

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕФОРМИРОВАНИЯ И РАЗРУШЕНИЯ ЦИЛИНДРИЧЕСКИХ ОБРАЗЦОВ ИЗ НАНОТИТАНА С КЕРАМИЧЕСКИМ ПОКРЫТИЕМ НА ОСНОВЕ ДИОКСИДА ЦИРКОНИЯ ПРИ ЛОКАЛЬНЫХ ВОЗДЕЙСТВИЯХ

Б.Н. Семенов^{1,2}

¹Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Политехническая ул. 29, Санкт-Петербург 195251, Россия

²Санкт-Петербургский государственный университет,
Университетский пр.28, Санкт-Петербург 198504, Россия

e-mail: semenov@bs1892.spb.edu

Аннотация. Рассмотрено контактное взаимодействие упругого шарового штампа и титанового цилиндра с керамическим покрытием на основе диоксида циркония. Показано, что при контактном взаимодействии в покрытии возникают растягивающие напряжения, которые могут привести к растрескиванию покрытия. Исследована интенсивность этих напряжений в зависимости от упругих свойств шарового штампа, радиуса штампа и предела текучести титана. Показано, что наноструктурированный титан благодаря высокому пределу текучести предпочтительнее по сравнению с обычным крупнозернистым титаном для рассмотренной конструкции при локальных воздействиях.

1. Введение

Титан и титановые сплавы находят широкое применение в современной медицине в качестве имплантатов благодаря их высокой биосовместимости с окружающими тканями, а также небольшому модулю упругости. Следует отметить сравнительно невысокую прочность чистого классического титана по сравнению с высокопрочными титановыми сплавами, что ограничивает его применение. С другой стороны, недостатком высокопрочных титановых сплавов является содержание в них токсичных элементов, таких как никель, ванадий, кобальт. Поэтому разработка технологий по созданию высокопрочного чистого титана, обладающего высокой биологической совместимостью, явилась прорывом в создании нового класса имплантатов. Решение этой проблемы основывалось на интенсивной пластической деформации, в результате которой происходит формирование ультрамелкозернистой наноструктуры [1, 2]. Прочность и предел текучести полученного таким образом нанотитана превышает прочность и предел текучести исходного классического более чем в два раза [3-6].

Недостатком чистого титана при использовании в качестве имплантатов является его металлический цвет. Для повышения эстетических свойств металлического имплантата используются тонкие керамические покрытия, в частности, на основе диоксида циркония, обладающего высокой биосовместимостью и замечательными эстетическими свойствами: цвет, естественная прозрачность и т.п.

В силу высокого модуля упругости и малой прочности при изгибе и растяжении тонкого керамического покрытия при локальных нагрузках может происходить разрушение и его отслоение от основы. Известно, что адгезионная прочность покрытий, нанесенных на подложки из наноструктурированного титана, больше, чем покрытий, нанесенные на подложки из титана Grade 4 с размером зерна около 25 мкм. Однако в [7, 8] отмечается, что при индентировании, т.е. локальном нагружении, наблюдается растрескивание покрытий, осажденных на подложки из титана Grade 4 и подложки из наноструктурированного титана, при схожих нагрузках. Поэтому повышение прочности покрытия и адгезионной прочности являются первостепенной задачей. В обзоре [9] показано, что оксидная нанокерамика на базе ZrO_2 обладает повышенными физико-химическими свойствами (химической и термической стойкостью, механической прочностью, вакуумной плотностью и др.) по сравнению с керамикой, полученной обычно используемыми промышленными способами или методом твердофазного синтеза. В [10, 11] выявлена взаимосвязь дисперсности прекурсоров и механической прочности вышеуказанной керамики.

Целью данной работы является исследование деформирования и возможного разрушения нанокерамического покрытия на основе диоксида циркония, нанесенного на подложку из нанотитана, при локальном контактном нагружении.

