

Электронные и механические свойства тройных титановых сплавов состава $\text{XY}_3\text{Ti}_{11}$

Ордабаев Адиль Ерженович

Студент (магистр)

Российский федеральный ядерный центр — Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, Саров, Россия

E-mail: adil.ordabaev04@gmail.com

Разработка биосовместимых титановых имплантатов требует создания сплавов с модулем Юнга, приближенным к показателям человеческой кости (~ 35 ГПа), что определяет актуальность поиска новых композиций с пониженной жесткостью. В работе в рамках модели «кластер плюс атом клея» выполнено теоретическое исследование электронных и механических свойств упорядоченных сплавов титана состава $\text{XY}_3\text{Ti}_{11}$ (где $X = \text{Sn, In}$; $Y = \text{Cr, Hf, V, W, Mo, Nb, Ta, Zr}$), а также композиций с заменой позиций X и Y . Расчеты проводились первопринципным методом проекционных присоединенных волн (PAW) с обменно-корреляционным функционалом в приближении PBE-GGA, реализованным в пакете VASP. Для полученных равновесных структур были рассчитаны упругие константы и модули (включая модуль Юнга), проведен анализ электронной структуры (плотности состояний), а также оценены термические свойства: температура Дебая, минимальная теплопроводность, анизотропия скорости звука и параметр Грюнайзена. Установлено, что все исследованные сплавы механически стабильны и характеризуются преимущественно металлическим типом связи. Показано, что значения модуля Юнга для всех композиций ниже, чем у чистого титана и сплава Ti-6Al-4V ; при этом сплавы $\text{InHf}_3\text{Ti}_{11}$ и $\text{SnHf}_3\text{Ti}_{11}$ демонстрируют модуль Юнга, близкий к целевому значению для костной ткани (менее 40 ГПа), что подтверждается корреляцией между пониженной жесткостью и низкой температурой Дебая. Полученные результаты позволяют прогнозировать составы для создания новых биосовместимых материалов с улучшенными механическими характеристиками.

Источники и литература

- 1) \Banerjee D. Perspectives on titanium science and technology / D. Banerjee, J. Williams // Acta Materialia. – 2013. – Vol. 61. – P. 844–879.
- 2) Zhang L. C. Surface modification of titanium and titanium alloys: technologies, developments, and future interests / L. C. Zhang, L. Y. Chen, L. Wang // Advanced Engineering Materials. – 2020. – Vol. 22, is. 5. – P. 1901258.
- 3) Williams J. C. Opportunities and issues in the application of titanium alloys for aerospace components / J. C. Williams, R. R. Boyer // Metals. – 2020. – Vol. 10, is. 6. – P. 705.
- 4) Biomedical materials: A review of titanium based alloys / F. A. Anene, C. N. A. Jaafar, I. Zainol [et al.] // Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C: Journal of Mechanical Engineering Science. – 2021. – Vol. 235, is. 19. – P. 3792–3805.
- 5) Poly(lactic-co-glycolic acid)-based composite bone-substitute materials / D. Zhao, T. Zhu, J. Li [et al.] // Bioactive Materials. – 2021. – Vol. 6. – P. 346–360.
- 6) Bakulin A.V., Kulkova S.E. Effect of impurities on the formation energy of point defects in the γ -TiAl alloy. J. Exp. Theor. Phys., 2018, 127 (6), 1046-1058.
- 7) Duan Y.H., Sun Y., Lu L. Thermodynamic properties and thermal conductivities of TiAl_3 -type intermetallics in Al–Pt–Ti system. Comput. Mater. Sci., 2013, 68, 229-233

