

Тезисы докладов
международной конференции

ФИЗИКА.СПб

17–21 октября 2022 года

Санкт-Петербург
2022

ББК 22.3:22.6

Ф48

ФизикА.СПб: тезисы докладов международной конференции 17–21 октября 2022 г.
— СПб.: ПОЛИТЕХ-ПРЕСС, 2022

Организатор

ФТИ им. А. Ф. Иоффе

При поддержке

ООО «ИННО-МИР»

Программный комитет

Аверкиев Никита Сергеевич (ФТИ им. А. Ф. Иоффе) — председатель
Соколовский Григорий Семенович (ФТИ им. А. Ф. Иоффе) — заместитель председателя
Арсеев Петр Иварович (ФИАН)
Гавриленко Владимир Изяславович (ИФМ)
Дьяконов Михаил Игоревич (Université Montpellier II, France)
Дунаев Андрей Валерьевич (ОГУ им. И.С. Тургенева)
Иванчик Александр Владимирович (ФТИ им. А. Ф. Иоффе)
Калашникова Александра Михайловна (ФТИ им. А. Ф. Иоффе)
Карачинский Леонид Яковлевич (ООО «Коннектор Оптик»)
Конников Семен Григорьевич (ФТИ им. А. Ф. Иоффе)
Кучинский Владимир Ильич (СПбГЭТУ, А. Ф. Иоффе)
Пихтин Никита Александрович (ООО «Эльфоллом», ФТИ им. А. Ф. Иоффе)
Рудь Василий Юрьевич (СПбПУ)
Степина Наталья Петровна (ИФП им. А. В. Ржанова)
Сурис Роберт Арнольдович (ФТИ им. А. Ф. Иоффе)
Нестоклон Михаил Олегович (ФТИ им. А. Ф. Иоффе)
Устинов Виктор Михайлович (НТИЦ микроэлектроники РАН)

Организационный комитет

Соколовский Григорий Семенович (ФТИ им. А.Ф. Иоффе) — председатель
Поняев Сергей Александрович (ФТИ им. А. Ф. Иоффе) — заместитель председателя
Азбель Александр Юльевич (ФТИ им. А. Ф. Иоффе)
Бекман Артем Александрович (ФТИ им. А. Ф. Иоффе)
Дюделев Владислав Викторович (ФТИ им. А. Ф. Иоффе)
Когновицкая Елена Андреевна (ВНИИМ им. Д. И. Менделеева)
Лосев Сергей Николаевич (ФТИ им. А. Ф. Иоффе)
Рябочкина Полина Анатольевна (МГУ им. Н. П. Огарёва)
Черотченко Евгения Дмитриевна (ФТИ им. А. Ф. Иоффе)

Международная конференция 2022 года продолжает традицию Итоговых семинаров по физике и астрономии по результатам конкурсов грантов для молодых ученых, проводившихся в Санкт-Петербурге с середины 1990-х годов.

ISBN 978-5-7422-7853-5

© Санкт-Петербургский политехнический
университет Петра Великого, 2022

Оригинальный численный алгоритм создания пористой структуры в кристаллическом никелиде титана

Никифоров Г. А.¹, Галимзянов Б.Н.¹, Мокшин А.В.¹

¹Казанский (Приволжский) Федеральный Университет

e-mail: nikiforov121998@mail.ru

В настоящее время в дизайне материалов с заданными свойствами применяются методы компьютерного моделирования, в частности моделирование методом молекулярной динамики [1-2]. Для моделирования пористых сплавов необходимы эффективные алгоритмы создания пористой структуры с требуемыми параметрами: пористостью, размером пор, распределением пор в объеме системы. Разработка таких алгоритмов позволит приблизить результаты моделирования к экспериментальным данным.

Нами разработан численный алгоритм, позволяющий создавать и моделировать пористые металлические сплавы с заданными параметрами пористой структуры. Корректность работы алгоритма апробирована на примере бинарного сплава никелида титана Ni₅₀Ti₅₀, являющегося биосовместимым сплавом с эффектом памяти-формы и активно применяемым в имплантологии [3-4]. Алгоритм генерирует пористую структуру посредством удаления атомов из начальной однородной кристаллической системы. Пористость задается с точностью до атома, что позволяет распределять поры стохастическим или перколяционным образом. Создание пор начинается после определения её координат в внутри системы. Форма поры аппроксимируется эллипсоидом, параметры которого выбираются случайным образом из заранее указанной области значений. Далее проверяется условие нахождения атомов внутри эллипсоида: атомы, находящиеся внутри эллипсоида удаляются. После этого выполняется расчет пористости и его сравнение с требуемым заданным значением. При достижении заданной пористости алгоритм завершает работу.

В итоге получается пористая структура со стабильной кристаллической матрицей. Преимущество этого алгоритма заключается в том, что он позволяет получить пористую структуру, близкую к структуре образцов, синтезируемых в лабораторных условиях.

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
3. Galimzyanov B. N., Mokshin A. V., Mechanical response of mesoporous amorphous NiTi alloy to external deformations, *International Journal of Solids and Structures*, V. 224, 111047, 2021
4. Galimzyanov B.N., Nikiforov G.A., Mokshin A.V., Effect of Ultrafast Cooling on Pore Formation in Amorphous Titanium Nickelide, *Acta Physica Polonica A*, V. 137, 1149-1152, 2020