2. Моделирование

В рамках рассматриваемой задачи методом конечных элементов исследовано напряженно-деформированное состояние цилиндра из нанотитана с покрытием из керамики на основе стабилизированного иттрием диоксида циркония при контактном взаимодействии с упругим шаром. Длина цилиндра – 25.5 мм, диаметр – 4.6 мм, толщина покрытия – 10 мкм. Выбранные для моделирования размеры цилиндра и покрытия соответствуют тем образцам из нанотитана, на которые наносилось керамическое покрытие



Рис. 1. Геометрическая модель.

Предполагается, что шар сжимается между двумя цилиндрами равномерно распределенными усилиями, приложенными к торцам цилиндров (Рис. 1). Равнодействующая усилий, приложенных к торцу, равна 100 Н и соответствует средней силе жевательных мышц человека [12, 13].

Учитывая осевую симметрию задачи и симметрию относительно плоскости, проходящей через центр шара параллельно торцам цилиндров, задача решалась в

пакете ANSYS с использованием восьмиузловых элементов PLANE 183 с опцией осесимметрии. Геометрия расчетной модели представлена на Рис. 2.

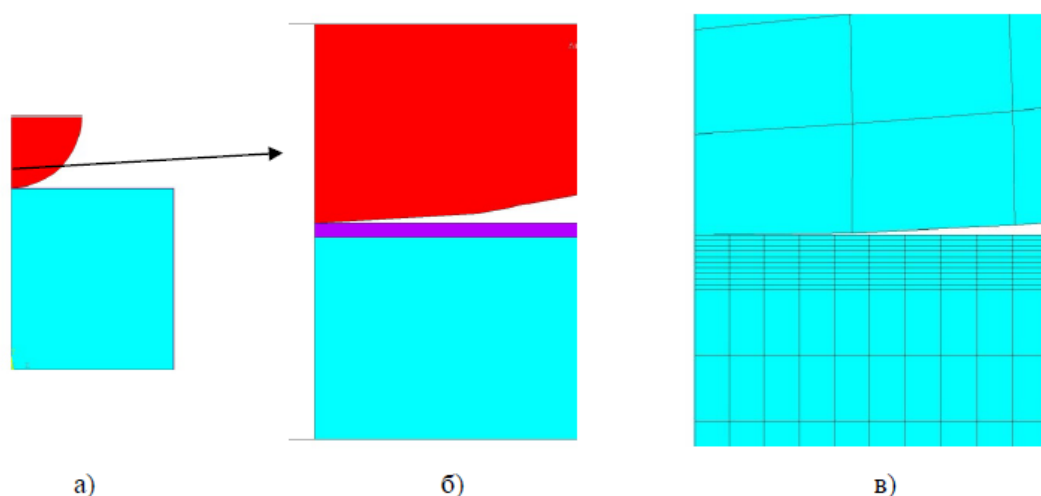


Рис. 2. Геометрия расчетной модели (а), увеличенный фрагмент геометрии в окрестности зоны контакта цилиндров с шаром (б), фрагмент конечно-элементного разбиения области в окрестности зоны контакта (в).

Размер элементов, на которые разбивалась расчетная область, обусловлен толщиной покрытия. Для обеспечения необходимой точности покрытие по толщине разбивалось на 10 элементов (Рис. 2в).

Для выяснения влияния механических свойств титана на напряженно-деформированное состояние в окрестности зоны контакта расчеты проводились для стандартного титана, ультрамелкозернистого титана и наноструктурированного титана Ti Grade 4, механические свойства которых представлены в Таблице 1 [5, 6].

Таблица 1. Механические свойства титана [6].

Материал	Механические свойства		Предел Выносливости σ_{-1} , МПа
	σ_B , МПа	$\sigma_{0,2}$, МПа	
Стандартный титан	460	400	252
Ультрамелкозернистый титан	816	800	403
Ti Grade 4	1300	1260	630

В Таблице 2 приведены механические свойства керамик, применяемых при протезировании.

Таблица 2. Физико-механические свойства керамик, применяемых при протезировании [14].