Иллюстрации

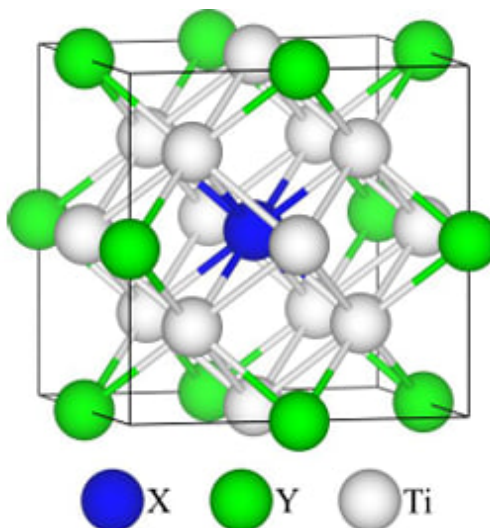


Рис. : Атомная структура упорядоченного сплава XY₃Ti₁₁

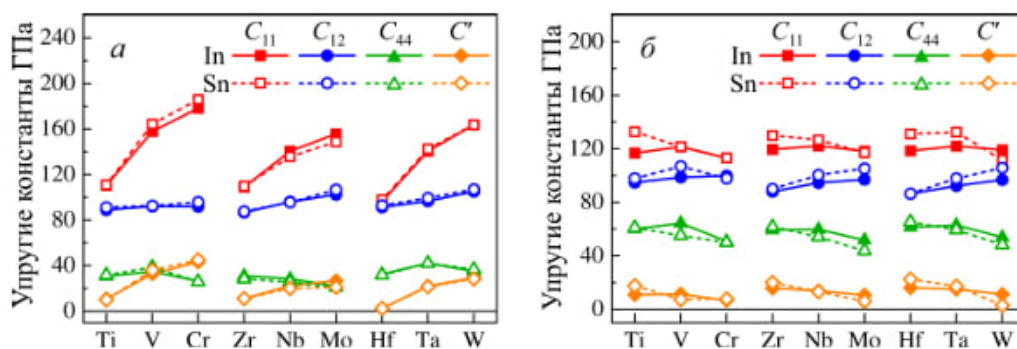


Рис. : Теоретические упругие константы сплавов XY₃Ti₁₁ в зависимости от числа валентных d-электронов переходных металлов.

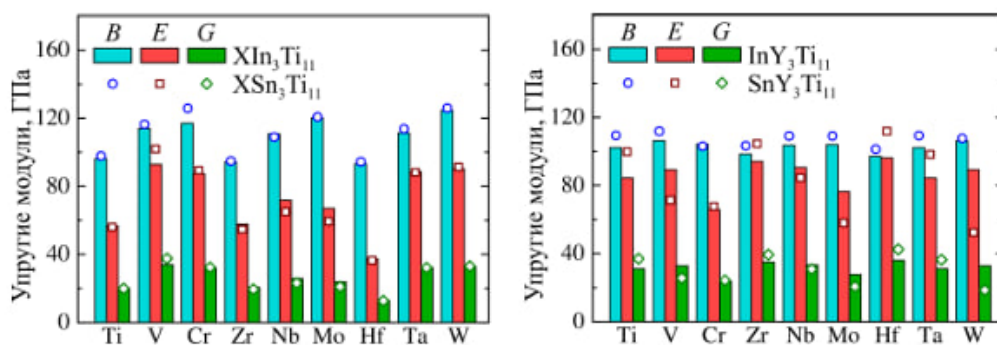


Рис. : Теоретические упругие модули в зависимости от числа валентных d-электронов в сплавах In(Sn)Y₃Ti₁₁ (а) и XIn(Sn)Y₃Ti₁₁ (б) с металлами IVB–VIB групп.

