09

Изучение механических свойств интерметаллидов на основе Ti, армированных углеродными нанотрубками

© У.И. Янковская, П.В. Захаров

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
„Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого“,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: yankovskaya_ui@spbstu.ru

Поступила в Редакцию 30 апреля 2025 г.
В окончательной редакции 8 сентября 2025 г.
Принята к публикации 11 ноября 2025 г.

Проведено изучение механических свойств поликристаллических структур на основе интерметаллических соединений алюминидов титана ($TiAl_3$, Ti_3Al) и никелида титана ($TiNi_3$) при одноосном растяжении с использованием методов молекулярно-динамического моделирования. Указанные интерметаллиды рассматриваются в качестве перспективных конструкционных материалов ввиду их уникальных характеристик. В рамках работы методом молекулярной динамики проанализированы структурные, упругие и прочностные свойства данных соединений, модифицированных углеродными нанотрубками (УНТ). Выбор УНТ в качестве армирующей фазы обусловлен их выдающимися механическими свойствами, такими как высокая прочность при растяжении, низкая плотность и значительный модуль Юнга. Полученные результаты свидетельствуют о существенном улучшении механических характеристик металломатричных композиционных материалов при введении углеродных нанотрубок.

Ключевые слова: поликристалл, моделирование, модуль Юнга, предел прочности, алюминиды, никелиды.

DOI: 10.61011/FTT.2025.12.62447.8033k-25

1. Введение

Интерметаллические соединения системы Ti-Al представляют значительный интерес для современных высокотехнологичных отраслей промышленности благодаря уникальному сочетанию физико-механических свойств. Эти материалы демонстрируют исключительно низкую плотность ($3.7-4.0\,g/cm^3$), высокую удельную прочность, сохраняющуюся вплоть до температур $700-800\,^\circ C$, а также выдающуюся стойкость к окислению и коррозии в агрессивных средах [1]. Такое сочетание характеристик делает их перспективными для применения в критически важных узлах авиационных двигателей, газотурбинных установках и компонентах космической техники, где требования к жаропрочности и весовой эффективности особенно строги [1].

Однако практическому использованию алюминидов титана препятствует ряд существенных ограничений. Как показывают исследования [2,3], данные соединения обладают ограниченной пластичностью (относительное удлинение менее 2% при комнатной температуре) и склонностью к хрупкому разрушению, что обусловлено их сложной кристаллической структурой (преимущественно типа $L1_0$) и ковалентным характером межатомных связей. Кроме того, низкая диффузионная подвижность атомов в упорядоченной решетке приводит к значительным технологическим сложностям при обработке таких материалов традиционными методами [4].

Современные стратегии улучшения свойств интерметаллидов на основе соединений Ti-Al включают несколько направлений: 1) Легирование третьими элементами (Cr, Nb, Mo, V), которое позволяет модифицировать фазовый состав и деформационное поведение материала [5]. Например, добавление $2-5$ at.% Nb существенно повышает жаропрочность и окислительную стойкость. 2) Микроструктурное регулирование через создание двухфазных ($\gamma + \alpha_2$) или ультрамелкозернистых структур [6]. 3) Композиционный подход с введением дисперсных упрочняющих частиц или армирующих элементов [7].

Никелиды титана занимают особое положение среди современных функциональных материалов благодаря уникальному сочетанию механических характеристик и функциональных свойств [8]. Данные интерметаллические соединения демонстрируют выдающиеся характеристики, включая сверхупругость, высокую коррозионную стойкость и биосовместимость, что определяет их широкие перспективы применения в различных областях техники и медицины [9].

Особый научный интерес представляет изучение механических и прочностных характеристик TiNi-сплавов в зависимости от их фазового состава и термомеханической обработки [10].

