

Институт физики прочности и материаловедения им. Панина В.Е. Сибирского отделения
Российской академии наук

«ЭЛЕКТРОННАЯ СТРУКТУРА И УПРУГИЕ МОДУЛИ БИНАРНЫХ И ТРОЙНЫХ β -СПЛАВОВ ТИТАНА»

Цикл работ на соискание
Премии имени Л.В. Киренского – за работы в области физики



Каспарян Сергей Олегович:
кандидат физико-математических наук,
Инженер-исследователь лаборатории
физики нелинейных сред ИФПМ СО РАН.

Томск – 2026

Актуальность

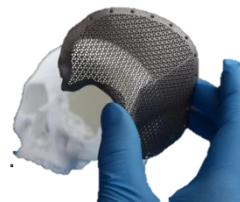
Титан и его сплавы — ключевые конструкционные материалы в аэрокосмической, химической и медицинской отраслях благодаря:

- ✓ Низкой плотности ($\sim 4.5 \text{ г/см}^3$),
- ✓ Высокой удельной прочности (до 1100 МПа),
- ✓ Высокой коррозионной стойкости и биосовместимости.

Существующие материалы имеют недостатки и ограничения:

Материал	Недостатки	Последствия
Ti-6Al-4V	Токсичность V/Al, E (110 ГПа) > E кости (~ 30 ГПа)	Резорбция кости, отторжение имплантата
CP-Ti	$E > 100$ ГПа	Непригоден для нагруженных имплантатов
β -Ti-Ta	Высокая стоимость, $E \geq 60$ ГПа	Ограниченное применение

В этой связи применение методов компьютерного моделирования для поиска оптимальных составов титановых сплавов, несомненно, является актуальным. Несмотря на имеющиеся теоретические работы, полученные результаты отличаются разбросом в значениях критических концентраций стабильности фаз и упругих модулей Ti-сплавов. Экспериментальные значения сильно зависят от методов обработки и фазового состава образцов. Микроскопические механизмы влияния легирующих добавок на упругие модули титановых сплавов, а также конкретные электронные и структурные факторы, объясняющие повышение/понижение E остаются не до конца ясными.



Экспериментальные исследования упругих свойств и фазового состава титановых сплавов требуют значительных временных и финансовых затрат.

Сплав	E , ГПа
Ti-Mo4.54, 5.26, 6.25, эксп. [1]	97, 113, 133
Ti-Mo6.25, эксп. [2]	99
Ti-Mo8, эксп. [3, 4]	83–84
Ti-Mo8.09, эксп. [5]	81–87
Ti-Mo8.12, эксп. [1]	71
Ti-Mo10, эксп. [6]	88.4
Ti-Mo11, 12, эксп. [3, 4]	89–90

Цель и задачи

Целью цикла научных работ является систематическое изучение влияния легирующих элементов переходных и простых металлов на электронную структуру, механические и термодинамические свойства сплавов на основе β -Ti.

Для достижения цели были выполнены следующие задачи:

1. Рассчитать электронную структуру ряда бинарных и тройных сплавов титана с простыми и переходными металлами с использованием двух *ab-initio* методов: проекционных присоединенных волн (PAW) и точных MT-орбиталей (EMTO-CPA).
2. Исследовать фазовую стабильность бинарных сплавов титана с металлами VB и VIB групп и установить их критические концентрации.
3. Рассчитать упругие свойства бинарных сплавов титана с учетом эффектов разупорядочения.
4. Изучить упругие свойства упорядоченных тройных сплавов состава XY_3Ti_{11} в модели «кластер плюс атом клея» с простыми и переходными металлами на X и Y позициях.
5. Изучить влияние концентрации легирующей добавки на упругие модули разупорядоченных тройных β -сплавов титана состава Ti-Mo-Me и Ti-Nb-Me, где Me = Mg, In, Sn, Zr, Hf, Ta, Mn.
6. Установить корреляции между структурными и электронными факторами и изменением модуля Юнга в тройных β -сплавах титана.

Вычислительные методы

- Метод проекционных присоединенных волн (PAW) с обобщенным градиентным приближением (GGA) для обменно-корреляционного функционала.
- Метод точных маффин-тин (MT) орбиталей (EMTO) с приближением когерентного потенциала (CPA)
- Объемный модуль сжатия рассчитывался по формуле:

$$B = B_V = B_R = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{3}.$$

- Модуль сдвига рассчитывался по формуле:

$$G = \frac{1}{2} \left[\frac{2C' + 3C_{44}}{5} + \frac{5C_{44}C'}{2C_{44} + 3C'} \right].$$

- Модуль Юнга в приближении Хилла рассчитывался по формуле:

$$E = \frac{1}{2} \left[\frac{9}{1/B + 15/(2C' + 3C_{44})} + \frac{5}{5/(9B) + 2/(3C') + 1/C_{44}} \right].$$

