся способностью к эффекту памяти формы является интерметаллид никелид титана $\text{Ni}_{50}\text{Ti}_{50}$, также известный как нитинол. Вследствие этого нитинол нашел широкое применение во многих областях человеческой деятельности. Он используется в качестве актуаторов как в микроэлектромеханических системах [2]. Также благодаря сверхупругости нитинол применяется и в аэрокосмической промышленности [3]. Кроме того, нитинол обладает высокой коррозионной стойкостью и биоинертностью, поэтому находит широкое применение как материал для изготовления имплантов [4]. Особым интересом обладают материалы на основе пористого нитинола, т.к. они обладают большей удельной площадью поверхности и могут насыщены лекарственными препаратами [5]. Известно, что пористость имплантов позволяет организму лучше принимать материал за счет проникновения живых тканей в пространство пор [6]. Однако пористые материалы обладают более низкими значениями механических характеристик. Для решения этой задачи мы воспользовались методом моделирования молекулярной динамики, т.к. он позволяет получать структуры, которые на данный момент крайне сложно получить экспериментально или технологии получения таких структур еще не найдены

Для получения моделей пористого нитинола мы разработали оригинальную программу для создания моделей пористых материалов с заданными параметрами: размерами пор и показателем пористости. Принцип работы заключается в получении пористых структур по средством удаления атомов из сплошной кристаллической основы. Место генерации каждой поры выбирается случайным образом, что приводит к их перекрыванию с последующим

образованием перколяции модели. Форма каждой поры аппроксимируется эллипсоидом. Параметры эллипсоида выбираются случайным образом из области возможных значений, которая задается пользователем заранее. Значение пористости системы также определяется пользователем.

С помощью разработанной программы получили три модели пористого нитинола со значением пористости $\phi = 70\%$. Полученные модели приводили в состояние термодинамического равновесия с помощью метода моделирования молекулярной динамики при температуре 300 К и давлении 1 атм в течение 100 пс. Использовали потенциал межчастичного взаимодействия MEAM [7]. При достижении равновесия пористость стала $\phi = 53 \pm 1\%$. После этого полученные модели растянули со скоростью $\dot{\epsilon} = 10^{10} \text{ с}^{-1}$ до полного разрушения. Для анализа структуры полученных пористых моделей и ее изменении в ходе деформации нами разработана программа по вычислительной томографии объемных пористых и однородных материалов, позволяющая вычислять профиль плотности при деформации. Профиль плотности полученных моделей сильно неоднородный с ярко выраженными локальными минимумами и максимумами. В ходе анализа профиля плотности при растяжении было обнаружено, что в области локального минимума начинается образование шейки при деформации $\epsilon = 5\%$, что сопровождается изменением морфологии пористой системы. В следствие этого разрыв происходит в области глобального минимума профиля плотности.

Для улучшения механических свойств мы модернизировали изначальную программу для создания моделей пористых материалов с заданными параметрами, добавив возможность получать пористые модели с более однородным профилем плотности (рисунок 1 а) при одинаковых параметрах пор и пористости системы. Модели с однородным распределением кристаллической матрицы сохраняют морфологию пористой структуры до деформации $\epsilon = 15\%$, что видно из сохранения характера профиля плотности (рисунок 1 б). Также было отмечено, что предельная деформация возросла до двух раз по сравнению с системами со случайным распределением кристаллической матрицы. Из полученных результатов можно сделать вывод о большей устойчивости структур с равномерным распределением кристаллической матрицы относительно систем с ее случайным распределением.

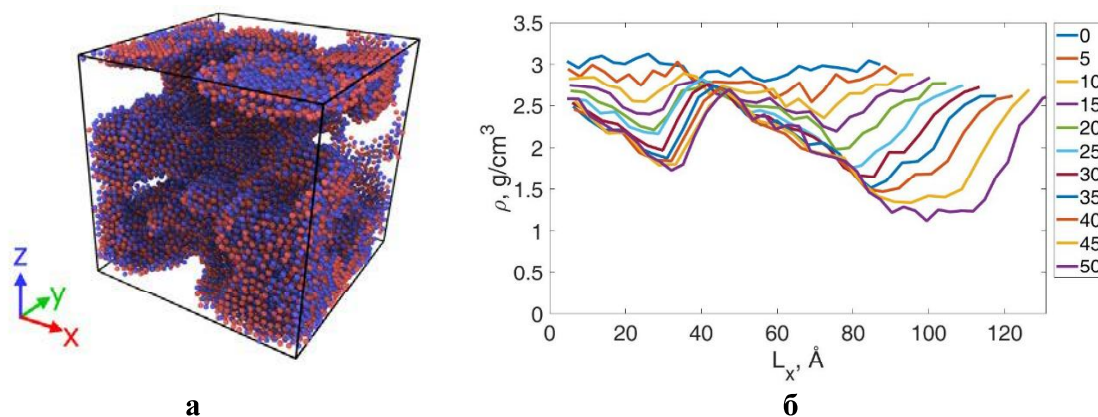


Рисунок 1 – а) Мгновенный снимок конфигурации кубической пористой системы размером 13.2 нм, пористостью 53 % и линейными размерами пор 2.1-5.7 нм;
б) график профиля плотности при растяжении пористого образца нитинола с равномерным распределением кристаллической матрицы

Работа выполнена при поддержке РНФ (проект №19-12-00022-П). Мокишин А.В. выражает признательность Фонду развития теоретической физики и математики «Базис» (№ 20-1-2-38-1).