Перспективным направлением представляется компьютерное моделирование (методами молекулярной динамики, конечных элементов и DFT-расчетов), с помощью которого изучается влияние армирующих элементов на структуру и свойства интерметаллидов на основе Ti и их деформационное поведение, что позволяет

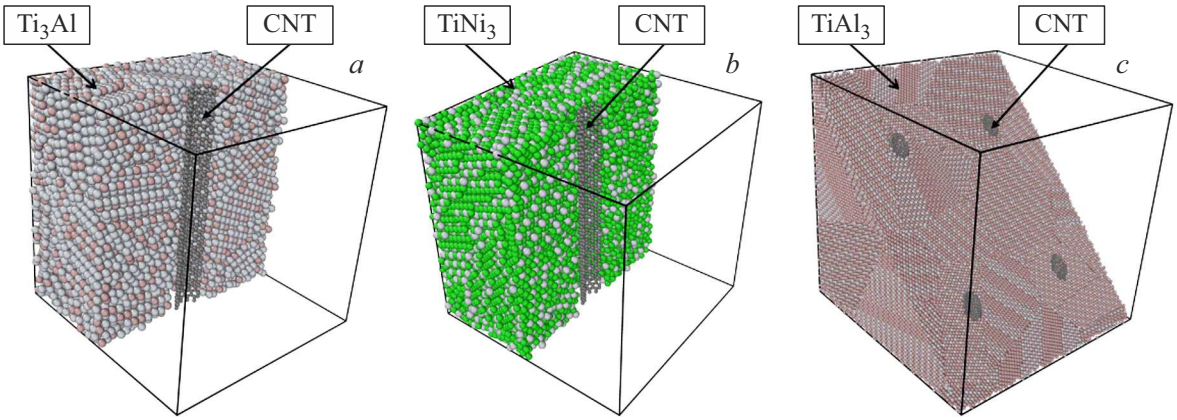


Рис. 1. Модели интерметаллических поликристаллов (срезы расчетных ячеек): *a*) Ti_3Al-CNT; *b*) схема армирования; *c*) $TiNi_3$-CNT; *d*) $TiAl_3$-CNT (со структурой $L1_2$).

оптимизировать их состав и сократить объем дорогостоящих экспериментальных исследований [11–13].

Целью настоящей работы является изучение влияния углеродных нанотрубок (УНТ) на механические свойства интерметаллических соединений на основе титана (Ti_3Al, $TiAl_3$ и $TiNi_3$) методом молекулярно-динамического моделирования.

2. Моделирование и результаты

В рамках настоящего исследования модели поликристаллов Ti_3Al и $TiAl_3$ со структурами $D0_{22}$ и $L1_2$, а также поликристалла $TiNi_3$ были созданы с использованием программного обеспечения с открытым исходным кодом: утилиты Atomsk [14] и крупномасштабного атомно-молекулярного параллельного симулятора LAMMPS [15]. Дополнительно были рассмотрены композитные системы на основе указанных интерметаллидов, армированные УНТ типа „зигзаг“, при этом объемная доля УНТ не превышала 5 % от общего объема композита.

Генерация поликристаллических структур осуществлялась методом Вороного [16] со случайным распределением размеров и ориентаций зерен. Моделирование композитов, содержащих УНТ, предполагало создание металлической матрицы с цилиндрическими отверстиями, расположенными вдоль всей высоты кристалла. Диаметр отверстий превышал диаметр внедряемых нанотрубок на 3 Å для обеспечения оптимального межатомного взаимодействия. Визуализация результатов моделирования выполнялась в программной среде OVITO [17], включая анализ дефектов структуры и межатомных расстояний. На рис. 1 приведены модели поликристаллов.

