

Электронные и механические свойства тройных титановых сплавов состава XY_3Ti_{11}

Ордабаев Адиль Ерженович

Выпускник (бакалавр)

Национальный исследовательский Томский государственный университет, Физический факультет, Томск, 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 XY_3Ti_{11} (где $X = Sn, In$; $Y = Cr, Hf, V, W, Mo, Nb, Ta, Zr$), 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 $InHf_3Ti_{11}$ и $SnHf_3Ti_{11}$ 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) VASP / The Vienna Ab initio Simulation Package: atomic scale materials modelling from first principles. – [Universität Wien], 2024. – URL: <https://www.vasp.at/> (дата обращения 20.12.2024).
- 3) Voigt W. Lehrbuch der Kristallphysik (mit Ausschluss der Kristalloptik) / W. Voigt. – Leipzig : Teubner, 1928. – 1005 p.
- 4) 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.

Иллюстрации

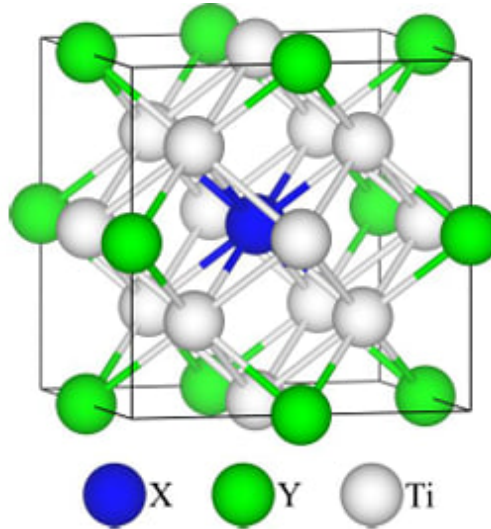


Рис. : Атомная структура упорядоченного сплава XY₃Ti₁₁

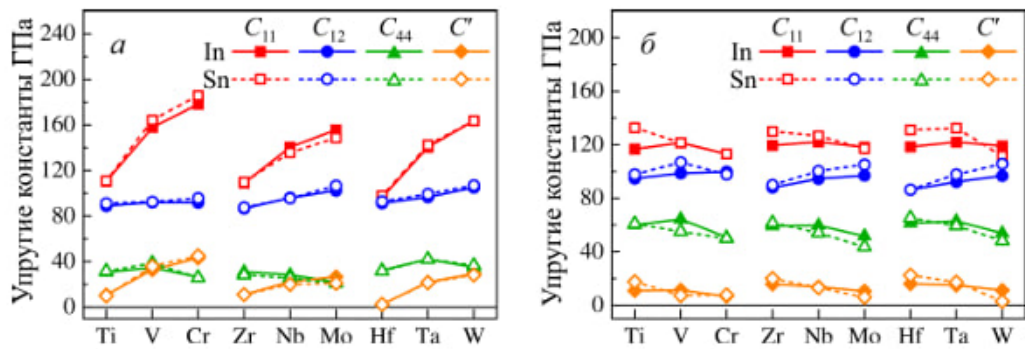


Рис. : Теоретические упругие константы сплавов XY₃Ti₁₁ в зависимости от числа валентных d-электронов переходных металлов.

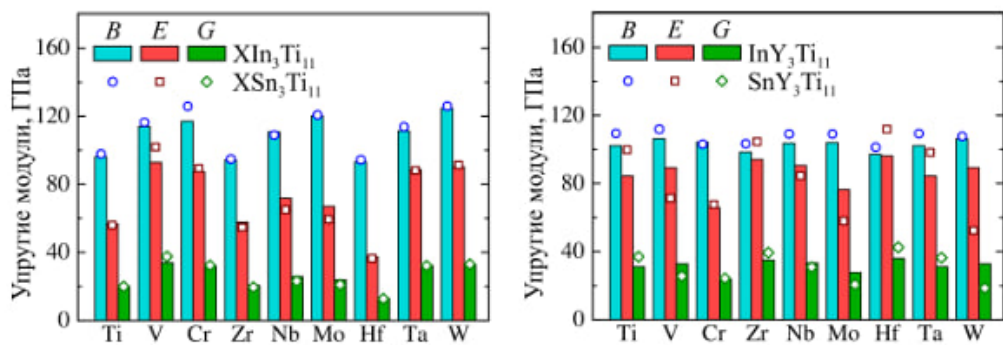


Рис. : Теоретические упругие модули в зависимости от числа валентных d-электронов в сплавах In(Sn)Y₃Ti₁₁ (а) и XIn(Sn)Y₃Ti₁₁ (б) с металлами IVB–VIB групп.