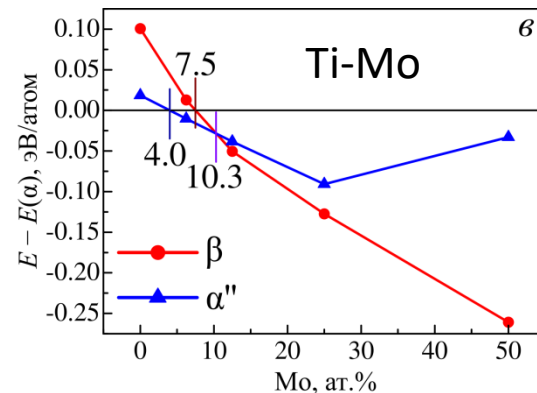
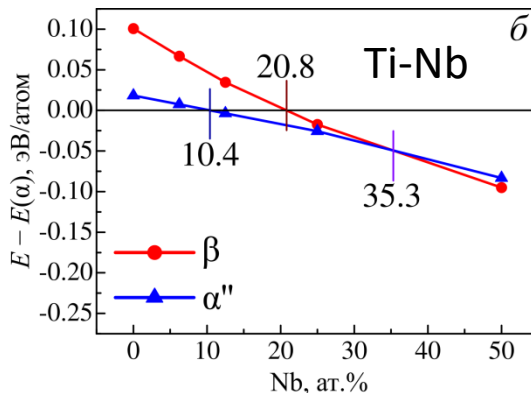
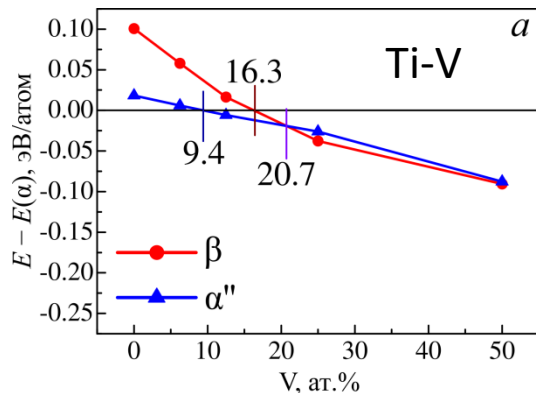


G. Kresse, J. Hafner et al.
<http://www.vasp.at>



L. Vitos, Computational quantum mechanics for materials engineers: the EMTO method and applications

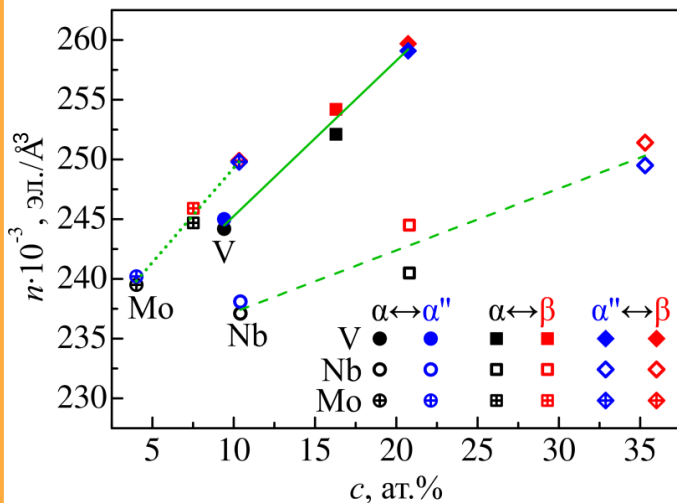
Влияние легирующих элементов на стабилизацию β -Ti



Полная энергия β и α'' фаз Ti относительно α -фазы в зависимости от концентрации V (а), Nb (б) и Mo (в)

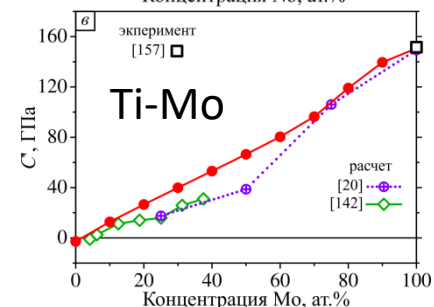
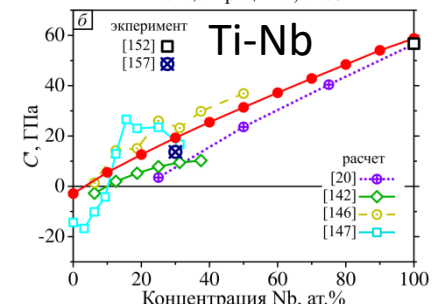
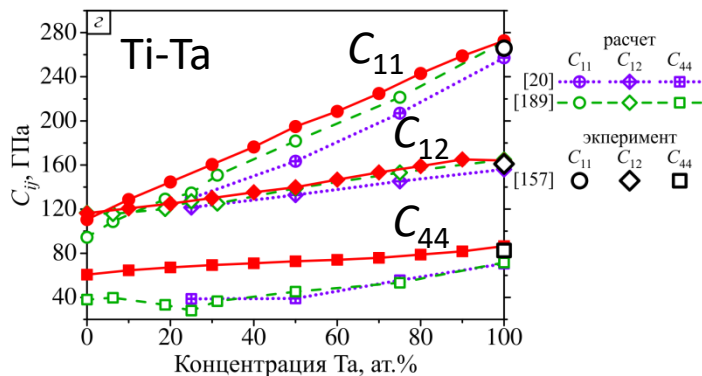
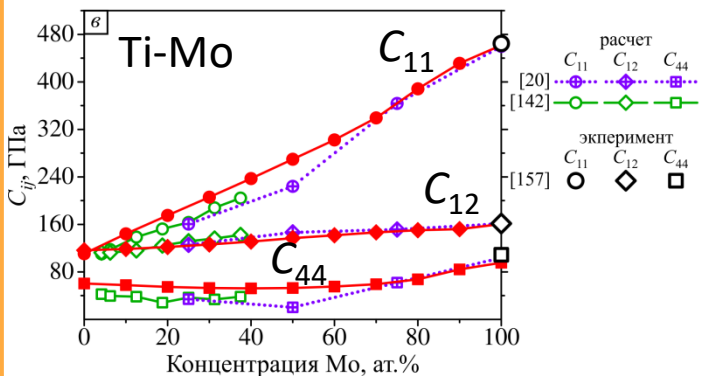
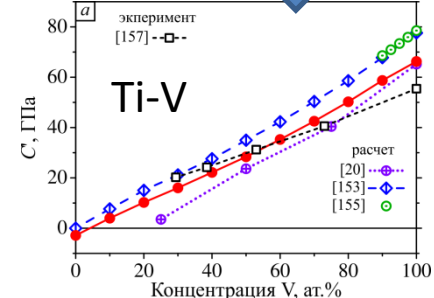
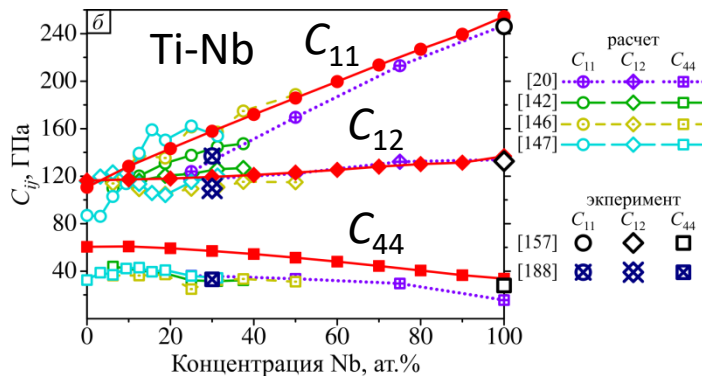
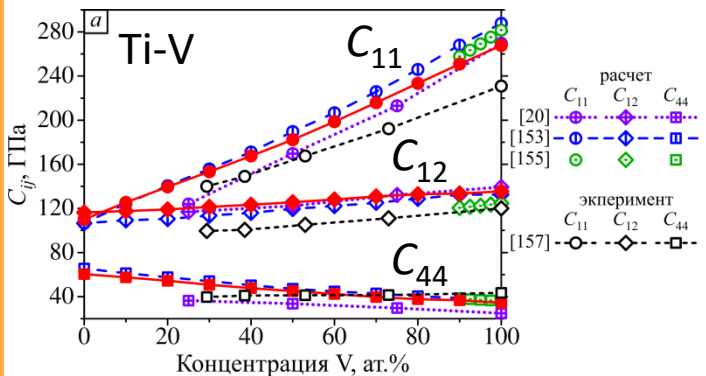
Критические концентрации второго компонента сплава Ti-Me для $\alpha \rightarrow \beta$ превращения и их ковалентный радиус