Характеристика	Материал		
	ZrO ₂ (Y ₂ O ₃)	Al ₂ O ₃ - ZrO ₂	Al ₂ O ₃
Предел прочности при изгибе, МПа	750 - 1050	550 - 750	300 - 350
Модуль Юнга, ГПа	200 - 210	310 - 340	370 - 380
Твердость по Виккерсу, ГПа	12 - 13	15 - 17	19 - 21
Трещиностойкость, МПа м ^{1/2}	8,0 - 10,0	6,0 - 8,0	3,0 - 3,5

Сравнение механических параметров этих материалов дает основание утверждать, что диоксид циркония, стабилизированный иттрием, предпочтительнее остальных материалов [14, 15]. Кроме этого, следует отметить, что диоксид циркония является биологически инертным и гипоаллергенным материалом. Поэтому в расчетной модели в качестве покрытия выбирался диоксид циркония.

Приложение локализованной нагрузки к внешней стороне покрытия приводит к изгибу покрытия в окрестности зоны приложения нагрузки. Глубина прогиба, его протяженность зависят от свойств основного материала (титана), а также механических и геометрических характеристик штампа. Причем из-за малой толщины покрытия и, как следствие, его малой изгибной жесткости, влияние основного материала на напряженно-деформированное состояние в окрестности зоны контакта существенно. Материал покрытия является хрупким, имеющим невысокую прочность при растяжении, поэтому выявление зон и уровня максимальных растягивающих напряжений является важным для оценки возможного разрушения покрытия. Наиболее опасными для разрушения являются зоны растяжения вблизи внешней поверхности покрытия, т.к. вблизи интерфейса «покрытие – титан» развитие микротрещин стеснено наличием титана и интенсивность растягивающих напряжений ниже.

Размер зоны контакта, прогиб покрытия и интенсивность возникающих в нем растягивающих напряжений зависят не только от свойств титана и покрытия, но и от геометрии и упругих свойств штампа.

Для выявления наиболее опасных ситуаций, которые могут привести к разрушению, были проведены 3 серии вычислительных экспериментов:

1. При постоянной приложенной сжимающей силе 100 Н и фиксированном радиусе жесткого штампа 1 мм проводился анализ напряженно-деформированного состояния для стандартного титана, ультрамелкозернистого и типа Ti Grade 4 и выявлялись зоны максимальных растягивающих напряжений (Табл. 1).
2. При выбранном в качестве основного материала Ti Grade 4 и при заданной геометрии ($R=1$ мм) штампа исследовалось влияние упругого модуля штампа на напряженно-деформированное состояние. Расчеты проводились для следующих значений модуля Юнга материала штампа $E=3.8 \cdot 10^{11}$, $1.0 \cdot 10^{11}$, $0.8 \cdot 10^{11}$, $0.4 \cdot 10^{11}$, $0.2 \cdot 10^{11}$, $0.1 \cdot 10^{11}$ Па.
3. Проведен анализ влияния радиуса штампа на напряженно-деформированное состояние в окрестности контакта.

3. Анализ результатов

Из результатов проделанных вычислительных экспериментов следует, что поля напряжений и деформаций локализованы в сравнительно небольшой области вблизи зоны контакта и наибольшего значения растягивающие напряжения достигают на внешней поверхности покрытия вблизи границы контакта в точках максимальной положительной кривизны поверхности.

В Табл. 3 приведены результаты анализа напряженно-деформированного состояния в окрестности зоны контакта для стандартного титана, ультрамелкозернистого титана и титана Ti Grade 4 (Табл. 1). Показано, при контактом воздействии упругого штампа с модулем упругости 100 ГПа радиуса 1 мм в титане под покрытием в окрестности зоны контакта при приложении к штампу силы в 100 Н материал переходит в пластическое состояние. Прослеживается явная зависимость размера зоны контакта, максимальных растягивающих напряжений, величины пластических деформаций и размера зоны пластичности от предела текучести титана (Табл. 3). Это связано с тем, что эффективная изгибная жесткость покрытия, лежащего на подложке, уменьшается при возникновении пластических зон в подложке под

