

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ
ИНСТИТУТ ФИЗИКИ ИМ. Х.И. АМИРХАНОВА ДФИЦ РАН
ДАГЕСТАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ЧЕЛЯБИНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

**ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ, КРИТИЧЕСКИЕ
И НЕЛИНЕЙНЫЕ ЯВЛЕНИЯ В
КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ**

СБОРНИК ТРУДОВ

международной конференции
15-20 сентября 2019 г., Махачкала

*Конференция проводится при финансовой поддержке
Министерства науки и высшего образования РФ*



Махачкала 2019

УДК 537.61

ББК 22.334

Ф-16

Ф-16 Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах. Сборник трудов международной конференции (15-20 сентября 2019 г., Махачкала). – Махачкала: АЛЕФ, 2019. – 458 с.

ISBN 978-5-00128-284-6

В настоящий сборник включены материалы, представленные на международную конференцию "Фазовые переходы, критические и нелинейные явления в конденсированных средах".

Конференция проводится Министерством науки и высшего образования РФ, Институтом физики Дагестанского федерального исследовательского центра РАН, Дагестанским государственным университетом, Челябинским государственным университетом.

Материалы воспроизведены с авторских оригиналов, в связи с чем Оргкомитет конференции не несет ответственности за допущенные опечатки и стилистические погрешности.

ISBN 978-5-00128-284-6

© Институт физики Дагестанского ФИЦ РАН, 2019
© Издательство «АЛЕФ», 2019

Расчет характеристик формирования аморфной пористой структуры в сплаве NiTi при высоких скоростях охлаждения на основе данных моделирования

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

Казанский федеральный университет, Институт физики, Казань, Россия
e-mail: bulatgnmail@gmail.com

Сплав титана и никеля (нитинол, TiNi) благодаря своим уникальным физико-химическим и функциональным свойствам, в том числе, биологической инертности и эффекту памяти формы, находит широкое применение в медицине, в автомобилестроении и в аэрокосмической отрасли [1]. Отдельное внимание уделяется нитинолу с пористой структурой, к свойствам которого также относятся более высокие звуко- и теплоизоляционные способности. Более того, пористые модификации нитинола, механические свойства которого приближены к свойствам костной ткани, успешно применяются в качестве материала для изготовления имплантатов [2, 3].

При производстве пористых материалов, в том числе пористого нитинола, широко применяется метод спекания гранулированной или порошкообразной смеси, например, посредством лазерного плавления. Здесь образцы могут подвергаться воздействию чрезмерно высоких температур и быстрому охлаждению, что, в свою очередь, может привести к внутреннему напряжению и образованию в системе пористой структуры [1-3]. В случае нитинола, влияние условий нагревания и охлаждения на формирование пористой структуры до сих пор остается малоизученным.

В настоящей работе представлены результаты моделирования атомарной динамики пористого аморфного нитинола. Рассматривается сплав титана и никеля в пропорциях 50% и 50%. Ячейка моделирования кубической формы и с периодическими граничными условиями во всех направлениях содержит 108000 атомов. Взаимодействие атомов задается в рамках модифицированной модели погруженного атома (потенциал MEAM) [4]. Образцы кристаллического нитинола были нагреты до температур 2750K, 4750K, 5750K, 6750K, 7750K и 8750K при давлении 1 атм и приведены в состоянии термодинамического равновесия. При данном давлении температура плавления системы составляет $T_m \approx 1600K$. Далее выполнено охлаждение расплавленных образцов нитинола до комнатной температуры $T = 300K$, что соответствует глубокому уровню переохлаждения со значением $(T_m - T)/T_m \approx 0.81$. Охлаждение осуществлялось со скоростями $5 \cdot 10^{13}K/c$ и $10^{14}K/c$. При таких скоростях охлаждения расплав формирует аморфную фазу [5, 6].

