

## Влияние геометрии поверхности пор пористого материала на механические свойства

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

Казанский (Приволжский) федеральный университет,  
420008 Казань, Россия  
e-mail: nikiforov121998@mail.ru

Поступило в Редакцию 3 мая 2024 г.

В окончательной редакции 4 августа 2024 г.

Принято к публикации 30 октября 2024 г.

Изучено влияние геометрии поверхности пор в пористом материале на его механические свойства, такие как модуль Юнга и предел прочности на растяжение. Исследование проведено методом моделирования молекулярной динамики на примере пористого никелида титана при значениях пористости 52, 62.5 и 73%. Показано, что материал с вогнутой поверхностью пор обладает лучшей сопротивляемостью внешним нагрузкам. Также проведен анализ различий в морфологии материалов с разной геометрией поверхности с помощью распределений линейных размеров пор и межпоровых перегородок.

**Ключевые слова:** пористый никелид титана, механические свойства, морфология пористой структуры.

DOI: 10.61011/JTF.2024.12.59234.395-24

### Введение

Пористые материалы активно изучаются и используются во многих отраслях промышленности и в медицине [1–3]. Например, пористые материалы с открытым типом пор используются для термоизоляции и в качестве катализаторов за счет повышенной удельной площади поверхности, в качестве материалов для имплантов за счет лучшей интеграции с живыми тканями. В дополнение к термоизоляционным свойствам материалы с закрытым типом пор используются для изготовления демпферов. Механические и физические свойства пористого материала определяются не только свойствами твердой матрицы, но и параметрами пористой системы. К таким параметрам относятся пористость, распределения линейных размеров пор и межпоровых перегородок, особенности морфологии. К особенностям морфологии можно отнести пространственное распределение твердой матрицы. Так, в работах [4,5] изучалась зависимость механических свойств от равномерности распределения твердой матрицы вдоль направления приложенной нагрузки. Было отмечено увеличение модуля Юнга, предела прочности при растяжении. В настоящей работе будет исследовано влияние такой особенности морфологии, как геометрия поверхности пор на механические свойства пористого никелида титана.

### 1. Детали моделирования

Методом моделирования молекулярной динамики были получены пористые системы, межпоровые перегородки которых имели как выпуклую поверхность, так и вогнутую (рис. 1). Отметим, что на практике морфология пористого материала с вогнутой по-

верхностью получается с помощью газовой инжекции в расплав [6–8]. Морфология с выпуклой поверхностью получается в результате спекания порошков [9]. Для каждой морфологии были смоделированы образцы с пористостью  $52.0 \pm 2.0\%$ ,  $62.5 \pm 2.5\%$ ,  $73.0 \pm 2.0\%$  с открытым типом пор. Пористые системы были получены с помощью удаления атомов из кристаллической основы. Для получения пористой структуры с вогнутой поверхностью пор из материала вырезались эллипсоиды с заданными линейными размерами случайным образом. При пористости выше 50% случайно вырезанные поры образуют сеть пересекающихся капилляров. Полученная морфология пористой структуры качественно повторяет морфологию пористых экспериментальных образцов [4,5]. При получении пористой структуры с выпуклой поверхностью пор из монолитной системы выделялась сеть пересекающихся нитей заданной толщины. Такие нити получались непрерывным последовательным наложением эллипсоидов вдоль случайной траектории. Атомы, лежащие за пределами сети нитей, удалялись. Это позволило приблизиться к качественному подобию морфологии пористой системы, полученной спеканием порошком. Все образцы были приведены в состояние равновесия в течение 100 ps в мартенситную фазу. Межатомное взаимодействие задавалось потенциалом 2NN MEAM [10]. Данный потенциал с хорошей точностью воспроизводит структуру и физические свойства никелида титана в широкой области давлений и температур [11,12]. Растяжение происходило вдоль оси  $Ox$  при температуре 300 K со скоростью деформации  $\dot{\epsilon} = 5 \cdot 10^9 \text{ s}^{-1}$  в NVT-ансамбле. Такой масштаб скоростей деформации является допустимым для метода моделирования молекулярной динамики.