штампом. Следствием этого является увеличение прогиба, а т.к. пластическая зона шире площадки контакта, увеличивается кривизна верхней поверхности покрытия и максимальные растягивающие напряжения. Увеличение предела текучести титана приводит к повышению эффективной изгибной жесткости покрытия и, как следствие, уменьшению максимальных растягивающих напряжений

Таблица 3. Зависимость максимальных растягивающих напряжений (σ_{max}), радиуса зоны контакта (R_{cont}), радиуса линии максимальных растягивающих напряжений на поверхности покрытия (R_{max}), величины максимальных пластических деформаций (ε_{plast}) и ширины зоны пластичности (R_{plast}) от предела текучести титана ($\sigma_{0,2}$).

	$\sigma_{0,2}$, МПа	σ_{max} , МПа	R_{cont} , мм	R_{max} , мм	ε_{plast}	R_{plast} , мм
1	400	5307	0.158	0.162	0.0577	0.228
2	800	3236	0.130	0.133	0.0381	0.154
3	1200	2201	0.116	0.119	0.0264	0.126

Возникновение пластических деформаций в титане вблизи покрытия является негативным явлением, т.к. при разгрузке система не возвращается в исходное состояние и повторные нагружения могут привести к усталостному разрушению.

Следует также отметить, что для всех трех материалов при заданной нагрузке в 100 Н и фиксированной геометрии штампа ($R_{stamp}=1$ мм) максимальные растягивающие напряжения превышают предел прочности покрытия, т.е. в окрестности зоны контакта происходит растрескивание покрытия с внешней стороны, что и наблюдалось при индентировании керамического покрытия на титановой подложке [7, 8].

На Рис. 3 приведены зоны пластических деформаций под штампом в цилиндре из классического титана с пределом текучести 400 МПа.

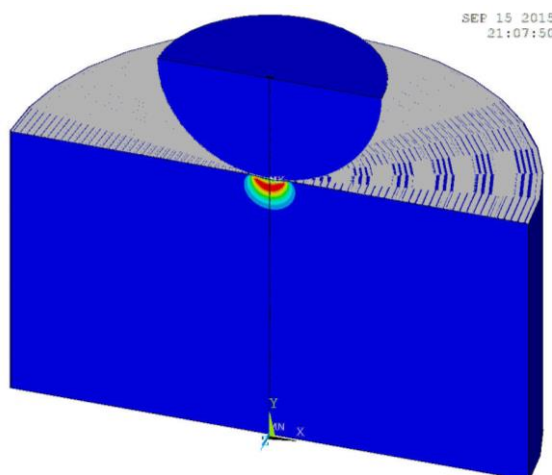


Рис. 3. Зоны пластических деформаций под штампом в цилиндре из классического титана с пределом текучести 400 МПа.

На Рис. 4 представлено распределение максимальных растягивающих напряжений в покрытии вблизи зоны контакта упругого штампа и титанового цилиндра с керамическим покрытием.

Значения и ширина зоны максимальных пластических деформаций, значения максимальных растягивающих напряжений для всех рассмотренных при моделировании случаев приведены в Табл. 3, Табл. 4, Табл. 5.

При контактном взаимодействии упругого шарового штампа с титановым

цилиндром с керамическим покрытием наблюдается сильная зависимость размера площадки контакта (R_{cont}), максимальных растягивающих напряжений (σ_{max}) и пластических деформаций (ϵ_{plast}) от упругого модуля штампа (E_{stamp}). В Табл. 4 приведены результаты моделирования контактного взаимодействия упругого штампа с цилиндром из наноструктурированного титана Ti Grade 4 с покрытием диоксида циркония стабилизированного иттрием (свойства приведены в Табл. 1 и Табл. 2)