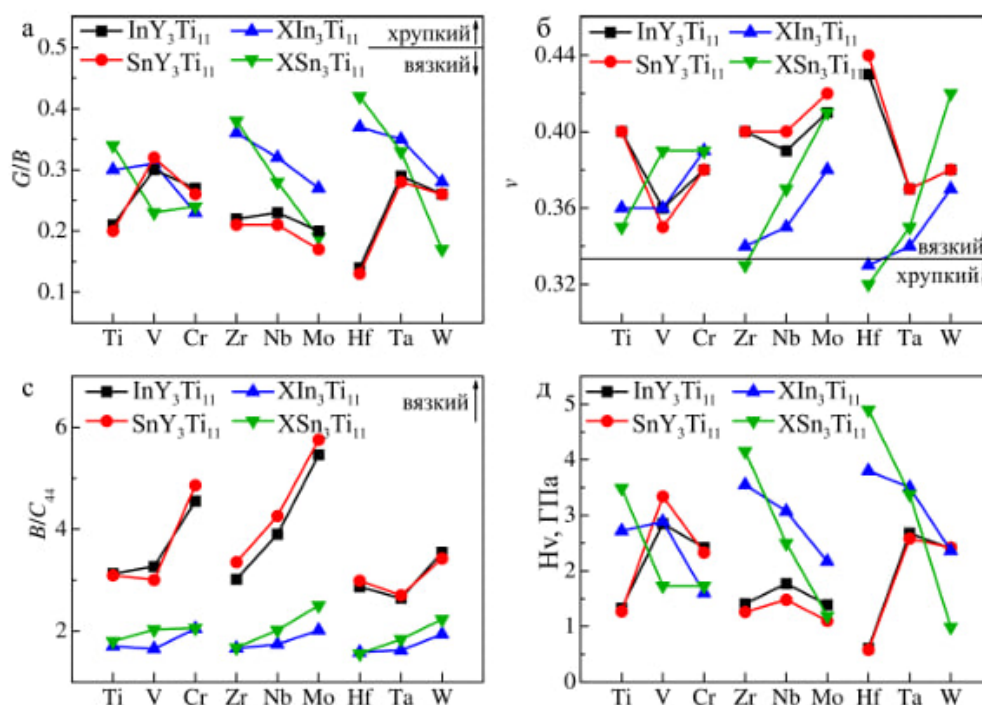


Рис. : Коэффициент Пуассона G/B (а), коэффициент Пуассона ν (б), B/C_{44} (с) и Hv (д) для сплавов $\text{In}(\text{Sn})\text{Y}_3\text{Ti}_{11}$ и $\text{XIn}(\text{Sn})_3\text{Ti}_{11}$.

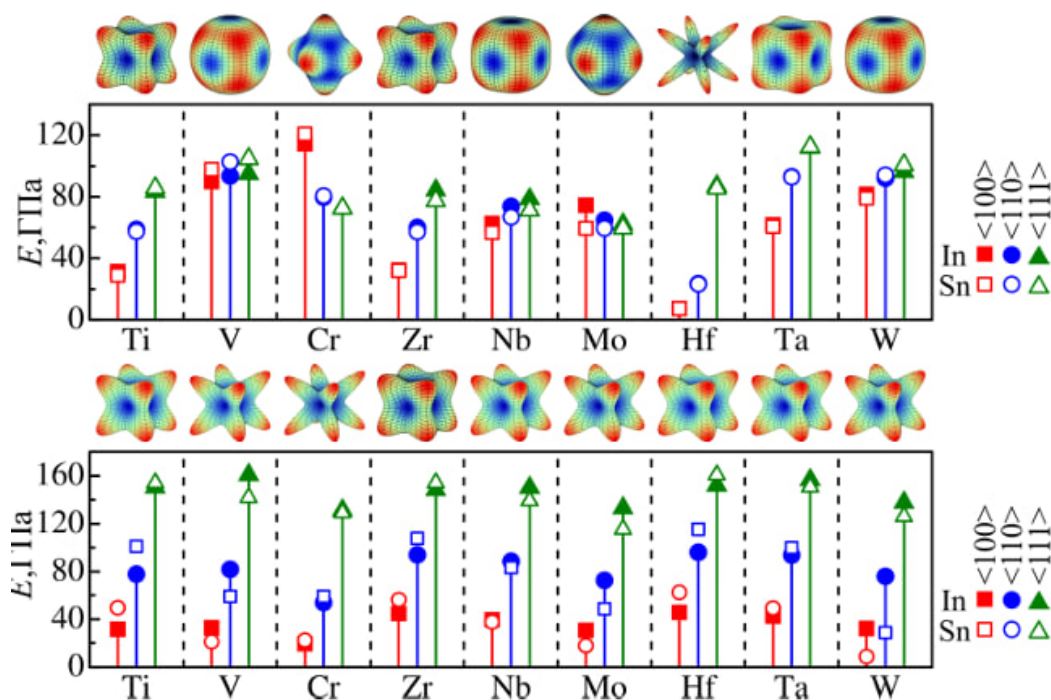


Рис. : Теоретические $E_{\langle ijk \rangle}$ в зависимости от числа валентных d-электронов в сериях сплавов $\text{In}(\text{Sn})\text{Y}_3\text{Ti}_{11}$ (сверху) и $\text{XIn}(\text{Sn})_3\text{Ti}_{11}$ (снизу)