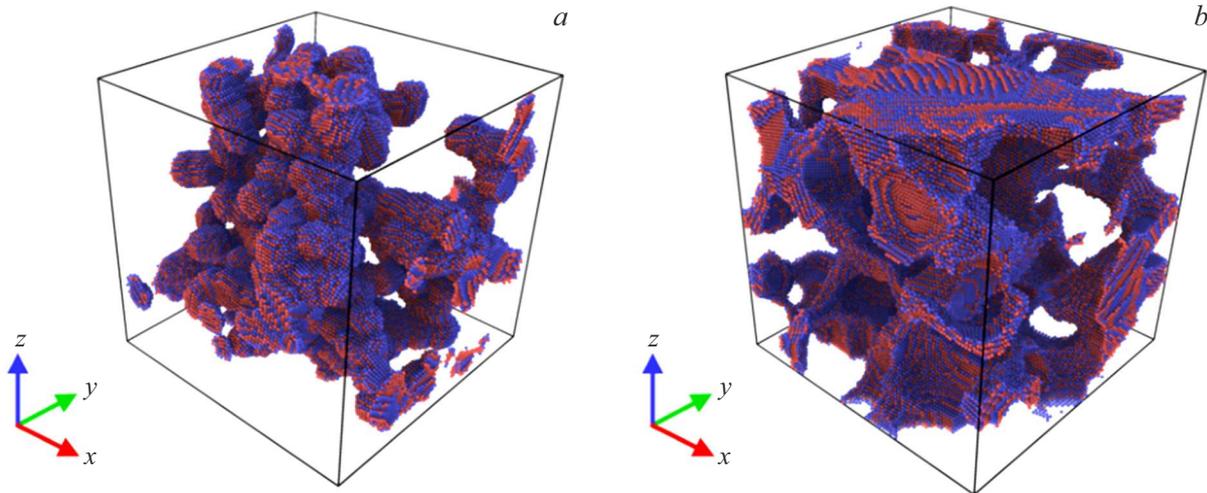


Рис. 1. Мгновенные снимки пористой системы с пористостью  $72.0 \pm 2.0\%$  с выпуклой (a) и с вогнутой (b) поверхностями.

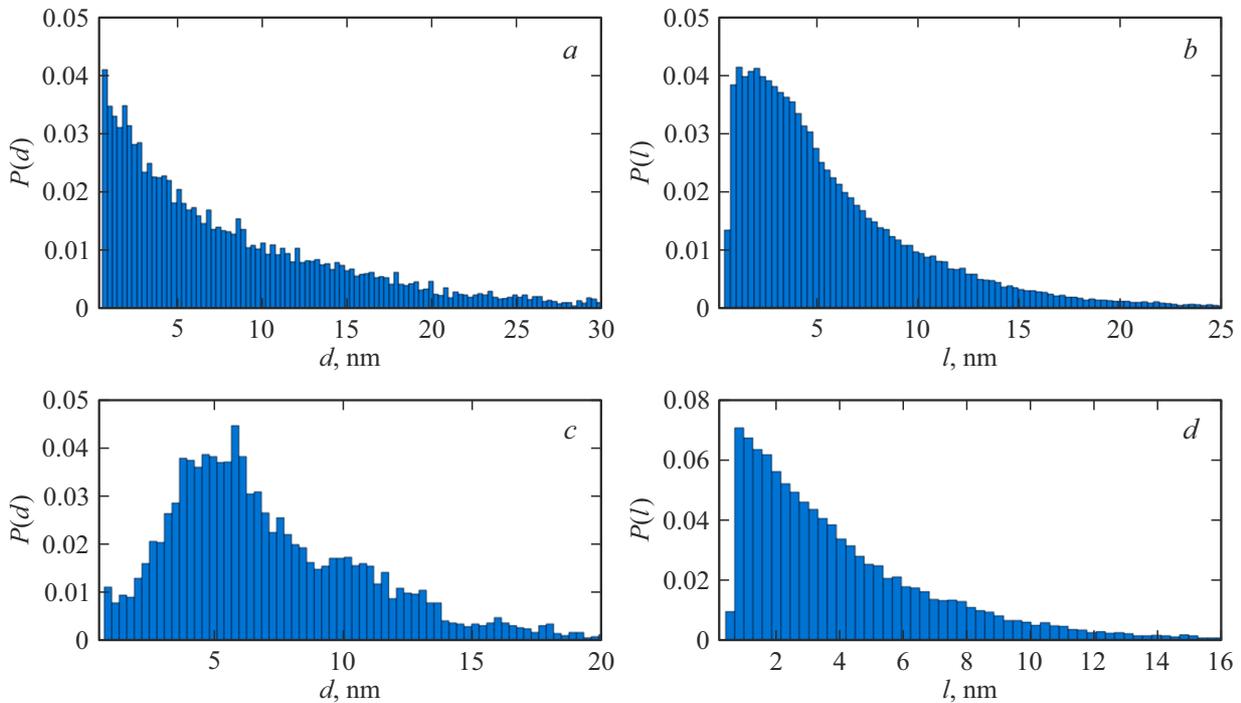


Рис. 2. Распределения линейных размеров пор  $P(d)$  и перегородок  $P(l)$  для систем ( $\phi = 62.5 \pm 2.5\%$ ) с выпуклой (a, b) и вогнутой (c, d) поверхностями.