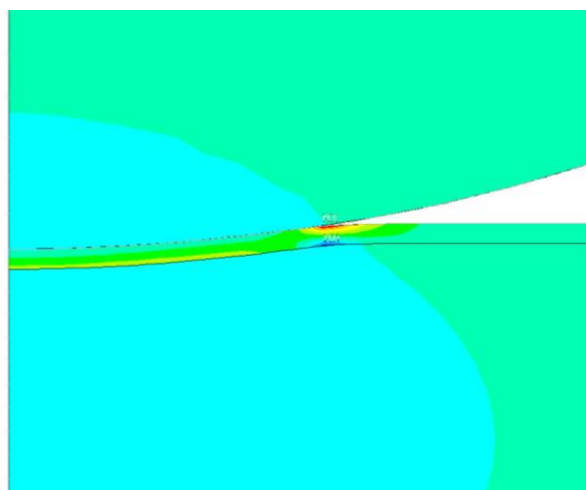


Рис. 4. Зона максимальных растягивающих напряжений в окрестности контакта

Упругое деформирование штампа приводит к увеличению площадки контакта. Вследствие этого уменьшается максимальное растягивающее напряжение, величина пластических деформаций и размеры зоны пластических деформаций. При модуле упругости меньше 40 ГПа при нагрузке на штамп 100 Н максимальные растягивающие напряжения на поверхности покрытия не достигают предела прочности, а пластические деформации настолько малы, что их влиянием на изменение геометрии после разгрузки можно пренебречь.

Таблица 4. Зависимость максимальных растягивающих напряжений (σ_{max}), радиуса линии максимальных растягивающих напряжений на поверхности покрытия (R_{max}), радиуса зоны контакта (R_{cont}), величины максимальных пластических деформаций (ϵ_{plast}) и ширины зоны пластичности (R_{plast}) от упругого модуля шарового штампа (E_{stamp}).

	$\sigma_{0,2}$, МПа	E_{stamp} , ГПа	σ_{max} , МПа	R_{max} , мм	R_{cont} , мм	ϵ_{plast}	R_{plast} , мм
1	1200	380	3471	0.112	0.109	0.03420	0.126
2	1200	100	2201	0.119	0.116	0.02641	0.126
3	1200	80	1773	0.126	0.123	0.023658	0.126
4	1200	40	1059	0.133	0.130	0.01147	0.105
5	1200	20	682	0.162	0.158	0.0000121	0.0126
6	1200	10	531	0.258	0.239	0	0

При увеличении радиуса жесткого шарового штампа при нагружении фиксированной силой 100Н происходит увеличение площадки контакта, уменьшение максимальной растягивающей силы на поверхности покрытия и уменьшение пластических деформаций. Результаты моделирования для жесткого штампа с радиусами $R_{stamp}=1$ мм, 2.4 мм, 4.8 мм, 9.6 мм, действующего на цилиндр из

наноструктурированного титана Ti Grade 4 с покрытием диоксида циркония, стабилизированного иттрием, приведены в Табл. 5.

Таблица 5. Зависимость максимальных растягивающих напряжений (σ_{max}), радиуса линии максимальных растягивающих напряжений на поверхности покрытия (R_{max}), радиуса зоны контакта (R_{cont}), величины максимальных пластических деформаций (ϵ_{plast}) и ширины зоны пластичности (R_{plast}) от радиуса шарового штампа (R_{stamp}).

	Радиус штампа R_{stamp} , мм	Модуль штампа, ГПа	σ_{max} , МПа	R_{max} , мм	R_{cont} , мм	ϵ_{plast}	R_{plast} , мм
1	1.0	1000	3416	0.115	0.110	0.036615	0.134
2	2.4	1000	1204	0.134	0.125	0.013376	0.134
3	4.8	1000	572	0.153	0.144	0.00231	0.0958
4	9.6	1000	355	0.192	0.182	0	0

Заметим, что уже для радиуса штампа 2.4 мм при нагрузке 100 Н, действующей на штамп максимальные, растягивающие напряжения в покрытии меньше предела прочности, т.е. растрескивание покрытие не наблюдается.

4. Заключение

В [16] было показано, что при приложении нагрузки, равномерно распределенной по торцу титанового цилиндра с керамическим покрытием, разрушающее напряжение достигается на границе основание цилиндра - керамическое покрытие при силе более 5000 Н, приложенной к штампу вблизи боковой поверхности цилиндра.