Точность моделирования процессов одноосного нагружения существенно зависит от корректного выбора потенциала межатомного взаимодействия в композиционном материале [18]. Для интерметаллидных систем, не содержащих углеродных нанотрубок (УНТ), использовались соответствующие MEAM-потенциалы. Однако для описания взаимодействий в композитах, армированных УНТ, требуется разработка гибридного потенциала, обеспечивающего адекватное моделирование межатомных взаимодействий как между атомами углерода, так и между углеродом и металлической матрицей, а также между атомами самой матрицы. Для описания взаимодействия углерод–углерод использовался потенциал адаптивного межмолекулярного реактивного эмпирического порядка связей (AIREBO). Для описания взаимодействия углерода с атомами металлической матрицы применялся потенциал Леннарда–Джонса (для Ti параметры получены из [19], для Al из [20], а Ni — [21]):

$$V(r) = 4\varepsilon[(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^{6}].$$

Для описания взаимодействия между атомами матрицы использовался подобранный в базе данных NIST [22] EAM потенциал. Полная энергия системы имеет вид:

$$E_{\text{total}} = E_{M-\text{M}} + E_{\text{C}-\text{C}} + E_(M - \text{C}),$$

где $E_{M-\text{M}}$ и $E_{\text{C}-\text{C}}$ описывают потенциальные энергии металлической матрицы и углеродных наноматериалов соответственно, а $E_{M-\text{C}}$ — взаимодействие между атомами металла и углерода. Уравнение для полной энергии системы приводится для демонстрации полноты используемого подхода, хотя в дальнейшем анализе основное внимание уделяется механическим характеристикам, вытекающим из этого энергетического описания.

На рис. 2 приведен результат одноосного нагружения для поликристаллов Ti_3Al и $TiAl_3$ в двух фазах: $D0_{22}$ и $L1_2$. Механические свойства, такие как предел прочности и предел текучести, имеют более высокое значение для интерметаллида $TiAl_3$, причем для фазы $D0_{22}$ эти показатели немного выше. Что касается модуля Юнга, то значения отличаются незначительно: 109.81 GPa — Ti_3Al; 115.91 GPa — $TiAl_3$.

Дальнейшее исследование было нацелено на изучение армирующего эффекта УНТ. При внедрении 3 % объемной доли УНТ в композит были получены следующие

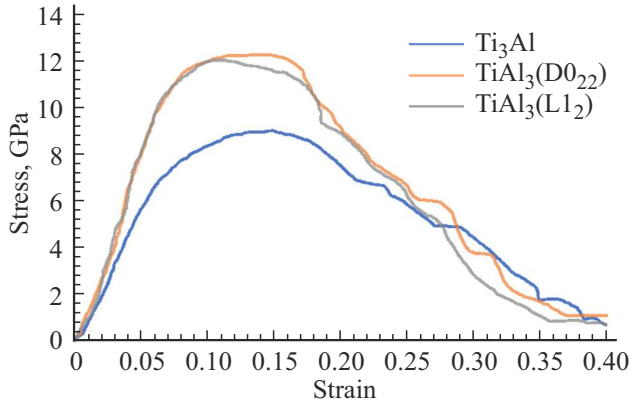


Рис. 2. Кривые напряжения/деформации при одноосном растяжении поликристаллов при температуре 300 K.

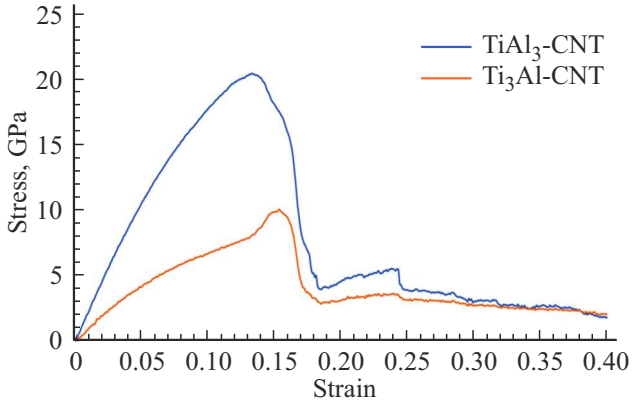


Рис. 3. Кривые напряжения/деформации при одноосном растяжении композитов при температуре 300 K.

