

Министерство образования и науки РФ
Российский фонд фундаментальных исследований
Межгосударственный Совет по физике прочности и пластичности (СНГ)
Научный совет РАН по физике конденсированного состояния
Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова
Томский государственный архитектурно-строительный университет
Сибирский государственный индустриальный университет
Сибирский физико-технический институт
Институт проблем сверхпластичности металлов РАН

ЭВОЛЮЦИЯ ДЕФЕКТНЫХ СТРУКТУР В КОНДЕНСИРОВАННЫХ СРЕДАХ

Сборник тезисов
XV Международной школы-семинара (ЭДС-2018)

*10-15 сентября 2018 г.
г. Барнаул – г. Белокураха, Россия*

Изд-во ООО НИЦ «Системы Управления»
Барнаул • 2018

tude is a function of crystallographic direction, temperature, applied strain and many other factors. In this work, the impact of temperature on TDE of face-centered cubic nickel in some main crystallographic directions $\langle 001 \rangle$, $\langle 011 \rangle$, $\langle 111 \rangle$, $\langle 135 \rangle$ has been calculated by molecular dynamics method at different temperature from 50 K to 1000 K. The LAMMPS with GPU and Voronoi package was used to simulate the displacement cascades in simulation box contains $30 \times 30 \times 30$ unit cells with periodic boundary conditions are applied in three directions. In all cascades, the primary knock-on atom (PKA) was given first kinetic energy of 100 eV in some basic crystallographic directions. Our simulations were run with a three layers wide Langevin bath to evacuate the extra heat. The first 10 ps were used to equilibrate the system to target temperature with 0 bar of pressure by NPT ensemble. After the PKA is given the kinetic energy of 100 eV, the MD was run at a constant NVE. A variable time-step was used for at least 0,2 ps to limit the distance traveled by atoms between timesteps to ensure numerical accuracy and simulation efficiency. After 0,2 ps with variable time-step for primary collision, simulation time-step resets to 0,001 ps and system is equilibrated for 10 ps. This process continues by binary search algorithm until at least one stable Frenkel pair remains after simulation. Like many report from literature previously, we observed the TDE appears to increase with increasing temperature as a result of thermal recombination. The thermal activation of Frenkel pair at higher temperature can be significantly decreased the defect formation probability and causes an increase in the value of E_d . For example, it is show that with temperature increased from 300 K to 600 K, the effective threshold displacement energy in all direction can increase up to approximately 8 eV. The results are discussed.

ВЛИЯНИЕ ДОБАВОК КОБАЛЬТА НА СТРУКТУРНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОРИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ TiNi, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ДИФФУЗИОННОГО СПЕКАНИЯ

**А.С. Гарин*, Н.В. Артюхова, М.И. Кафтаранова,
В.Э. Гюнтер**

*Национальный исследовательский Томский государственный
университет, г. Томск
stik-020@mail.ru

Пористо-монокристаллические конструкции на основе никелида титана (TiNi) активно используются в челюстно-лицевой хирургии, онкологии, стоматологии и призваны решать сложнейшие медицинские задачи, где применение традиционных пористых или монокристаллических имплантатов затруднено. Комбинированные имплантаты состоят из пористой и монокристаллической

частей и формируются путем припекания порошка никелида титана на монокристаллические пластины TiNi. Монокристаллическая компонента призвана увеличивать ресурс работы имплантата и ответственная за высокие деформационно-прочностные свойства, в то время как пористая часть позволяет ускорять процессы интеграции имплантата в организм человека за счет трехмерной пористо-проницаемой структуры, которая повторяет анатомические свойства живых тканей организма. В процессе создания таких имплантатов решается сложнейшая задача – создание качественного переходного слоя от монокристаллической части к пористой. Для решения существующей проблемы с целью получения пористо-монокристаллических комбинированных конструкций на основе никелида титана перспективно использование активирующих спекание добавок кобальта (Co). Исходя из этого, исследование влияния добавок кобальта на структурные характеристики пористых материалов, полученных методом диффузионного спекания порошка никелида титана, в перспективе создания на их основе пористо-монокристаллических комбинированных конструкций, является актуальной темой исследования.

Проведено исследование структурных характеристик пористых материалов, полученных диффузионным спеканием порошка никелида титана марки ПВ–Н55Т45 при температуре $T = 1260$ °С и добавке кобальта марки ПК–1У 0,5–2 ат. % с шагом 0,5 %. Установлено, что спекание при температуре соответствует получению пористо-проницаемых материалов с качественными межчастичными контактами, материал имеет равномерное распределение пор по размерам от периферии к центру. Пористость полученных образцов составляет 50–55 %. При добавках от 1 до 2 ат. % Co увеличивается количество расплава, вызывая усадку образца от 1 до 8 %. Образовавшийся расплав Ti_2Ni под действием капиллярных сил смачивает поверхность порошинок, в которой встречаются частицы Co. Смачивая и частично растворяя частицы Co, расплав вступает с ним в жидкофазное реакционное взаимодействие с выделением тепла и образованием соединений ($TiNi + TiCo$).

Анализ фрактограмм разрушения полученных образцов с добавками кобальта, подтверждает изменения характера поверхностей разрушения по сравнению с материалами без Co. Для образцов с 2 ат. % Co преобладает хрупкий тип разрушения с наличием пакетов мартенситных кристаллов В19 с преимущественной ориентацией в структуре межпоровых перемычек.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-32-00745.