Me	Эксп. ат.%	Расчет	$R_{\text{cov}}, \text{\AA}$
V	14.2	16.3	1.22
Nb	22.5	20.8	1.34
Mo	5.2	7.5	1.30



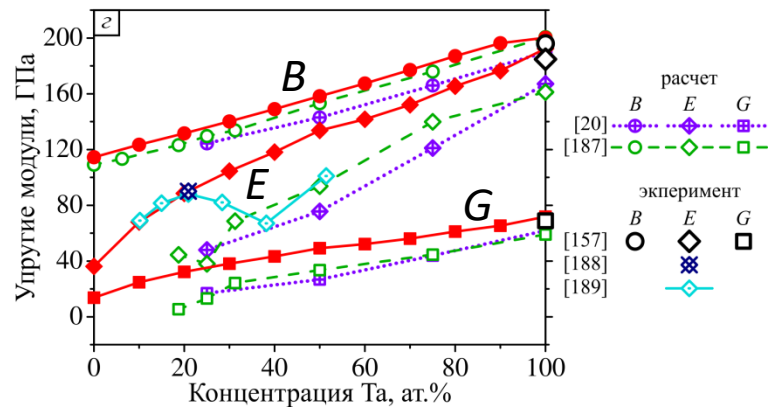
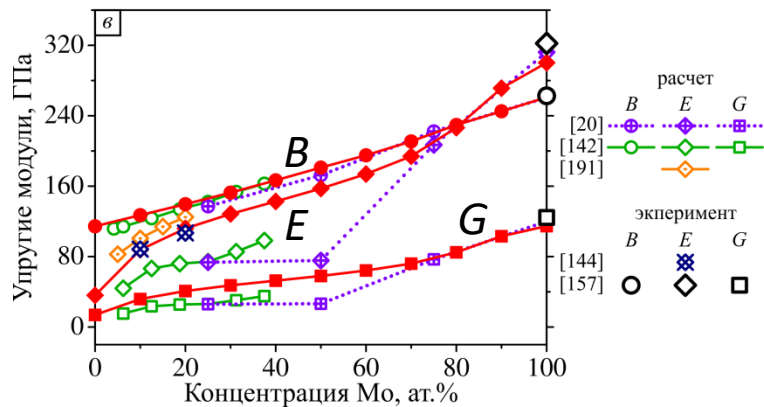
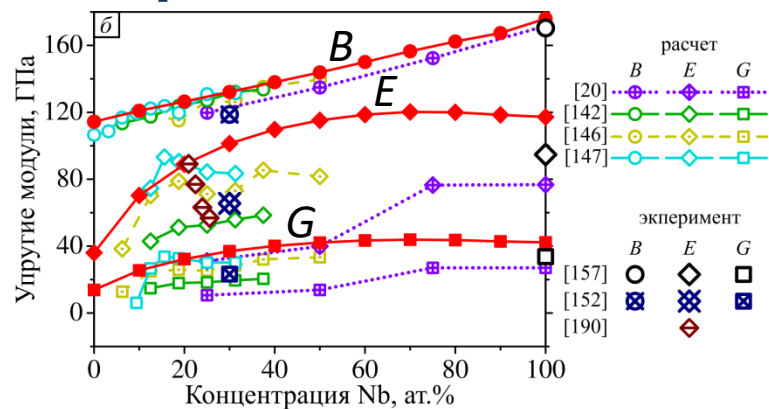
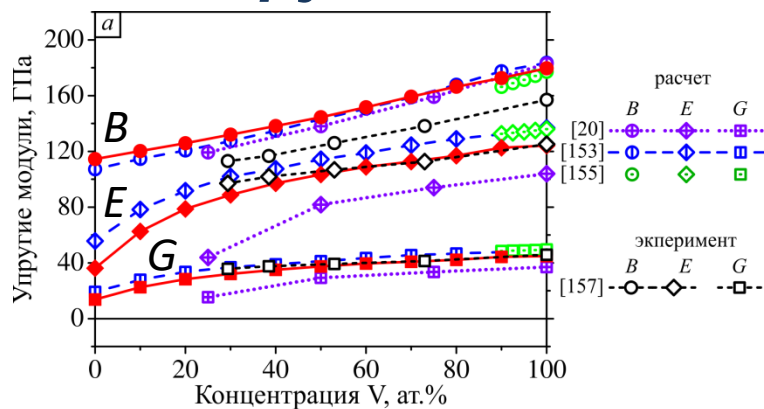
Взаимосвязь критической концентрации легирующего элемента, при которой должен происходить фазовый переход, с плотностью валентных электронов в начальной и конечной фазах. Прямые построены методом наименьших квадратов