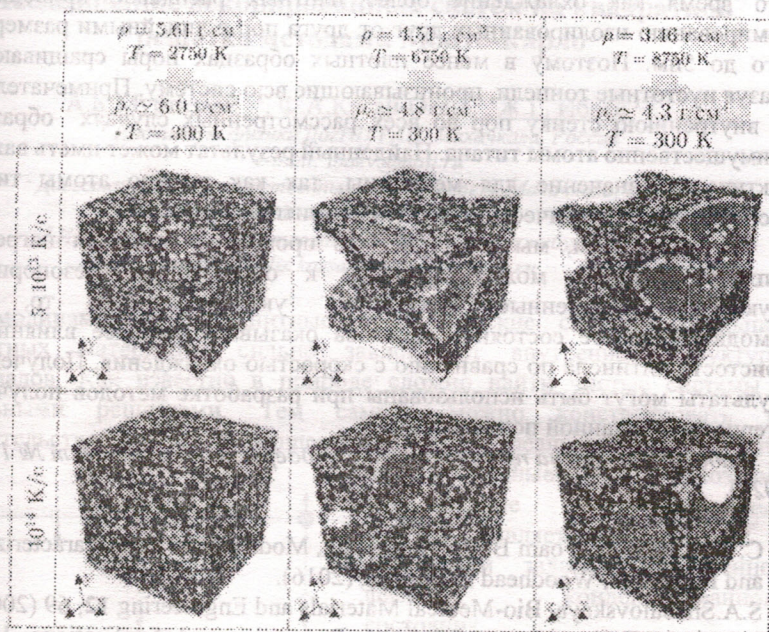


Рис. 1 Мгновенные снимки конфигурации нитинола с мезопористой структурой (линейные размеры пор от 2нм до 10нм) при температуре 300К, полученные при различных скоростях охлаждения расплава с различными термодинамическими (ρ, T -состояниями). Темные шары обозначают атомы никеля, в то время как светлые шары - атомы титана.

На рис. 1 показаны мгновенные снимки нитинола с пористой структурой при температуре 300К, полученные при различных скоростях охлаждения расплава. В качестве примера показаны образцы, полученные охлаждением расплава с плотностями 5.61 г/см^3 (при температуре $T=2750 \text{ К}$), 4.51 г/см^3 (при $T=6750 \text{ К}$) и 3.46 г/см^3 (при $T=8750 \text{ К}$). Механизм формирования пор заключается в том, что система при достаточно больших скоростях охлаждения не успевает образовать плотную структуру вследствие медленного и неравномерного теплового сжатия. Это приводит к гомогенному зарождению и росту пор в процессе охлаждения расплава. Вследствие чрезмерно высокой вязкости при температуре 300К образовавшиеся поры находятся в замороженном состоянии на протяжении длительного периода времени. Из рис. 1 видно, что линейные размеры и характер распределения пор в большей степени зависят от термодинамического состояния исходного расплава, нежели от скорости охлаждения. При охлаждении расплавленных образцов с плотностью $\rho < 5.0 \text{ г/см}^3$ линейный размер пор составляет несколько десятка нанометров,

в то время как охлаждение более плотных расплавов приводит к формированию изолированных друг от друга пор с линейными размерами всего до 5 нм. Поэтому в менее плотных образцах поры срашиваются, образуя пустотные тоннели, пронизывающие всю систему. Примечательно, что внутреннюю стенку пор во всех рассмотренных случаях образуют преимущественно атомы титана. Найденный результат может иметь важное практическое значение для медицины, так как именно атомы титана обеспечивают биологическую инертность нитинола [7].

Таким образом, мы показали, что процесс охлаждения нагретого расплава нитинола может привести к образованию мезопористой структуры. Полученные результаты указывают на то, что термодинамическое состояние расплава оказывает большее влияние на пористость нитинола по сравнению с скоростью охлаждения. Полученные результаты могут быть использованы при разработке методов получения материалов с заданной пористостью.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 19-12-00022).

- [1] C.Wen, *Metallic Foam Bone: Processing, Modification and Characterization and Properties*, Woodhead Publishing (2016).
- [2] S.A.Shabalovskaya, *Bio-Medical Materials and Engineering* **12**, 69 (2002).
- [3] P.S.Liu, G.F.Chen, *Porous Materials Processing and Applications*. 1st ed. Elsevier Ltd., Oxford, UK (2014).
- [4] W.-S.Ko, B.Grabowski, J.Neugebauer, *Phys. Rev. B*, **92**, 134107 (2015).
- [5] A.V.Mokshin, B.N.Galimzyanov, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19**, 11340 (2007).
- [6] B.N.Galimzyanov, D.T.Yarullin, A.V.Mokshin, *Acta Mater.* **169**, 184 (2019).
- [7] I.V.Shishkovsky, M.V.Kuznetsov, Yu.G.Morozov, *International Journal of Self-Propagating High-Temperature Synthesis* **19**, 157 (2010).