

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.

Иллюстрации

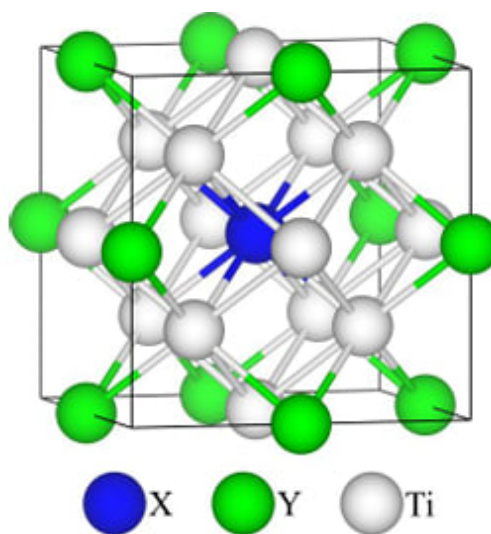


Рис. : Атомная структура упорядоченного сплава XY_3Ti_{11}

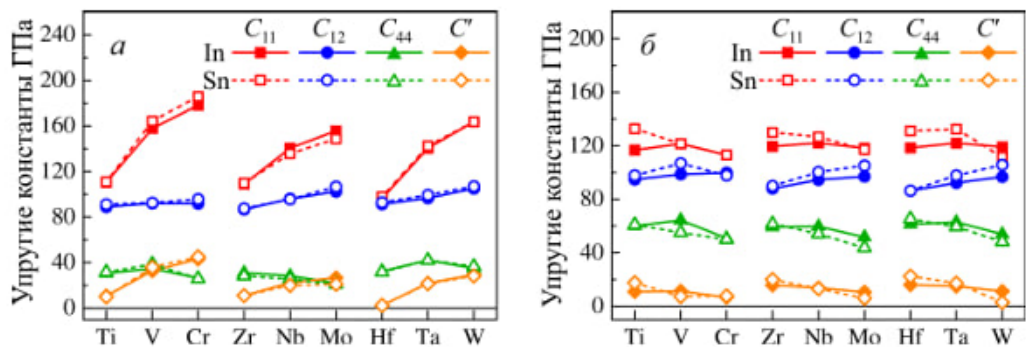


Рис. : Теоретические упругие константы сплавов ХУЗТi11 в зависимости от числа валентных d-электронов переходных металлов.

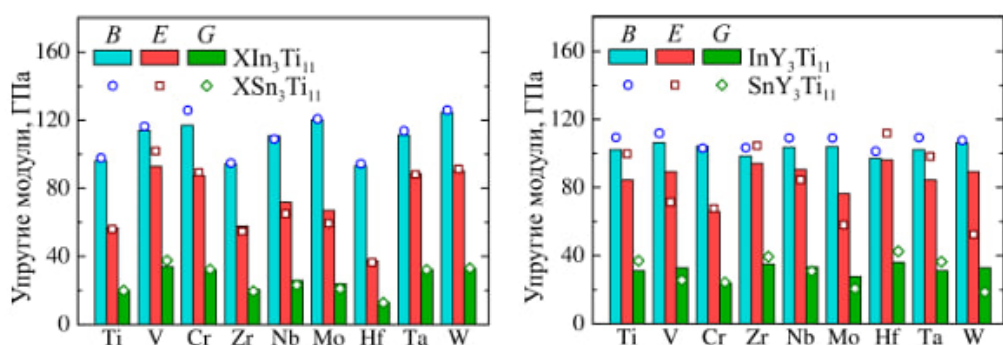


Рис. : Теоретические упругие модули в зависимости от числа валентных d-электронов в сплавах In(Sn)Y3Ti11 (а) и XIn(Sn)3Ti11 (б) с металлами IVB–VIB групп.