Упругие свойства бинарных Ti-сплавов



Зависимость упругих констант C_{11} , C_{12} , C_{44} и C' от концентрации второго компонента в β -Ti-Me

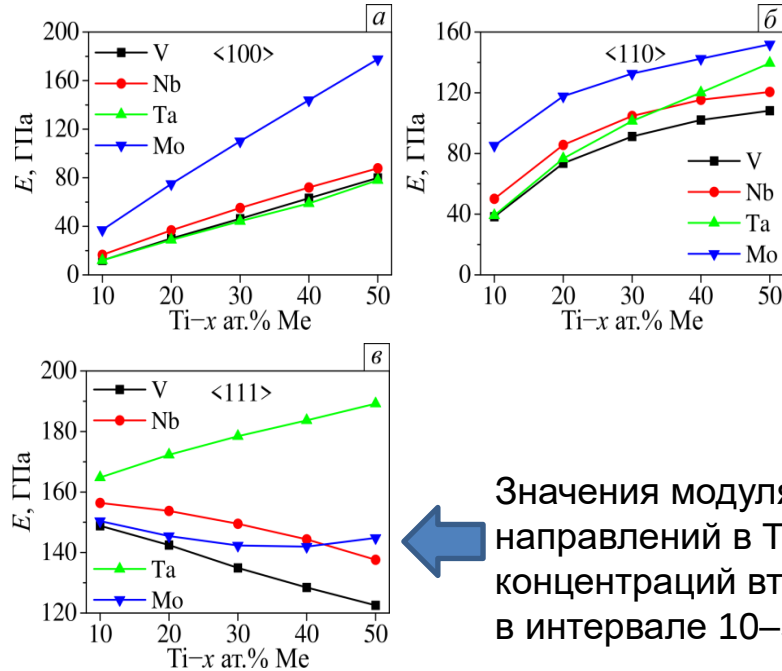
Упругие свойства бинарных Ti-сплавов



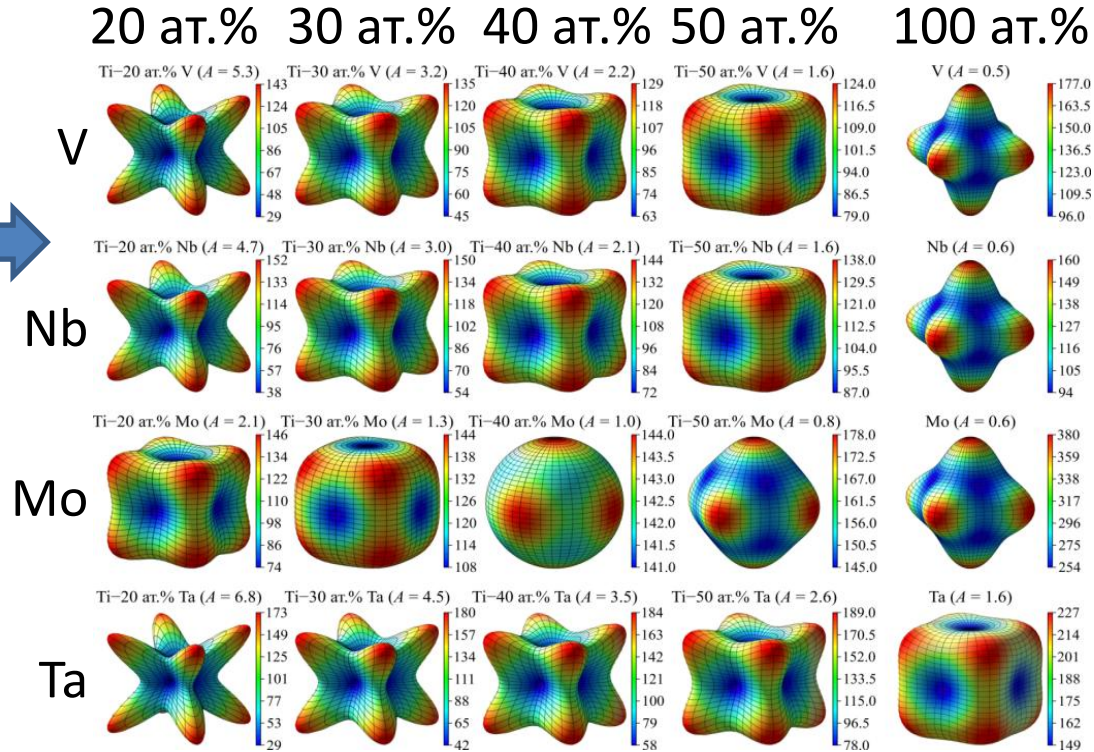
Зависимость упругих модулей от концентрации второго компонента в β -Ti-Me: V (а), Nb (б), Mo (в) и Ta (г)

Влияние легирования на упругие свойства бинарных β -Ti сплавов

Ориентационная зависимость модуля Юнга для сплавов β -Ti-x ат.% Me, где x = 20, 30, 40, 50 и 100 ат.% и значения коэффициента Зенера, $A = C_{44}/C'$.



