

## 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\_u@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 ( $3.7\text{--}4.0\text{ g/cm}^3$ ), высокую удельную прочность, сохраняющуюся вплоть до температур  $700\text{--}800^\circ\text{C}$ , 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].

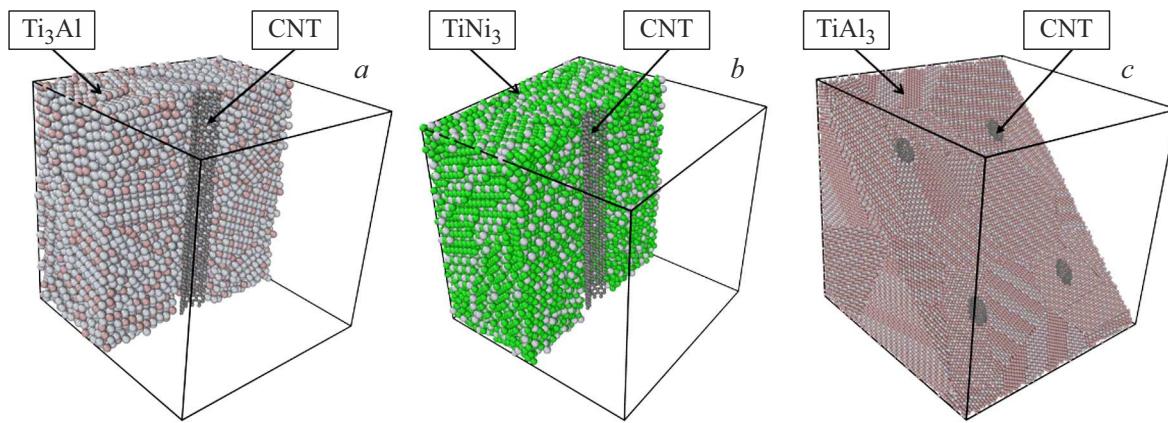
Современные стратегии улучшения свойств интерметаллидов на основе соединений Ti-Al включают несколь-

ко 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)  $\text{Ti}_3\text{Al}$ -CNT; b) схема армирования; c)  $\text{TiNi}_3$ -CNT; d)  $\text{TiAl}_3$ -CNT (со структурой L1<sub>2</sub>).

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 ( $\text{Ti}_3\text{Al}$ ,  $\text{TiAl}_3$  и  $\text{TiNi}_3$ ) методом молекулярно-динамического моделирования.

## 2. Моделирование и результаты

В рамках настоящего исследования модели поликристаллов  $\text{Ti}_3\text{Al}$  и  $\text{TiAl}_3$  со структурами D0<sub>22</sub> и L1<sub>2</sub>, а также поликристалла  $\text{TiNi}_3$  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 МЕАМ-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]):

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

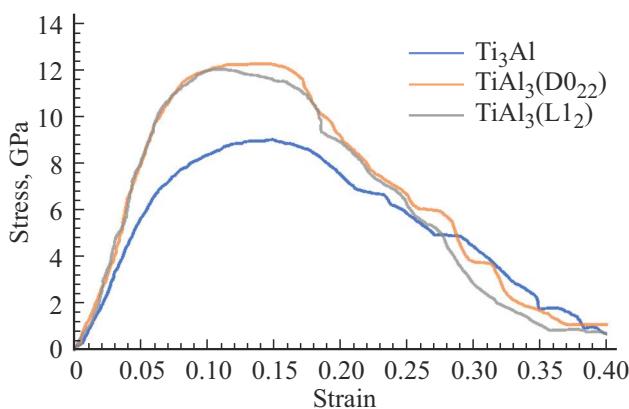
Для описания взаимодействия между атомами матрицы использовался подобранный в базе данных NIST [22] EAM потенциал. Полная энергия системы имеет вид:

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

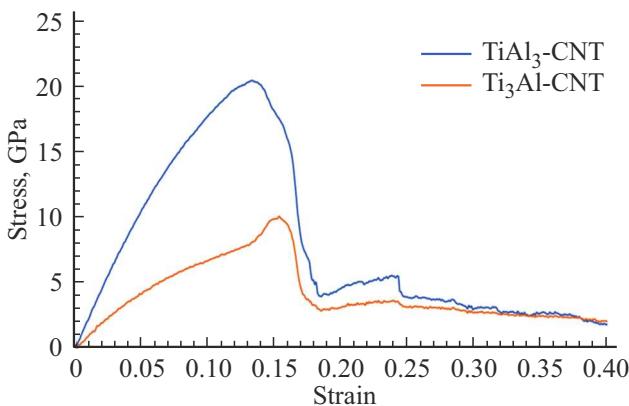
где  $E_{M-M}$  и  $E_{C-C}$  описывают потенциальные энергии металлической матрицы и углеродных наноматериалов соответственно, а  $E_{M-C}$  — взаимодействие между атомами металла и углерода. Уравнение для полной энергии системы приводится для демонстрации полноты используемого подхода, хотя в дальнейшем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

На рис. 2 приведен результат одноосного нагружения для поликристаллов  $\text{Ti}_3\text{Al}$  и  $\text{TiAl}_3$  в двух фазах: D0<sub>22</sub> и L1<sub>2</sub>. Механические свойства, такие как предел прочности и предел текучести, имеют более высокое значение для интерметаллида  $\text{TiAl}_3$ , причем для фазы D0<sub>22</sub> эти показатели немного выше. Что касается модуля Юнга, то значения отличаются незначительно: 109.81 GPa —  $\text{Ti}_3\text{Al}$ ; 115.91 GPa —  $\text{TiAl}_3$ .

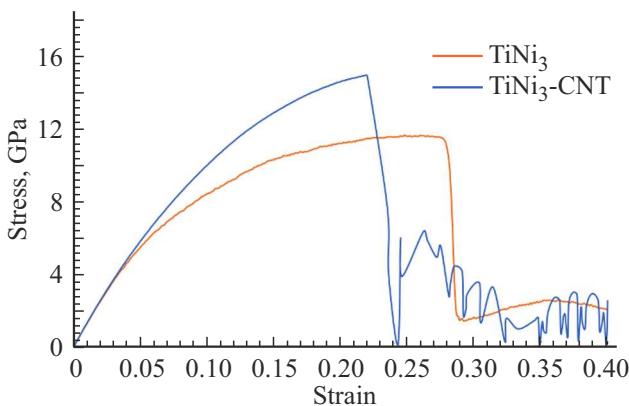
Дальнейшее исследование было нацелено на изучение армирующего эффекта УНТ. При внедрении 3 % объемной доли УНТ в композит были получены следующие



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



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



**Рис. 4.** Кривые напряжения/деформации при одноосном растяжении интерметаллида TiNi<sub>3</sub> и композита TiNi<sub>3</sub>-CNT.

результаты: модуль Юнга для композита Ti<sub>3</sub>Al-CNT составил 159.8 ГПа; для TiAl<sub>3</sub> — 215.81 ГПа. На рис. 3 представлен результат одноосного растяжения композитов. Предел прочности для композита Ti<sub>3</sub>Al-CNT по сравнению с „чистым“ поликристаллом увеличился

на незначительное значение на 0.5 %. Для композита TiAl<sub>3</sub>-CNT повышение предела прочности уже существенно — 43 %.

Атомистическое моделирование одноосного растяжения никелида титана и композита, армированного УНТ, проводилось при температуре 300 К 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<sub>3</sub> (фаза D0<sub>22</sub>) демонстрирует более высокие значения предела прочности и предела текучести по сравнению с Ti<sub>3</sub>Al, что согласуется с его более жесткой кристаллической структурой. При этом модуль Юнга обоих соединений оказался близким: 109.81 ГПа для Ti<sub>3</sub>Al и 115.91 ГПа для TiAl<sub>3</sub>. Введение 3–5 % объемной доли УНТ в матрицу интерметаллидов приводит к существенному улучшению их механических характеристик. Так, для TiAl<sub>3</sub>-УНТ наблюдается увеличение модуля Юнга на 86 % (до 215.81 ГПа) и предела прочности на 43 %. Для Ti<sub>3</sub>Al-УНТ модуль Юнга возрастает на 45 % (до 159.8 ГПа), однако предел прочности увеличивается незначительно (+0.5 %), что может быть связано с особенностями межатомного взаимодействия на границе „металлическая матрица — УНТ“.

В случае TiNi<sub>3</sub> 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<sub>3</sub>, 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