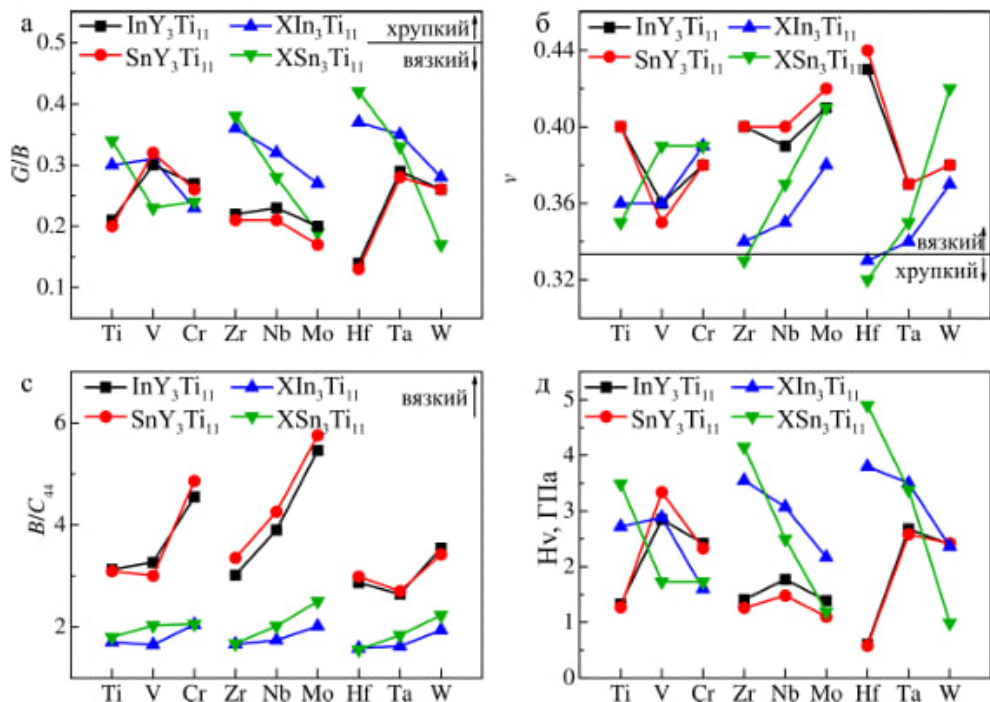


Рис. : Коэффициент Пуассона G/B (а), коэффициент Пуассона ν (б), B/C₄₄ (с) и HV (д) для сплавов In(Sn)Y3Ti11 и XIn(Sn)3Ti11.

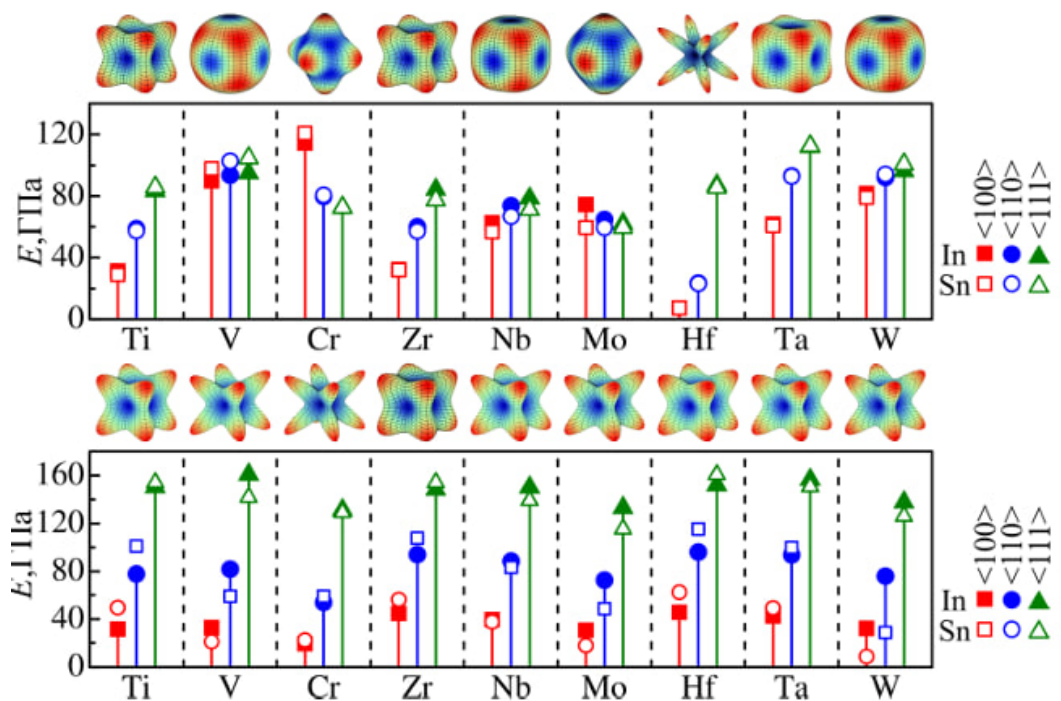


Рис. : Теоретические $E_{\langle ijk \rangle}$ в зависимости от числа валентных d-электронов в сериях сплавов $\text{In}(\text{Sn})_3\text{Ti}_{11}$ (сверху) и $\text{XIn}(\text{Sn})_3\text{Ti}_{11}$ (снизу)