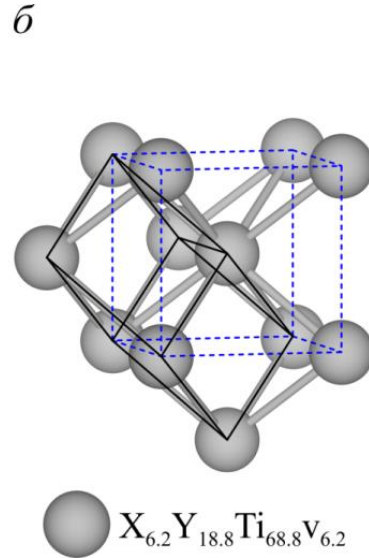
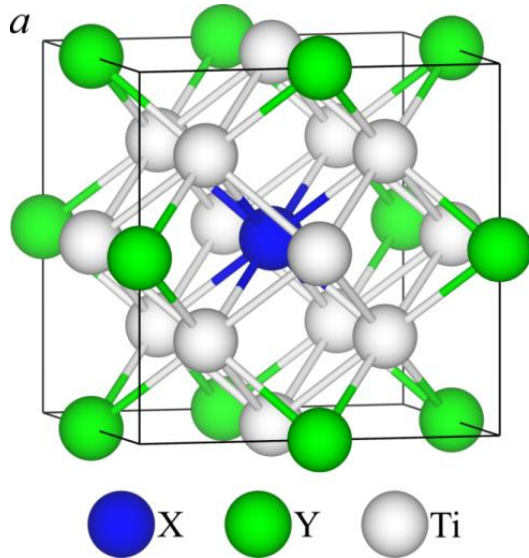
Значения модуля Юнга для трех направлений в Ti-Me сплавах для концентраций второго компонента в интервале 10–50 ат.%



Самые низкие значения E соответствуют направлению $\langle 100 \rangle$ и концентрациям V, Nb, Ta вблизи критических

Тройные сплавы состава XY_3Ti_{11}

Модель «кластер плюс атом клея»



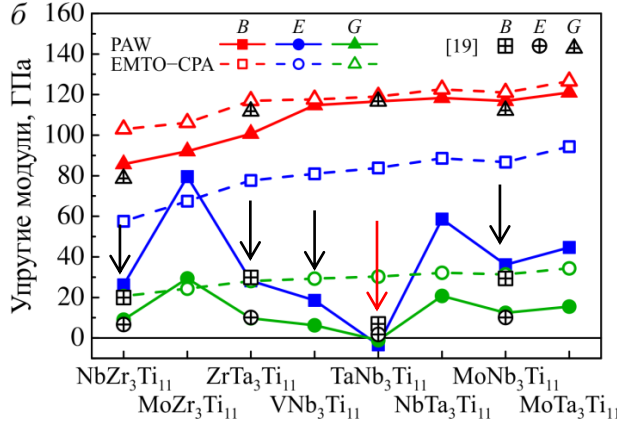
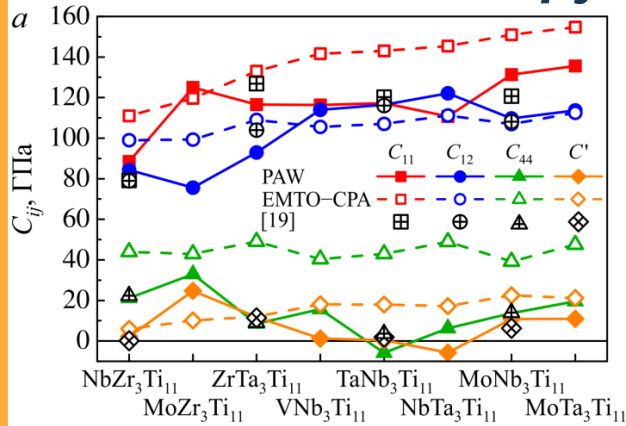
X, Y – это переходные металлы (V, Zr, Nb, Mo, Ta),
и простые металлы (Sn, In)

Атомная структура упорядоченного сплава XY_3Ti_{11} (а) и примитивная ячейка разупорядоченного (б)

Для оценки упругих постоянных использовался метод конечных смещений. Известно, что в гармоническом приближении изменение полной энергии при деформации можно записать следующим образом:

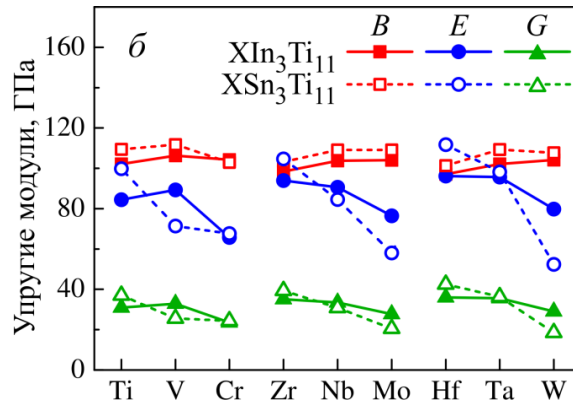
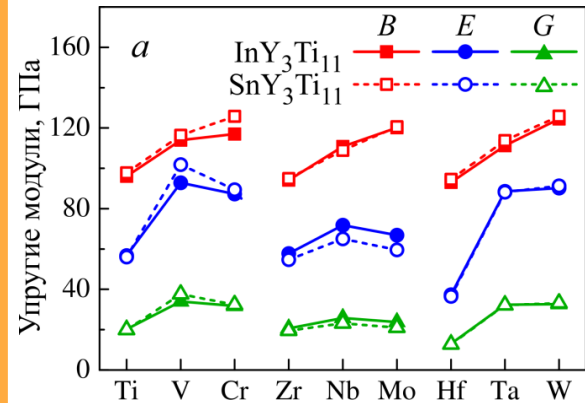
$$\Delta E(V, \{\varepsilon_i\}) = E(V, \{\varepsilon_i\}) - E(V_0, 0) = \frac{V_0}{2} \sum_{i,j=1}^6 C_{ij} \varepsilon_i \varepsilon_j$$

Упругие свойства сплавов XY_3Ti_{11}



B
E
G

Теоретические упругие константы и упругие модули для сплавов XY_3Ti_{11} в зависимости от числа валентных d -электронов. Теоретические значения взяты из работы [**]