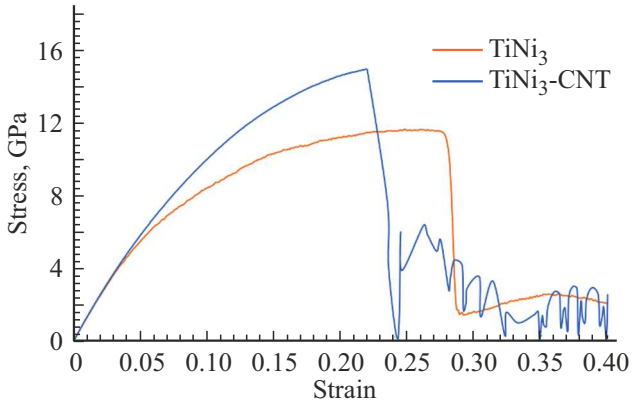


Рис. 4. Кривые напряжения/деформации при одноосном растяжении интерметаллида $TiNi_3$ и композита $TiNi_3$-CNT.

результаты: модуль Юнга для композита Ti_3Al-CNT составил 159.8 GPa; для $TiAl_3$ — 215.81 GPa. На рис. 3 представлен результат одноосного растяжения композитов. Предел прочности для композита Ti_3Al-CNT по сравнению с „чистым“ поликристаллом увеличился на незначительное значение на 0.5 %. Для композита $TiAl_3$-CNT повышение предела прочности уже существенно — 43 %.

Атомистическое моделирование одноосного растяжения никелида титана и композита, армированного УНТ, проводилось при температуре 300 K и постоянном давлении. Результат приведен на рис. 4.

Отмечается повышение предела прочности на 23 %. Однако фаза упругой деформации для композита, армированного УНТ, короче по сравнению с „чистым“ поликристаллом.

3. Заключение

Методом молекулярно-динамического моделирования установлено, что интерметаллид $TiAl_3$ (фаза $D0_{22}$) демонстрирует более высокие значения предела прочности и предела текучести по сравнению с Ti_3Al, что согласуется с его более жесткой кристаллической структурой. При этом модуль Юнга обоих соединений оказался близким: 109.81 GPa для Ti_3Al и 115.91 GPa для $TiAl_3$. Введение 3–5 % объемной доли УНТ в матрицу интерметаллидов приводит к существенному улучшению их механических характеристик. Так, для $TiAl_3$-УНТ наблюдается увеличение модуля Юнга на 86 % (до 215.81 GPa) и предела прочности на 43 %. Для Ti_3Al-УНТ модуль Юнга возрастает на 45 % (до 159.8 GPa), однако предел прочности увеличивается незначительно (+0.5 %), что может быть связано с особенностями межатомного взаимодействия на границе „металлическая матрица — УНТ“.

В случае $TiNi_3$ армирование УНТ повышает предел прочности на 23 %, но сокращает фазу упругой деформации, что указывает на изменение механизма пластичности — этот эффект требует дальнейшего изучения для применения в биомедицинских сплавах с памятью формы.

Результаты моделирования подтверждают, что углеродные нанотрубки эффективно блокируют движение дислокаций, особенно в интерметаллиде $TiAl_3$, где их влияние наиболее выражено. Это объясняется высокой жесткостью УНТ и прочным связыванием на границе раздела фаз.

Полученные результаты могут быть использованы для новых поколений интерметаллических композиционных материалов с заданными механическими свойствами.