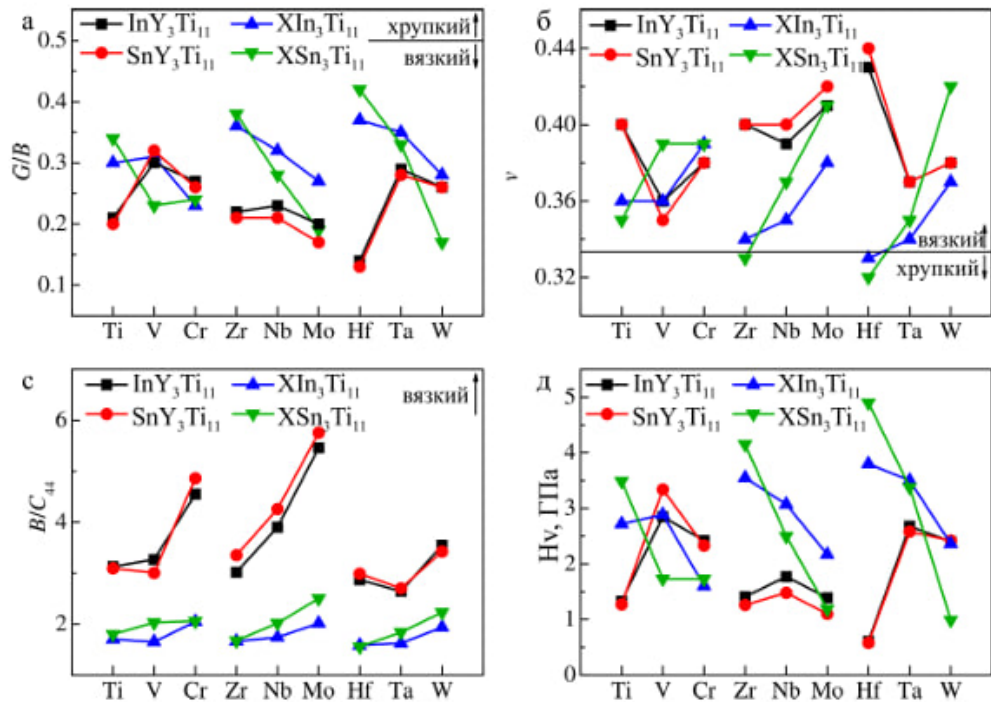


Рис. : Коэффициент Пью G/B (а), коэффициент Пуассона ν (б), B/C₄₄ (с) и HV (д) для сплавов $\text{In}(\text{Sn})\text{Y}_3\text{Ti}_{11}$ и $\text{XIn}(\text{Sn})_3\text{Ti}_{11}$.

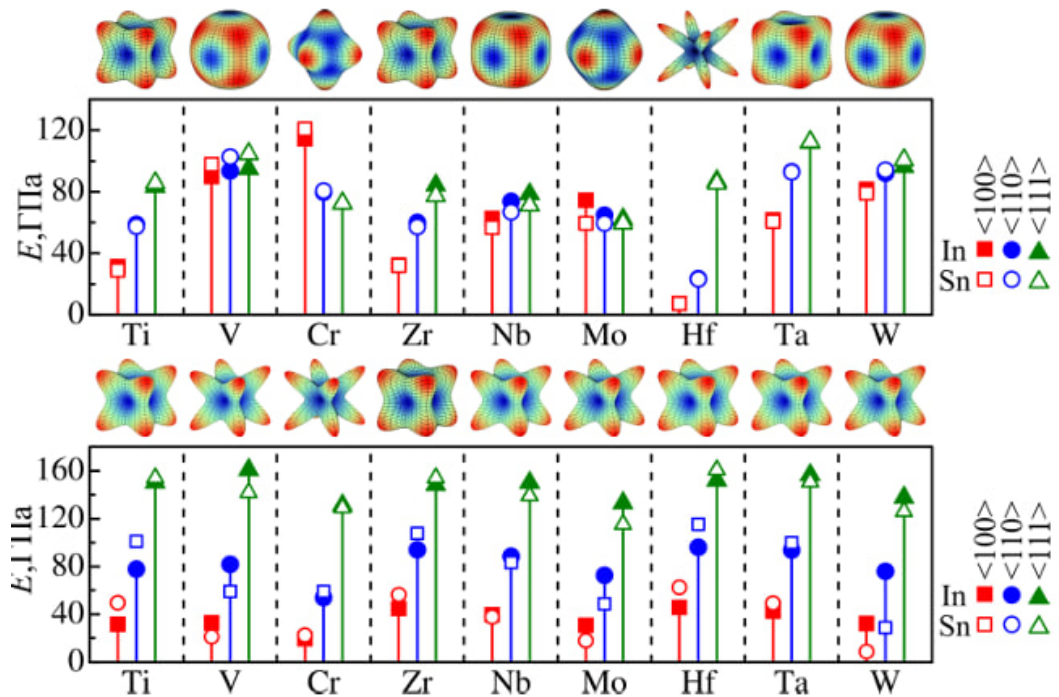


Рис. : Теоретические $E_{\langle ijk \rangle}$ в зависимости от числа валентных d-электронов в сериях сплавов $\text{In}(\text{Sn})\text{Y}_3\text{Ti}_{11}$ (сверху) и $\text{XIn}(\text{Sn})_3\text{Ti}_{11}$ (снизу)