ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

INTERNATIONAL WORKSHOP

**«Multiscale Biomechanics and Tribology
of Inorganic and Organic Systems»**

МЕЖДУНАРОДНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ

**«Перспективные материалы с иерархической структурой
для новых технологий и надежных конструкций»**

**VIII ВСЕРОССИЙСКАЯ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ
КОНФЕРЕНЦИЯ С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ,
ПОСВЯЩЕННАЯ 50-ЛЕТИЮ ОСНОВАНИЯ
ИНСТИТУТА ХИМИИ НЕФТИ**

«Добыча, подготовка, транспорт нефти и газа»

DOI: 10.17223/9785946218412/304

**ОСОБЕННОСТИ ДИФФУЗИИ В ПЕРЕХОДНОЙ ЗОНЕ «ПОКРЫТИЕ (Si,Ta) –
ПОДЛОЖКА (TiNi)» ПРИ ВНЕШНЕМ НАГРЕВЕ**

^{1,2}Князева А.Г., ¹Крюкова О.Н., ¹Маслов А.Л.

¹ФГБУН Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, Томск

²ФГАОУ ВО НИ «Томский политехнический университет», Томск

Сегодня в медицине для изготовления различных имплантантов широко применяются изделия из материалов с эффектом памяти формы, в том числе, из никелида титана – давно известного и хорошо изученного сплава, обладающего этим свойством [1]. Однако использование никелида титана в медицинских целях осложнено токсичностью никеля, считающегося канцерогеном и аллергеном [2]. Для решения этой проблемы на поверхности изделий формируют различные барьерные покрытия. К таким покрытиям предъявляется ряд требований: они должны обладать значительной адгезионной прочностью, быть стойкими к коррозии, не ухудшать полезные механические свойства изделий и при всем этом быть биосовместимыми.

Одним из перспективных методов получения таких покрытий является воздействие на специальную пленку, предварительно нанесенную на поверхность изделия, потоком электронов [3]. Для осаждения могут быть использованы различные элементы [4], в том числе, кремний и тантал. При этом в переходном слое между покрытием и подложкой формируется многокомпонентный и многофазный материал. Процесс образования и структуру переходной зоны достаточно сложно изучать и интерпретировать. Важную роль в таких исследованиях может играть математическое моделирование.

В настоящей работе проанализирована особенность формирования переходных слоев между покрытиями из кремния и тантала и подложкой из TiNi в окрестности границ разделяющих зерна, которые образуют подложку. Зерна и границы рассматриваются при этом как отдельные фазы с разными диффузионными свойствами. В случае микрозерен размер граничной фазы мал по сравнению с размером объемной фазы. В случае нанозерен размеры фаз сопоставимы, с чем связаны особенности формирования состава переходной зоны.

Для описания процесса формирования переходной зоны рассматривается часть образца, включающая половины трех зерен и границы между ними. Межзеренная граница охарактеризована коэффициентом диффузии, превышающим коэффициент диффузии в самом зерне.

Было принято, что влияние на образец падающего потока электронов сводится к его нагреву. При этом считалось, что нагрев осуществляется таким образом, что температура одинакова во всем изделии. Такому приближению соответствует значительно большее значение коэффициента температуропроводности для твердых тел по сравнению с коэффициентом диффузии.

Эти соображения позволяют определять динамику температуры из уравнения теплового баланса, включающего источники, связанные с внешним нагревом и тепловыми эффектами химических реакций. Диффузия кремния и тантала описывается двумерными уравнениями диффузии. Эволюция концентраций неподвижных продуктов химических реакций описывается уравнениями химической кинетики.

Задача сформулирована в безразмерном виде, и решена численно, с использованием неявных конечно-разностных схем. Было показано, что в зависимости от интенсивности межзеренной диффузии (которая зависит от предварительной обработки и способа получения никелида титана) возможно формирование различной фазовой структуры вблизи покрытия и границ зерен.

1. Kauffman G.B., May I. The Story of Nitinol: The Serendipitous Discovery of the Memory Metal and its Application // Chemical Educator. 1997. Vol. 2. P. 1-21.
2. Es-Souni M., Es-Souni M., Fischer-Brandies H. Assessing the biocompatibility of NiTi shape memory alloys used for medical application // Analytical and bioanalytical chemistry. 2005. Vol. 381(3). P. 557-567.
3. Boiko V.I., Valyaev A.N., Pogrebnyak A.D. Metal modification by high-power pulsed particle beams // Physics-USpekhi. 1999. Vol. 42. P. 1139–1166.
4. Lotkov A.I., Meisner L.L., Matveeva V.A., et al. Effect of silicon, titanium, and zirconium ion implantation on NiTi biocompatibility. Special issue on «Modification, synthesis, and analysis of advanced materials using ion beam techniques» // Advances in Materials Science and Engineering. 2012. Vol. 2012. 16 p.