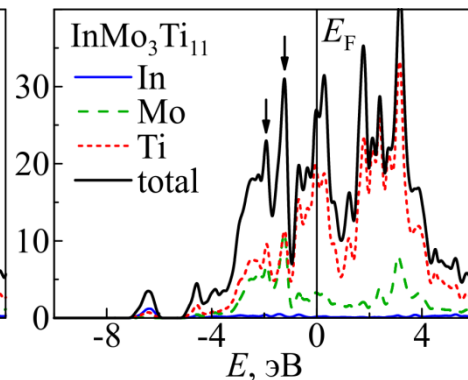
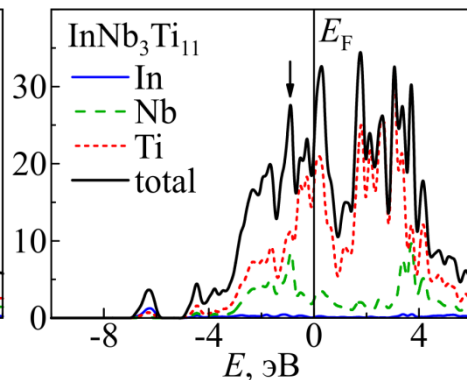
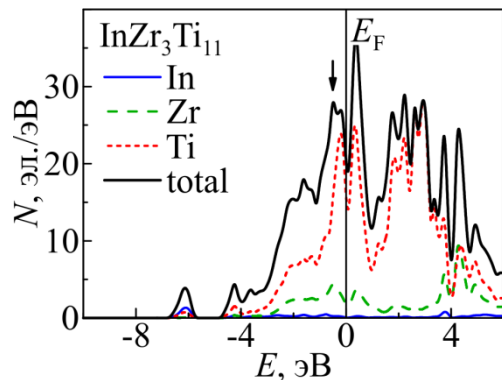


Наименьший E :

InHf₃Ti₁₁ (37.3 ГПа),
SnHf₃Ti₁₁ (36.5 ГПа),
CrIn₃Ti₁₁ (65.7 ГПа),
WSn₃Ti₁₁ (52.4 ГПа).

Для CP-Ti и Ti-6Al-4V
 $E \approx 105-120$ ГПа (эксп.).

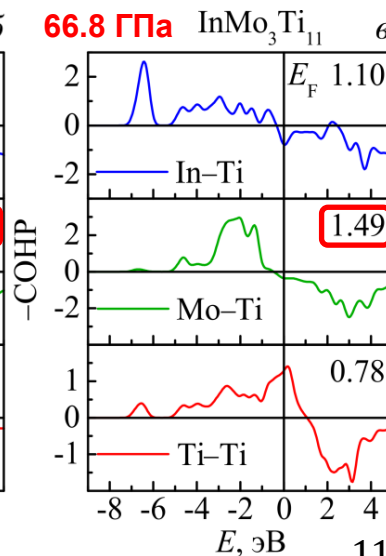
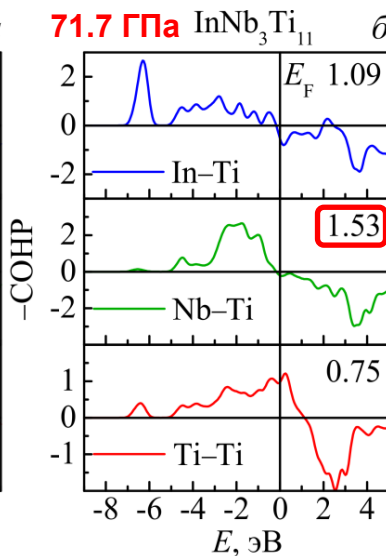
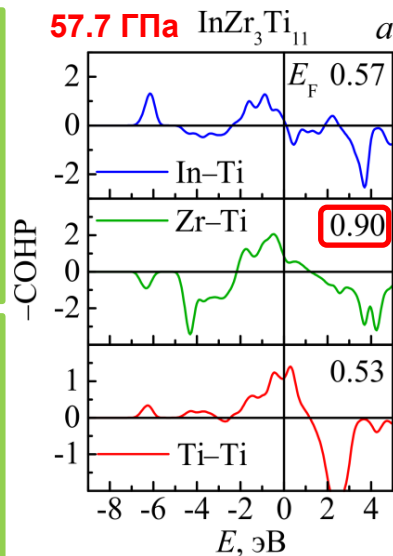
Электронные свойства сплавов $\text{In}(\text{Sn})\text{Y}_3\text{Ti}_{11}$ и $\text{XIn}(\text{Sn})_3\text{Ti}_{11}$