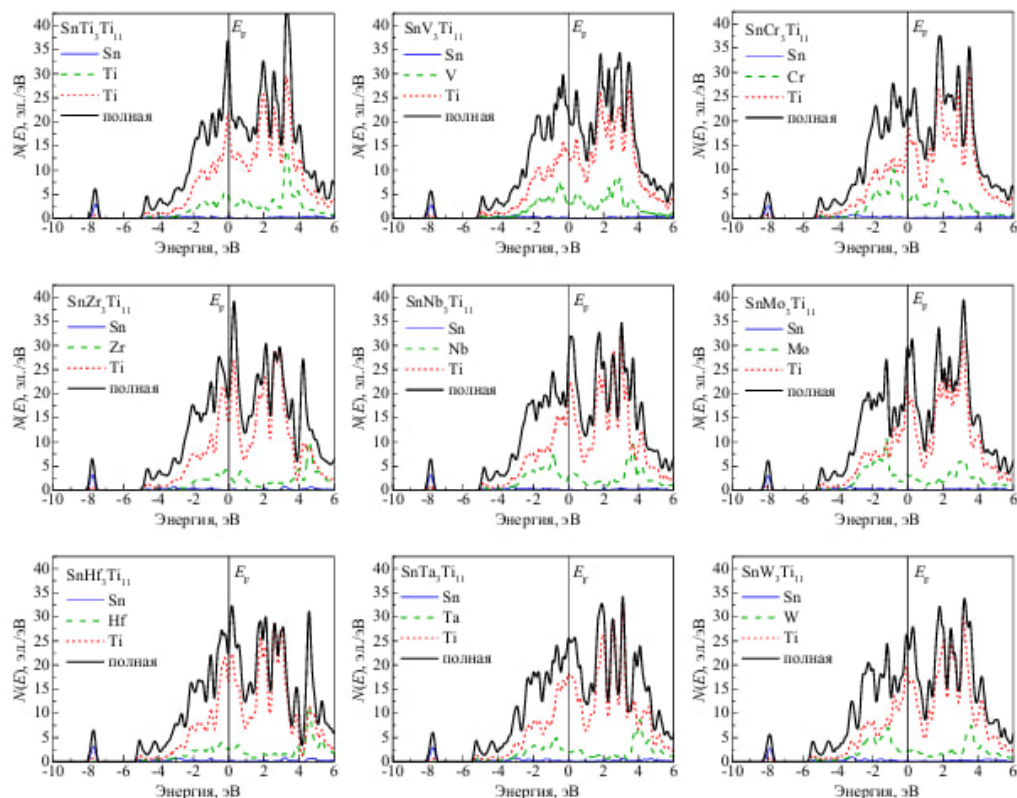


Рис. : ПЭС сплавов состава $\text{SnY}_3\text{Ti}_{11}$, где $Y = \text{V, Cr, Zr, Nb, Mo, Hf, Ta, W}$

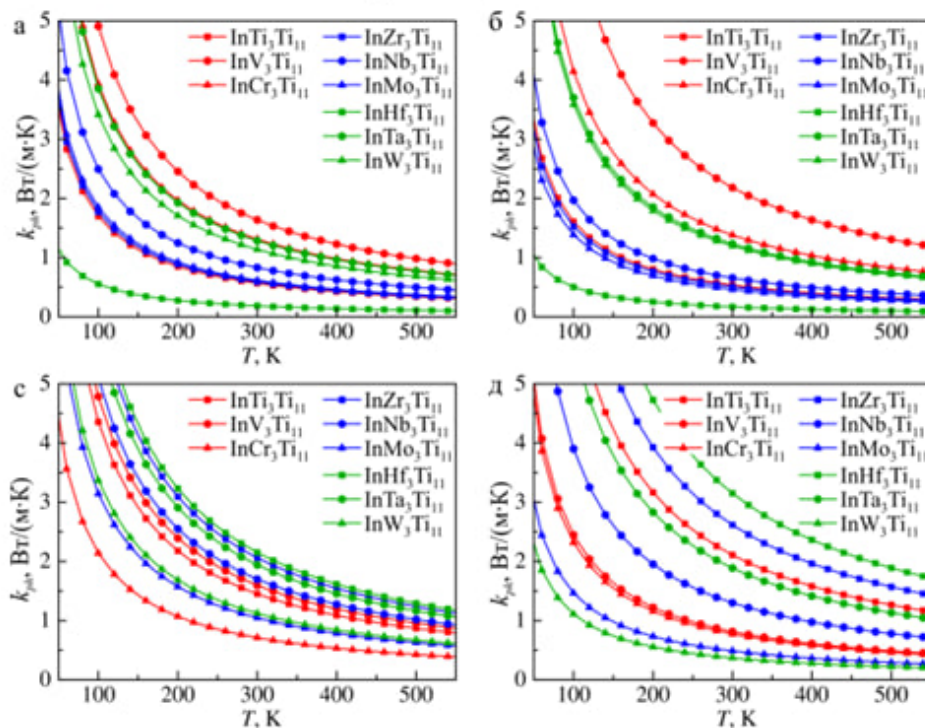


Рис. : Рассчитанные решеточные теплопроводности k_{ph} в диапазоне температур от 50 до 550 К для четырех серий сплавов: $\text{InY}_3\text{Ti}_{11}$ (а), $\text{SnY}_3\text{Ti}_{11}$ (б), $\text{XIn}_3\text{Ti}_{11}$ (с), $\text{XSn}_3\text{Ti}_{11}$ (д), где X и Y – элементы IVB–VIB групп.