## 2. Обсуждение результатов

Для полученных пористых систем были получены распределения линейных размеров пор  $d$  и межпоровых перегородок  $l$  (рис. 2) и их средние значения  $\bar{d}$  и  $\bar{l}$  соответственно (табл. 1). Средние значения линейных размеров пор  $\bar{d}$  и межпоровых перегородок  $\bar{l}$  непосредственно влияют на механические характеристики [13,14]. На основе данных, приведенных в табл. 1, можно заметить различие в средних линейных размерах пор и межпоровых перегородок для систем с одинаковой по-

ристостью, но разной кривизной поверхности пор. Так, при пористости  $52.0 \pm 2.0\%$  средний линейный размер пор для выпуклой поверхности пор на 20% меньше, чем для вогнутой. В свою очередь средние линейные размеры межпоровых перегородок одинаковы. Но при пористости  $62.5 \pm 2.5\%$  средний линейный размер пор для выпуклой поверхности пор на 21% больше, а средний линейный размер межпоровых перегородок больше на 41%. При пористости  $73.0 \pm 2.0\%$  тенденция вновь меняется. Средний линейный размер пор и межпоровых перегородок для выпуклой поверхности меньше на 6.5

**Таблица 1.** Параметры полученных пористых систем

| Геометрия поверхности | $\phi, \%$     | $\bar{d}, \text{nm}$ | $\bar{l}, \text{nm}$ |
|-----------------------|----------------|----------------------|----------------------|
| Вогнутая              | $52.0 \pm 2.0$ | 3.5                  | 3.6                  |
|                       | $62.5 \pm 2.5$ | 7.1                  | 4.1                  |
|                       | $73.0 \pm 2.0$ | 9.4                  | 4.3                  |
| Выпуклая              | $52.0 \pm 2.0$ | 2.8                  | 3.6                  |
|                       | $62.5 \pm 2.5$ | 8.6                  | 5.8                  |
|                       | $73.0 \pm 2.0$ | 8.8                  | 3.9                  |

**Таблица 2.** Механические характеристики полученных систем

| Геометрия поверхности | Пористость, %  | $E, \text{GPa}$ | $\sigma_{ult}, \text{GPa}$ |
|-----------------------|----------------|-----------------|----------------------------|
| Вогнутая              | $52.0 \pm 2.0$ | $16.2 \pm 0.67$ | $1.40 \pm 0.80$            |
|                       | $62.5 \pm 2.5$ | $12.6 \pm 2.63$ | $0.80 \pm 0.27$            |
|                       | $73.0 \pm 2.0$ | $3.20 \pm 1.74$ | $0.34 \pm 0.19$            |
| Выпуклая              | $52.0 \pm 2.0$ | $10.5 \pm 1.65$ | $0.80 \pm 0.20$            |
|                       | $62.5 \pm 2.5$ | $6.25 \pm 2.70$ | $0.69 \pm 0.20$            |
|                       | $73.0 \pm 2.0$ | $1.16 \pm 0.18$ | $0.24 \pm 0.02$            |

и 9.5% соответственно. На основе полученных данных в ходе настоящей работы корреляции между морфологией поверхности пористого материала и средних линейных размеров пор и межпоровых перегородок не выявлено. Последние в большей степени определяются значением пористости  $\phi$ . Но сама форма распределений линейных размеров пор и межпоровых перегородок отличается. Для систем с вогнутой поверхностью характерно наличие ярко выраженного куполообразного максимума для распределения линейных размеров пор. При этом распределение линейных размеров межпоровых перегородок характеризуется наличием преимущественно тонких перегородок, что обозначено монотонным спадом диаграммы. Для систем с выпуклой поверхностью характерна обратная ситуация, однако вершина купола на графике распределения размеров перегородок сдвинута в сторону меньших размеров.

