

Механические свойства пористого никелида титана с различным пространственным распределением пор при одноосном растяжении

© Г.А. Никифоров, Б.Н. Галимзянов, А.В. Мокшин

Казанский (Приволжский) федеральный университет,
420008 Казань, Россия
e-mail: nikiforov121998@mail.ru

Поступило в Редакцию 19 мая 2023 г.

В окончательной редакции 16 июня 2023 г.

Принято к публикации 30 октября 2023 г.

Построена модель нанопористого никелида титана, где распределение толщины межпоровых переемычек качественно подобно аналогичному распределению в экспериментально полученных образцах миллиметрового размера. Показано, что предел прочности пористых образцов с равномерным профилем плотности твердой матрицы приблизительно 1.5 раза больше, чем у образцов с неравномерным профилем, а модуль Юнга больше приблизительно в 1.3 раза.

Ключевые слова: пористый никелид титана, механические свойства, морфология пористой структуры.

DOI: 10.61011/JTF.2023.12.56808.f217-23

Введение

Интерметаллид никелид титана $\text{Ni}_{50}\text{Ti}_{50}$ обладает такими уникальными свойствами, как эффект памяти формы, сверхупругость и биосовместимость [1,2]. При этом пористый никелид титана активно применяется для изготовления имплантов [3]. Уникальные функциональные свойства никелида титана обусловлены фазовым переходом первого рода, называемым мартенситным превращением [4]. Мартенситное превращение реализуется в диапазоне температур 300–380 К и может быть инициировано деформацией [5,6]. Стоит отметить, что такие методы улучшения механических характеристик, как легирование, могут негативно влиять на реализацию функциональных свойств материала, уменьшая концентрацию фаз, реализующих мартенситное превращение [7]. Мы предлагаем улучшить механические свойства, добившись равномерного распределения кристаллической матрицы по направлению нагрузки.

1. Детали моделирования

Моделирование динамики атомов в кристаллическом никелиде титана осуществляется для системы в фазе В2 с суммарным количеством атомов $\approx 25\,000$. В равновесном состоянии пористая система достигает размеров 9 нм с размерами пор порядка 4–5 нм и пористостью $\approx 55\%$. Пористая система была получена посредством удаления атомов из кристаллической основы. В отличие от получения пористой системы методом быстрого охлаждения расплава [8,9], используемый в настоящей работе способ позволяет сохранить кристаллическую структуру материала. Межатомное взаимодействие задается потенциалом 2NN MEAM [10]:

$$E = \sum_i \left[F_i(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} S_{ij} \phi_{ij}(R_{ij}) \right].$$

В этом выражении E — полная энергия системы; $F_i(\rho_i)$ — энергия „погруженного атома“, зависящая от электронной плотности; $S_{ij} \phi_{ij}(R_{ij})$ — функции парного взаимодействия атомов, зависящие от расстояния между частицами. Стоит отметить, что данный потенциал хорошо воспроизводит структуру и физико-механические свойства нитинола для широкой термодинамической области, как это было показано ранее в работах [11–13].

В настоящей работе были приготовлены образцы пористого нитинола с неравномерным профилем плотности $L(x)$ твердой кристаллической матрицы, а также образцы с относительно равномерным профилем плотности вдоль оси x . Образцы с равномерным профилем плотности были получены посредством корректировки положения пор таким образом, чтобы профиль плотности слабо менялся вдоль оси растяжения (рис. 1, *b*). Отметим, что вдоль остальных направлений профиль плотности не равномерен. Растяжение происходило при температуре 300 К со скоростью деформации $\dot{\epsilon} = 5 \cdot 10^9 \text{ s}^{-1}$ в NVT-ансамбле. Такая скорость деформации является типичной для метода моделирования молекулярной динамики, так как характерный временной масштаб моделирования порядка 100 пс.

2. Обсуждение результатов

Были рассчитаны распределения толщины межпоровых переемычек и представлены в сравнении с экспериментальным распределением для пористого никелида титана со средним размером пор $90 \mu\text{m}$ [14] (рис. 2). Важно отметить, что толщины переемычек были нормированы на среднюю толщину переемычки ($\bar{l}_{MD} \approx 2.8 \text{ nm}$ и $\bar{l}_{\text{exp}} \approx 127 \mu\text{m}$), а распределение толщин пор размерам нормировано следующим образом $\int P(l) dl = 1$.

