

Зависимость механических свойств пористого нитинола от структуры кристаллической матрицы

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

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань

E-mail: nikiforov121998@mail.ru

DOI: 10.24412/cl-35673-2022-1-73-74

На сегодняшний день активно набирают популярность «умные» материалы за счёт своих уникальных физических свойств [1]. Одним из таких материалов является никелид титана $Ni_{50}Ti_{50}$ (нитинол) благодаря эффекту памяти формы — способности после пластической деформации полностью восстановить свою исходную форму. Помимо эффекта памяти формы нитинол интересен своей высокой коррозионной стойкостью и биоинертностью, вследствие чего нашел широкое применение как материал для изготовления имплантов [2]. Особый интерес представляют импланты на основе пористого нитинола, так как они могут быть насыщены лекарственными препаратами [3]. Также известно, что живые ткани лучше интегрируются с пористыми имплантами [4]. Эти обстоятельства делают актуальным исследование структуры и механических свойств пористого нитинола. В нашей работе мы воспользовались методом моделирования молекулярной динамики, так как он позволяет получать такие структуры, которые на сегодняшний день еще не удалось получить экспериментальным способом.

Для изучения структуры и механических свойств пористого нитинола нами был разработан оригинальный алгоритм генерации пористой структуры с заданными параметрами пор и пористостью системы. Принцип работы алгоритма заключается в удалении атомов из сплошной кристаллической основы. Выбор алгоритмом области генерации поры в кристаллической матрице происходит случайным образом. В алгоритме предусмотрена возможность задавать размеры пор в зависимости от исследовательской задачи.

В данной работе мы изучали механические свойства при растяжении вдоль оси Ox пористых моделей нитинола, полученных с помощью разработанного нами алгоритма. Мы обнаружили, что упругие, пластические и прочностные свойства пористых образцов с

равномерным распределением кристаллической матрицы вдоль направления деформации выше, чем у аналогичных образцов со случайным распределением (рис. 1, левая панель). На рис. 1 (правая панель) представлено изображение пористой системы нитинола, полученной с помощью предложенного алгоритма, с равномерным распределением кристаллической матрицы вдоль оси Ox при температуре 300 К и давлении 1 атм.

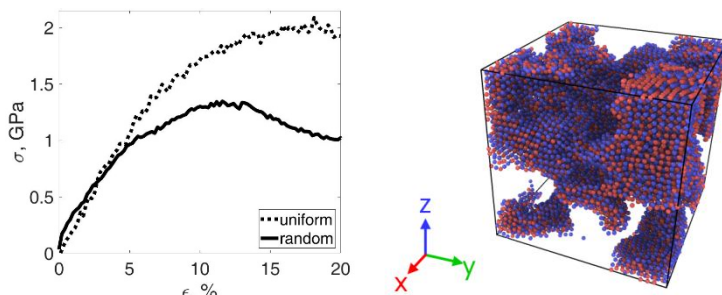


Рис. 1. Мгновенный снимок конфигурации кубической пористой системы размером 9 нм, пористостью 55 % и линейными размерами пор 2.1–5.7 нм (правая панель), график напряжения-деформации при растяжении пористых образцов нитинола с равномерным и случайным распределением кристаллической матрицы (левая панель)

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

1. Qader I.N., Kök M., Dagdelen F. et al. El-Cezerî Journal of Science and Engineering. 2019, **6**, 755–788.
2. Duerig T., Pelton A., Stöckel D. Materials Science and Engineering. 1999, **273**, 149–160.
3. Wang C.K., Wang W.Y., Robert F.M. et al // J. Biomed. Mater. Res. B Appl Biomater. 2010, **93**, 562–572.
4. Волчков С.Е., Шишковский И.В., Байриков И.М. Клеточная трансплантология и тканевая инженерия. 2013, **8**, 51–56.