При действии локальных нагрузок, в частности, контактных, напряженно-деформированное состояние титанового цилиндра с керамическим покрытием существенно зависит от свойств титана, штампа и радиуса кривизны штампа. Вблизи зоны контакта на внешней поверхности покрытия возникают растягивающие напряжения, которые при сравнительно небольших нагрузках, порядка 100 Н, могут достигать предельных значений и вызывать растрескивание покрытия вблизи зоны нагружения. Повысить прочность системы “титановый цилиндр с керамическим покрытием” можно используя наноструктурированный титан Ti Grade 4, имеющий высокий предел текучести, и керамическое покрытие из диоксида циркония стабилизированного иттрием, характеризующегося высокими показателями прочности и трещиностойкости, которые обусловлены трансформационным переходом метастабильной тетрагональной модификации в стабильную моноклинную.

При уменьшении жесткости штампа и увеличении его радиуса интенсивность максимальных растягивающих напряжений в покрытии значительно снижается и растрескивание покрытия не происходит.

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 14-29-00199).

Литература

- [1] Р.З. Валиев, И.П. Семенова, В.В. Латыш, А.В. Щербаков, Е.Б. Якушина // *Российские нанотехнологии* **3(9)** (2008) 80.
- [2] R.Z. Valiev, I.P. Semenova, V.V. Latysh, H. Rack, T.C. Lowe, J. Petruzela, L. Dluhos, D. Hrusak, J. Sochova // *Advanced Engineering Materials* **10(8)** (2008) B15.
- [3] M. Greger, M. Černý, L. Kander, J. Kliber // *METABK* **48(4)** (2009) 249.
- [4] M. Greger, R. Kocich, M. Černý, L. Kander, In: *Metal 2009* (Hradec nad Moravicí, 19-

21. 05. 2009), p. 1.
- [5] I. Bernáthová, M. Bursák // *METABK* **50(4)** (2011) 249.
- [6] У.Ф. Мухаметов, Д.Ю. Рыбалко, В.В. Латыш, И.В. Кандаров, В сб.: *Труды всероссийской научной конференции «Клиническая анатомия и экспериментальная хирургия в XXI веке»* (г. Оренбург, 2009), с. 213.
- [7] М.И. Петржик, Е.А. Левашов // *Кристаллография* **52(6)** (2007) 1002.
- [8] М.Я. Тюрина, М.И. Петржик, Е.А. Левашов, В Сб.: *II Всероссийская конференция «Многомасштабное моделирование процессов и структур в нанотехнологиях»*. Сборник тезисов докладов (МИФИ, Москва, 2009).
- [9] N.N. Novik, V.G. Konakov, I.Yu. Archakov // *Reviews on Advanced Materials Science* **40** (2015) 188.
- [10] В.Г. Конаков, С.Н. Голубев, Е.Н. Соловьева, И.Ю. Арчаков, Н.В. Борисова, А.В. Шорохов // *Materials Physics and Mechanics* **14** (2012) 1.
- [11] V.G. Konakov, S. Sea, E.N. Soloviev, M.M. Pivovarov, S.N. Golubev, A.V. Shorochov // *Reviews on Advanced Materials Science* **13** (2006) 71.
- [12] <http://biofile.ru/bio/16436.html>
- [13] Е.Н. Жулев, *Несъемные протезы: Теория, клиника и лабораторная техника* (Изд-во НГМД, Н. Новгород, 1995).
- [14] <http://www.virial.ru/materials/95/>
- [15] С.В. Белов, М.А. Борик, В.Т. Бублик, М.А. Вишнякова, Ю.К. Данилейко, А.В. Кулебякин, Е.Е. Ломонова, Ф.О. Милович, В.А. Мызина, В.В. Осико, В.А. Салюк, Н.Ю. Табачкова // *Доклады АН* **450(1)** (2013) 32.
- [16] Б.Н. Семенов // *Materials Physics and Mechanics* **21** (2014) 299.