В табл. 2 приведены значения модуля Юнга и предела прочности на растяжение. Модуль Юнга рассчитывался как тангенс угла наклона линейного участка диаграммы напряжение–деформация. Предел прочности определялся как максимальное значение напряжения на этой диаграмме. Было замечено, что указанные характеристики выше для случая вогнутой поверхности. Это может быть связано с тем, что пористая система с вогнутой поверхностью более разветвлена и отдельные участки твердой матрицы являются ребрами жесткости. Также было замечено, что отношение модуля Юнга системы

с вогнутой поверхностью к модулю Юнга системы с выпуклой поверхностью увеличивается с ростом пористости системы. Это может быть объяснено тем, что с ростом пористости твердая матрица с выпуклой поверхностью становится менее равномерной вдоль выделенного направления, что уменьшает общее сопротивление нагрузкам.

## Заключение

Показано, что геометрия поверхности пористого материала при фиксированной пористости не может быть явно определена только с помощью средних значений линейных размеров пор и межпоровых перегородок. Структурные отличия можно выявить, анализируя распределения линейных размеров указанных характеристик. Также обнаружено, что пористые материалы с вогнутой поверхностью обладают большими значениями модуля Юнга и предела прочности на растяжение, чем материалы с выпуклой поверхностью. Это может быть объяснено более разветвленной структурой твердой матрицы материала с вогнутой поверхностью и наличием в нем ребер жесткости.

## Финансирование работы

Работа выполнена в рамках программы „Приоритет-2030“.

## Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## Список литературы

- [1] A. Thomas. Nat. Commun., **11**, 4985 (2020). DOI: 10.1038/s41467-020-18746-5
- [2] B. Goyal, A. Pandey. Mater. Today: Proceedings, **46**, 8196 (2021). DOI: 10.1016/j.matpr.2021.03.163
- [3] S.G. Anikeev, N.V. Artyukhova, M.I. Kaftaranova, V.N. Khodorenko, A.S. Garin, E.S. Marchenko. Inorganic Mater., **59** (2), 123 (2022). DOI: 10.1134/S0020168523020012
- [4] G.A. Nikiforov, B.N. Galimzyanov, A.V. Mokshin. High Energy Chem., **57**, 137 (2023). DOI: 10.1134/S0018143923070287
- [5] Г.А. Никифоров, Б.Н. Галимзянов, А.В. Мокшин. ЖТФ, **93** (12), 1740 (2023). DOI: 10.61011/JTF.2023.12.56808.f217-23
- [6] N. Behymer, K. Morsi. Metals, **13** (5), 959 (2023). DOI: 10.3390/met13050959
- [7] B. Parveez, N.A. Jamal, H. Anuar, Y. Ahmad, A. Aabid, M. Baig. Materials (Basel), **15** (15), 5302 (2022). DOI: 10.3390/ma15155302
- [8] A.A. Tsygankov, B.N. Galimzyanov, A.V. Mokshin. J. Phys. Condens. Matter., **34** (41), 414003 (2022). DOI: 10.1088/1361-648X/ac8512

- [9] S.G. Anikeev, N.V. Artyukhova, A.V. Shabalina, S.A. Kulinich, V.N. Hodorenko, M.I. Kaftaranova, V.V. Promakhov, V.E. Gunter. *J. Alloys Compounds*, **900**, 163559 (2022). DOI: 10.1016/j.jallcom.2021.163559
- [10] W.-S. Ko, B. Grabowski, J. Neugebauer. *Phys. Rev. B*, **92**(134107), 1 (2015). DOI: 10.1103/PhysRevB.92.134107
- [11] J. Chen, D. Huo, H.K. Yeddu. *Mater. Res. Express*, **8**(106508), 1 (2021). DOI: 10.1088/2053-1591/ac2b57
- [12] J. Lee, Y.C. Shin. *Metals*, **11**, 1237 (2021). DOI: 10.3390/met11081237
- [13] Y.-T. Jian, Y. Yang, T. Tian, C. Stanford, X.-P. Zhang, K. Zhao. *PLoS ONE*, **10**(6), e0128138 (2015). DOI: 10.1371/journal.pone.0128138
- [15] B.N. Galimzyanov, G.A. Nikiforov, S.G. Anikeev, N.V. Artyukhova, A.V. Mokshin. *Crystals*, **13**(12), 1656 (2023). DOI: 10.3390/cryst13121656