

РАЗРАБОТКА И ИЗГОТОВЛЕНИЕ МЕТОДОМ 3D ПЕЧАТИ ПОЛИКРИСТАЛЛОПОДОБНОЙ МЕЗОСТРУКТУРЫ

Топалов Э.В. (ИТМО) Научный руководитель – ведущий научный сотрудник Арсентьев М.Ю. (ИТМО)

Введение. В исследовании [1] показано, что метод, использующий в основе кристаллическую структуру материала (поликристаллический сплав) способен эффективно увеличивать удельные характеристики решетчатых мезоструктурных материалов. Кроме того, исследование макроструктур позволяет понимать сложные процессы, происходящие в поликристаллических сплавах. Такими параметрами как дислокации, зерна, фазы и выделения можно управлять пластической деформацией кристаллов. Сочетание металлургии и архитектурных материалов открывает новые возможности для проектирования и создания материалов с повышенными характеристиками.

Основная часть. В нашей работе для создания метаматериала в качестве исходной использовалась структура аллотропной модификации углерода *Pm3m* (пространственная группа #221) из базы данных Materials Project (mp-998866) [2]. С помощью программного пакета AtomsK [3], в котором используется разбиение методом Вороного, была создана модель поликристалла. Использовались следующие параметры: размер ячейки $15 \text{ \AA} \times 15 \text{ \AA} \times 15 \text{ \AA}$, случайное упорядочивание зерен, 4 зерна на ячейку. Далее с использованием программы VESTA было рассчитано распределение электронной плотности. Объект имеющий коэффициент заполнения 43% в формате STL был распечатан на 3D принтере с высоким разрешением, в частности, машины EOS Formiga P110. В процессе печати все структуры были напечатаны с размерами $7 \text{ см} \times 7 \text{ см} \times 7 \text{ см}$. Для достижения желаемых свойств был выбран полимер полиамид-12 (PA 2200, PA12) из-за его высокой эластичности и пластичности. Условия печати включали высоту слоя 100 мкм, температуру стола $169,5^\circ\text{C}$ и температуру камеры 150°C . В целях сравнения была спроектирована и изготовлена ячейка аналогичного размера в виде монокристалла.

Выводы. Оработана методика создания и изготовления методом 3D печати поликристаллоподобной мезоструктуры. Варьируя параметрами создаваемой поликристаллоподобной мезоструктуры, можно управлять конечными механическими макросвойствами материала. Топологические параметры метаматериала (угол, ориентация) межзеренной границы позволят оценить эффект на механические свойства. В свою очередь наш подход, вдохновленный кристаллами, может обеспечивать альтернативные способы изучения сложных явлений в металлургии.

Список использованных источников:

1. Pham, MS., Liu, C., Todd, I. et al. Damage-tolerant architected materials inspired by crystal microstructure // Nature – 2019. – № 565. – pp. 305–311.
2. Jain, A., Ong, S.P., Hautier, G., Chen, W., Richards, W.D., Dacek, S., Cholia, S., Gunter, D., Skinner, D., Ceder, G., Persson, K.A. The Materials Project: A materials genome approach to accelerating materials innovation // APL Materials. – 2013. – № 1(1). – P. 011002.
3. Hirel, P. AtomsK: A tool for manipulating and converting atomic data files // Comput. Phys. Comm. – 2015. – № 197. – pp. 212-219.