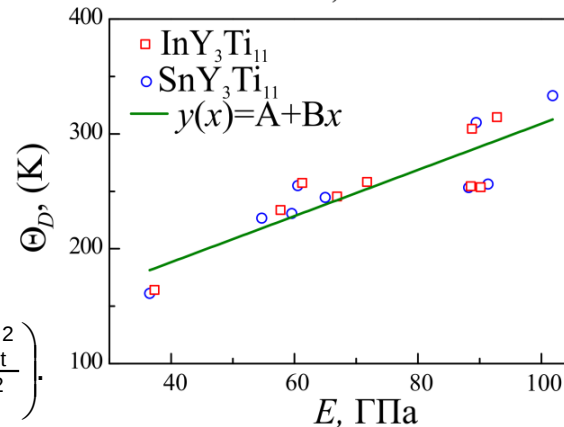
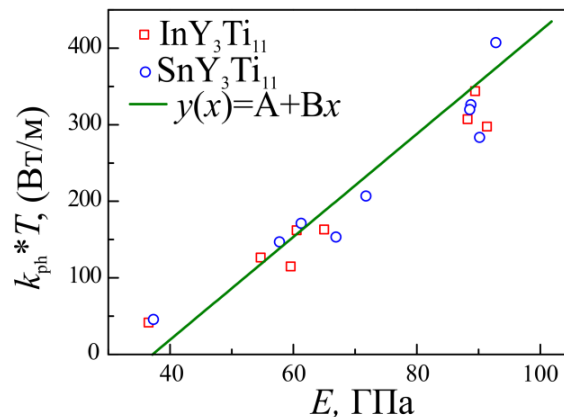
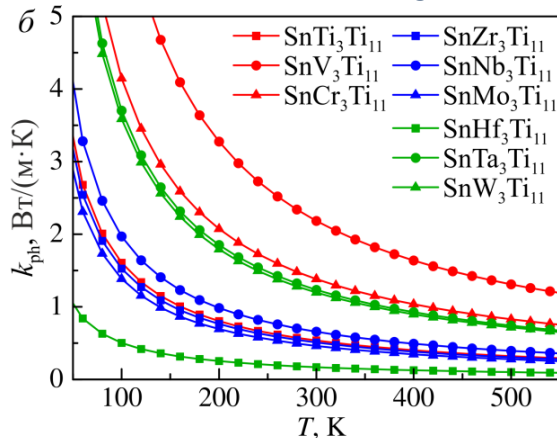
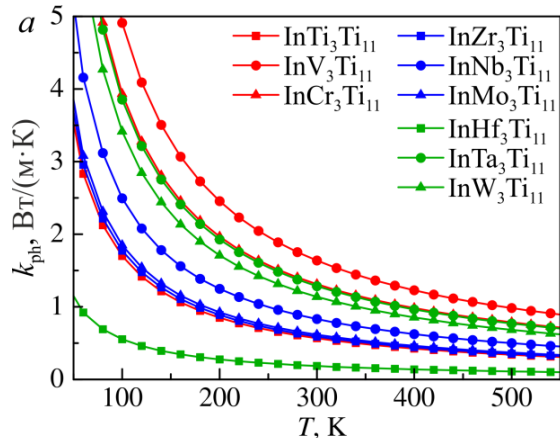
Полные и локальные ПЭС ряда сплавов $\text{InY}_3\text{Ti}_{11}$ с элементами IVB–VIB групп

- Переходный металл на Y-позиции определяет тонкую структуру ПЭС вблизи уровня Ферми.
- ПЭС сплавов с Sn отличается от приведенных с In положением отщепленного пика – в случае Sn он располагается при энергии -8 эВ.

- В целом изменение модуля Юнга коррелирует с прочностью связей атомов титана с атомами “клея” (Y–Ti).
- Данная тенденция сохраняется также для сплавов с Hf, Ta и W, изоэлектронными Zr, Nb, Mo элементами.



Тепловые свойства $\text{In}(\text{Sn})\text{Y}_3\text{Ti}_{11}$



Решеточная теплопроводность для двух серий сплавов в диапазоне температур от 50 до 550 K: а) $\text{InY}_3\text{Ti}_{11}$, б) $\text{SnY}_3\text{Ti}_{11}$, где X и Y – элементы IVB–VIB групп

Расчет решеточной теплопроводности сплавов проводился в рамках модели Слэка* по эмпирической формуле:

$$k_{\text{ph}} = \frac{AV_0 M_a \Theta_D^3}{T \gamma_a n^{2/3}},$$

где V_0 – объем в расчете на атом, M_a – средняя атомная масса на атом, T – температура, n – число атомов в ячейке, γ_a – параметр Грюнайзена.

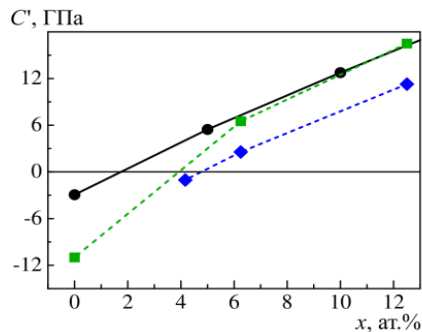
Температура Дебая и акустический параметр Грюнайзена:

$$\Theta_D = \frac{h}{k_B} \left[\frac{3n}{4\pi} \left(\frac{N_A \rho}{M} \right) \right]^{\frac{1}{3}} v_m, \quad \gamma_a = \frac{3}{2} \left(\frac{3v_l^2 - 4v_t^2}{v_l^2 + 2v_t^2} \right).$$

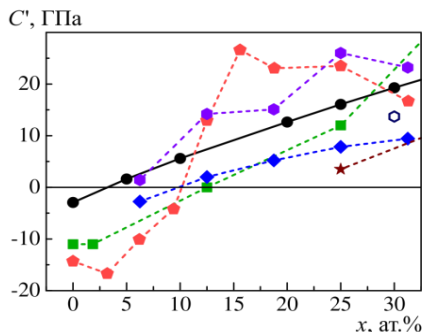
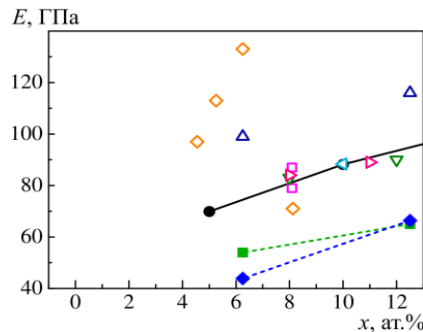
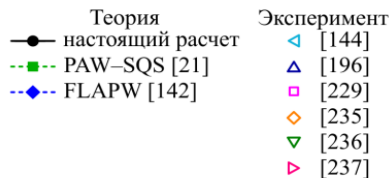
Плотность ρ (в г/см³), скорость звука (продольная v_l , поперечная v_t и средняя v_m (в м/с), n – число атомов в ячейке, M – молярная масса.