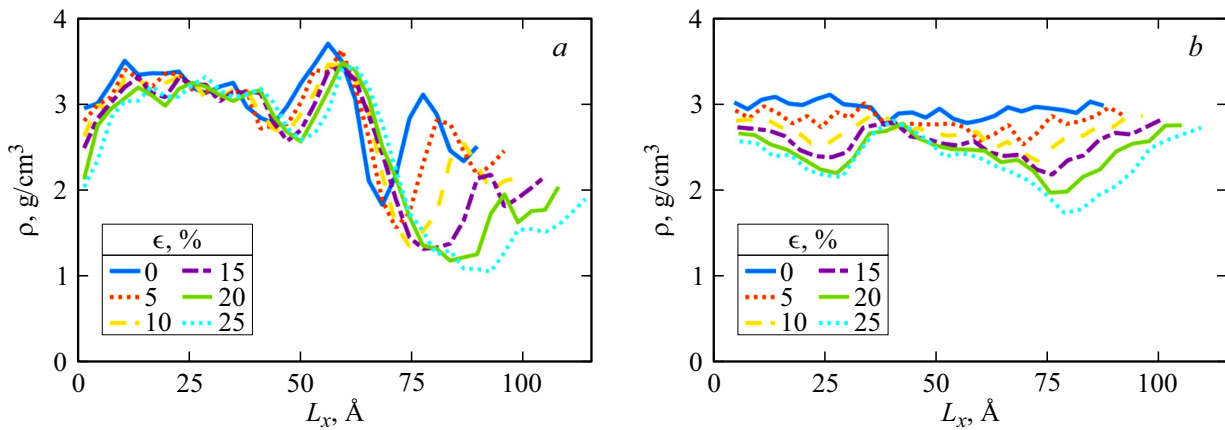


Рис. 1. Профили плотности при растяжении для образца с неравномерным профилем плотности (*a*) и равномерным профилем плотности (*b*). Здесь ϵ — относительная деформация образца.

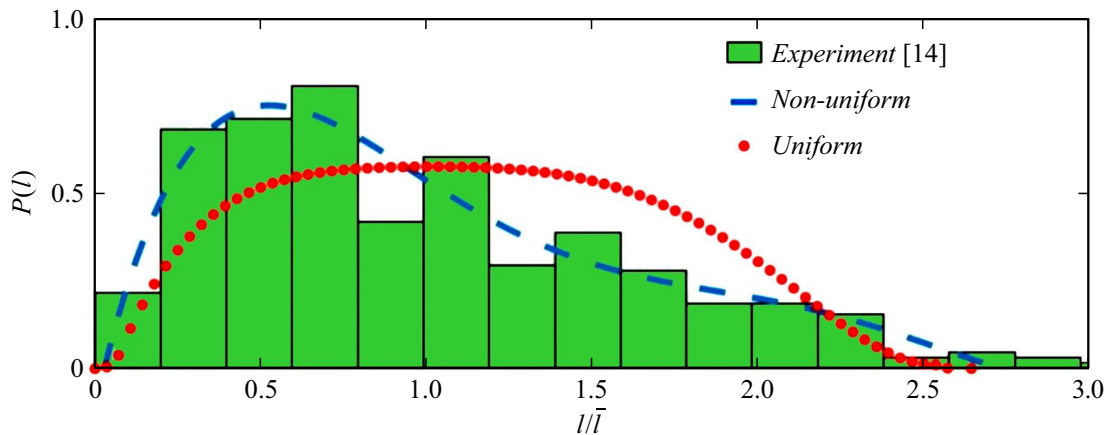


Рис. 2. Сравнение распределений толщин межпоровых перемычек, нормированных на среднюю толщину перемычки.

Из рис. 2 видно, что распределение толщины межпоровых перемычек в случае системы с неравномерным профилем плотности качественно повторяет распределение, полученное из эксперимента. В свою очередь, смещение распределения в сторону больших толщин перемычек в случае равномерного профиля плотности приводит к улучшению механических характеристик.

Растяжение рассматриваемых образцов позволило нам обнаружить разное поведение образцов при разрушении в зависимости от морфологии пористой системы. Из рис. 1, *a* видно, что неравномерный профиль плотности характеризуется наличием выраженных экстремумов с чередующимися минимумами и максимумами. Из-за наличия таких экстремумов твердая матрица неравномерно распределяет нагрузки, вызванные растяжением. Поэтому разрушение системы при растяжении начинается вблизи области с минимальной плотностью. Положение и глубина глобального минимума легко детектируется из графика профиля плотности (рис. 1, *a*). Для сравнения в случае пористой системы с относительно равномерным профилем плотности присутствует

несколько минимумов одинаковой глубины, что хорошо видно из рисунка (рис. 1, *b*). Рис. 1, *b* показывает, что в случае системы с относительно равномерным профилем плотности формирование устойчивого глобального минимума происходит только при деформациях 15%. Тем самым система гораздо эффективнее распределяет нагрузку и гораздо дольше сопротивляется разрушению.

Из полученной кривой напряжения–деформации, представленной на рис. 3, следует, что образец с равномерным профилем плотности обладает повышенными прочностными характеристиками в сравнении с образцом с неравномерным профилем плотности в случае одноосного растяжения. Это подтверждается рассчитанным значением предела прочности $\sigma_{frac} \approx 1.8 \pm 0.2$ ГПа при деформации 20%, что в 1.5 раза больше предела прочности образца с неравномерным профилем плотности ($\sigma_{frac} = 1.2 \pm 0.2$ ГПа при деформации 17.5%). При этом модуль Юнга E образцов с равномерным профилем плотности составляет $E \approx 20.0 \pm 0.5$ ГПа, в то время как для образцов с неравномерным профилем плотности $E \approx 14.9 \pm 0.2$ ГПа.