Финансирование работы

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-22-20038 (https://rscf.ru/project/24-22-20038/) и гранта Санкт-Петербургского научного фонда № 24-22-20038.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] H. Clemens, S. Mayer. Adv. Eng. Mater. **15**, *4*, 191 (2022). https://doi.org/10.1002/adem.201200231
[2] L.H. Wu, X.B. Hu, X.X. Zhang, Y.Z. Li, Z.Y. Ma, X.L. Ma, B.L. Xiao. Acta Materialia **166**, 371 (2019). https://doi.org/10.1016/j.actamat.2018.12.059
[3] Z. Ba, H. Luo, J. Guan, J. Luo, J. Gao, S. Wu, R.O. Ritchie. Nature Commun. **14**, *1*, 1234 (2023). https://doi.org/10.1038/s41467-023-36939-6
[4] F. Chen, Y. Gu, G. Xu, Y. Cui, H. Chang, L. Zhou. Mater. & Design **185**, 108251 (2020). https://doi.org/10.1016/j.matdes.2019.108251
[5] G. Chen, Q. Sun, F. Cao, M.S. Akbar Khan, H. Zhang, H. Xu, Z. Liu, J. Li, Y. Liu, Y. Guo, X. Jian. J. Alloys. Cmpd. **936**, 168301 (2023). https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2022.168301
[6] E. Demir, E.W. Horton, A. Kareer, D.M. Collins, M. Mostafavi, D. Knowles. Acta Materialia **245**, 118658 (2023). https://doi.org/10.1016/j.actamat.2022.118658
[7] C. Cai, X. Gao, Q. Teng, R. Kiran, J. Liu, Q. Wei, Y. Shi. Mater. Sci. Eng.: A **802**, 140426 (2021). https://doi.org/10.1016/j.msea.2020.140426
[8] K. Otsuka, X. Ren. Progr. Mater. Sci. **50**, *5*, 511 (2005). https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2004.10.001
[9] G.M. Muralikrishna, V.A. Esin, K.N. Kulkarni, B.S. Murty, G. Wilde, S.V. Divinski. Intermetallics **126**, 106920 (2020). https://doi.org/10.1016/j.intermet.2020.106920
[10] S.S. Bin Qasim, J. Ahmed, M. Karched, A. Al-Asfour. J. Mater. Sci.: Mater. Medicine **34**, *12*, 63 (2023). https://doi.org/10.1007/s10856-023-06767-7
[11] Y. Wang, G. Zou, L. Shang. Computat. Mater. Sci. **213**, 111635 (2022). https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2022.111635
[12] F. Ricci, S.E. Reyes-Lillo, S.A. Mack, J.B. Neaton. npj Computat. Mater. **10**, *1*, 15 (2024). https://doi.org/10.1038/s41524-023-01193-3
[13] Y. Cui, Y. Toku, Y. Kimura, Y. Ju. Computat. Mater. Sci. **188**, 110214 (2021). https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.110214
[14] P. Hirel. Computer Phys. Commun. **197**, 212 (2015). https://doi.org/10.1016/j.cpc.2015.07.012
[15] P. Plimpton. J. Computat. Phys. **117**, *1*, 1 (1995). https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039
[16] U.I. Yankovskaya, M.D. Starostenkov, A.V. Markidonov, A.M. Kazakov, E.A. Korznikova, P.V. Zakharov. J. Micromechanics. Molecular Phys. **9**, *2–3*, 99 (2024). https://doi.org/10.1142/S2424913024500139
[17] A. Stukowski. Modelling. Simulation. Mater. Sci. Eng. **18**, *1*, 015012 (2010). https://doi.org/10.1088/0965-0393/18/1/015012
[18] У.И. Янковская, М.Д. Старостенков, Н.Н. Медведев, П.В. Захаров. Компьютерные исследования и моделирование **16**, *5*, 1143 (2024). https://doi.org/10.20537/2076-7633-2024-16-5-1143-1162
[19] B. Faria, C. Guarda, N. Silvestre, J.N. Canangia Lopes. Composites Part B: Engineering **187**, 107836 (2020). https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2020.107836
[20] M.E. Suk. Molecules, **26**, *13*, 3947 (2021). https://doi.org/10.3390/molecules26133947
[21] C.Y. Maghfiroh, A. Arkundato, Misto, W. Maulina. J. Phys.: Conf. Ser. **1491**, *1*, 012022 (2020). https://doi.org/10.1088/1742-6596/1491/1/012022
[22] https://www.ctcms.nist.gov/potentials/

Редактор Е.В. Толстякова