MODELING OF DEFORMATION AND FRACTURE OF NANOTITAN CYLINDER SPECIMENS COATED BY NANOCERAMIC ON THE BASIS OF ZIRCONIUM DIOXIDE UNDER LOCAL IMPACTS

B.N. Semenov^{1,2}

¹Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,
Polytechnicheskaya st. 29, St. Petersburg, 195251, Russia

²St. Petersburg State University,
Universitetskii pr. 28, Staryi Peterhof, St. Petersburg, 198504, Russia
e-mail: semenov@bs1892.spb.edu

Abstract. Contact of an elastic ball stamp and a titanium cylinder with a ceramic coating based on zirconium dioxide is considered. It is shown that at contact interaction tensile stresses occur in the coating, which can lead to cracking of the coating. The dependencies of the intensity of these stresses on the elastic properties of the spherical stamp, stamp radius and the yield strength of titanium are examined. It is shown that nano-titanium due to its high yield strength is preferable at the local impacts, as compared to conventional coarse-grained titanium for such designs.

Acknowledgement

This work was supported by the Russian Science Foundation (Research Project 14-29-00199).

References

- [1] R.Z. Valiev, I.P. Semenova, V.V. Latysh, A.V. Shcherbakov, E.B. Yakushina // *Nanotechnologies in Russia* **3(9)** (2008) 593.
- [2] R.Z. Valiev, I.P. Semenova, V.V. Latysh, H. Rack, T.C. Lowe, J. Petruzelka, L. Dluhos, D. Hrusak, J. Sochova // *Advanced Engineering Materials* **10(8)** (2008) B15.
- [3] M. Greger, M. Černý, L. Kander, J. Kliber // *METABK* **48(4)** (2009) 249.
- [4] M. Greger, R. Kocich, M. Černý, L. Kander, In: *Metal* 2009 (Hradec nad Moravicí, 19.-21. 5. 2009), p. 1.
- [5] I. Bernáthová, M. Bursák // *METABK* **50(4)** (2011) 249.
- [6] V.F. Mukhametov, D.Y. Rybalko, V.V. Latysh, I.V. Cantarow, In: Proceedings of All-Russian Scientific Conference “Clinical Anatomy and Experimental Surgery in the XXIth Century” (Orenburg, 2009), p. 213.
- [7] M. I. Petrzhik, E.A. Levashov // *Crystallography Reports* **52(6)** (2007) 966.
- [8] M.J. Turina, M.I. Petrzhic, E.A. Levashov, In: The IIth All-Russian Conference “Multiscale modeling of processes and structures in nanotechnology”. The book of abstracts (MEPhI, Moscow, 2009), p. 492.
- [9] N.N. Novik, V.G. Konakov, I.Yu. Archakov // *Reviews on Advanced Materials Science* **40** (2015) 188.
- [10] V.G. Konakov, S.N. Golubev, E.N. Solovyeva, I.Yu. Archakov, N.V. Borisova, A.V. Shorokhov // *Materials Physics and Mechanics* **14** (2012) 1.
- [11] V.G. Konakov, S. Sea, E.N. Soloviev, M.M. Pivovarov, S.N. Golubev, A.V. Shorochov // *Reviews on Advanced Materials Science* **13** (2006) 71.
- [12] <http://biofile.ru/bio/16436.html>
- [13] E.N. Zhulev, *Fixed prosthesis: Theory, clinical and laboratory equipment* (Publishing House NGMD, N. Novgorod, 1995).
- [14] <http://www.virial.ru/materials/95/>
- [15] S.V. Belov, M.A. Borik, V.T. Bublik, M.A. Vishnyakova, Y.K. Danyleiko, A.V. Kulebyakin, E.E. Lomonova, F.O. Milović, V.A. Myzina, V.V. Osiko, V.A. Salyuk, N.Y. Tabakova // *Doklady Physics* **58(5)** (2013) 161.
- [16] B.N. Semenov // *Materials Physics and Mechanics* **21** (2014) 299.