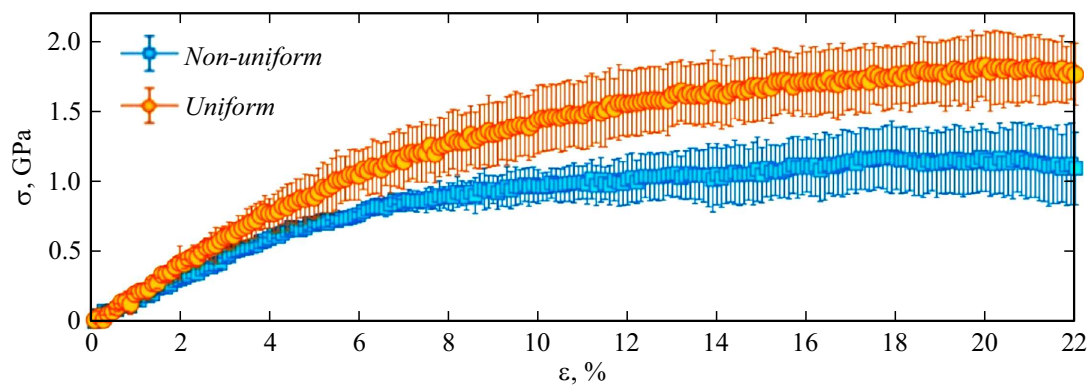


Рис. 3. Кривые напряжения–деформации для образцов с равномерным и неравномерным профилями плотности.

Заключение

Результаты настоящего исследования показали, что повышенными прочностными характеристиками при одноосном растяжении обладает пористый нитинол с равномерным профилем плотности. Такой профиль означает, что плотность твердой матрицы остается постоянной (или изменяется незначительно) по направлению растягивающей силы. Это приводит к более равномерному распределению нагрузки внутри системы и тем самым увеличению предела прочности и предельной деформации. Мы показали, что предел прочности пористого нитинола с равномерным профилем плотности кристаллической матрицы в 1.5 раза больше, чем у образцов с неравномерным профилем. Поэтому пористые металлические сплавы с равномерным профилем плотности относятся к материалам с улучшенными эксплуатационными свойствами.

Финансирование работы

Работа выполнена в рамках программы „Приоритет-2030“.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] T. Duerig, A. Pelton, D. Stöckel. *Mater. Sci. Eng.*, **273**, 149 (1999). DOI: 10.1016/S0921-5093(99)00294-4
- [2] D. Kapoor. *Johnson Matthey Technol. Rev.*, **61** (1), 66 (2017). DOI: 10.1595/205651317X694524
- [3] S.A. Shabalovskaya. *Bio-Medical Mater. Eng.*, **12** (1), 69 (2002).
- [4] D.J. Hartl, D.C. Lagoudas. *Proc. IMechE Part G: J. Aerospace Eng.*, **221** (4), 540 (2007). DOI: 10.1243/09544100JAERO211
- [5] H. Aihara, J. Zider, G. Fanton, T. Duerig. *Interna. J. Biomater.*, **2019** (4307461), 1 (2019). DOI: 10.1155/2019/4307461
- [6] S. Daly, G. Ravichandran, K. Bhattacharya. *Acta Mater.*, **55** (10), 3593 (2007). DOI: 10.1016/j.actamat.2007.02.011
- [7] A.N. Monogonov, E.S. Marchenko, G.A. Baigonakova, Y.F. Yasenchuk, A.S. Garin, A.A. Volinsky. *J. Alloys Comp.*, **918** (165617), 10 (2022). DOI: 10.1016/j.jallcom.2022.165617
- [8] B.N. Galimzyanov, G.A. Nikiforov, A.V. Mokshin. *Acta Phys. Polonica A.*, **137**, 1149 (2020). DOI: 10.12693/APhysPolA.137.1149
- [9] Г.А. Никифоров, Б.Н. Галимзянов, А.В. Мокшин. *УЗФФ МГУ*, **2019** (4), 1940703 1 (2019).
- [10] W.-S. Ko, B. Grabowski, J. Neugebauer. *Phys. Rev. B.*, **92** (134107), 1 (2015). DOI: 10.1103/PhysRevB.92.134107
- [11] J. Chen, D. Huo, H.K. Yeddu. *Mater. Res. Express*, **8** (106508), 1 (2021). DOI: 10.1088/2053-1591/ac2b57
- [12] J. Lee, Y.C. Shin. *Metals*, **11**, 1237 (2021). DOI: 10.3390/met11081237
- [13] Y. Guo, X. Zeng, H. Chen, T. Han, H. Tian, F. Wang. *Adv. Mater. Sci. Eng.*, **1** (2017). DOI: 10.1155/2017/7427039
- [14] В.Н. Ходоренко, С.Г. Аникеев, В.Э. Гюнтер. *Известия вузов. Физика*, **57** (6), 20 (2014). [V.N. Khodorenko, S.G. Anikeev, V.E. Gunther. *Rus. Phys. J.*, **57** (6), 726 (2014). DOI: 10.1007/s11182-014-0296-5]