Корреляции между k_{ph} и модулем E , а так же Θ_D и модулем E

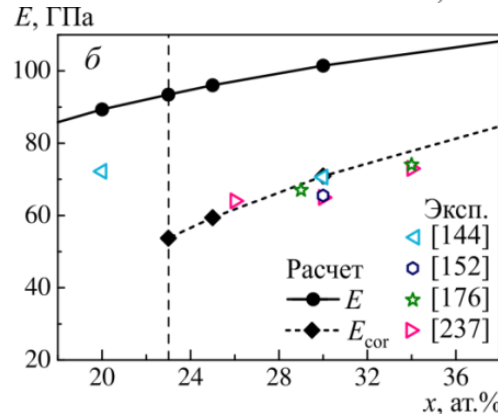
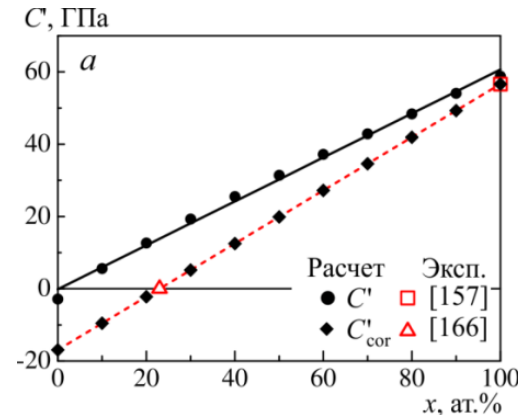
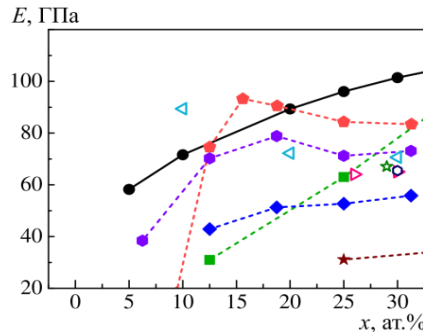
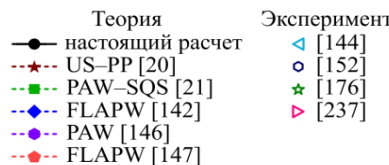
Разупорядоченные сплавы Ti–Mo₅(Nb₂₅)–Мех



Ti–Mo_x



Ti–Nb_x



Значения C' и E бинарных сплавов Ti–Me в сопоставлении с теоретическими и экспериментальными данными

Тестовые расчеты

Sn_{6.25}Mo_{6.25}(Ti_{29.2}Zr_{29.2}Nb_{29.2})

$E=110$ ГПа (теория)

$E=110-117$ ГПа (эксп.)

Ti-6Al-4V

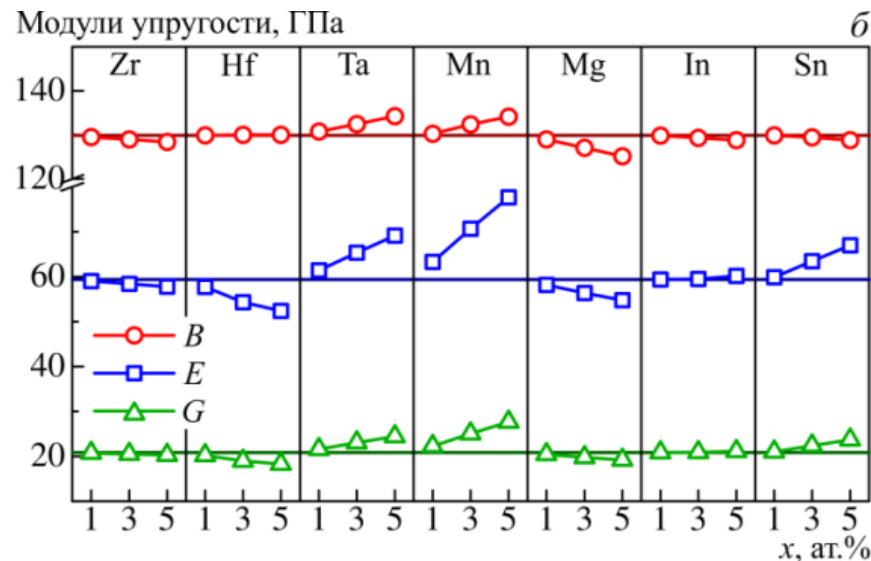
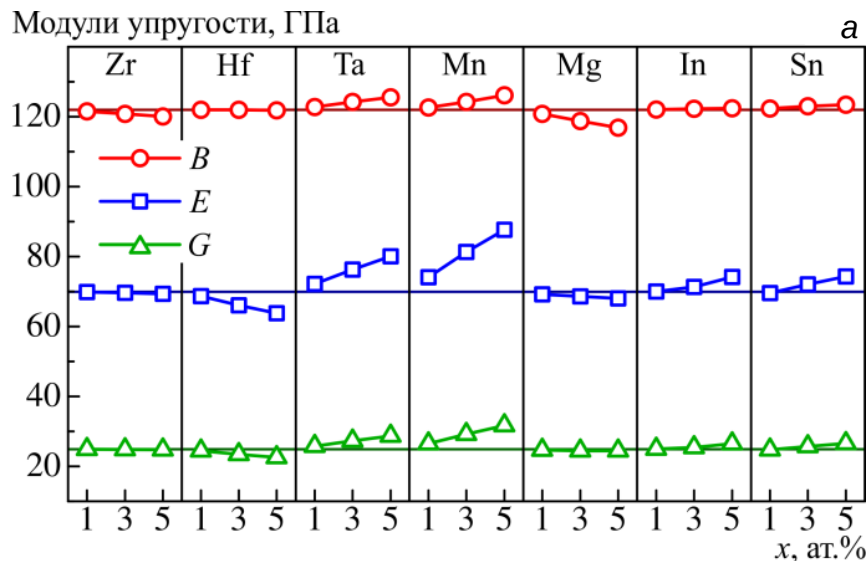
$E=72.3$ ГПа (теория)

$E=75.8 \pm 12.9$ ГПа (эксп.)

Концентрационная зависимость C' и E

$$C'_{\text{cor}} = C' + \Delta, \text{ где } \Delta = 0.128x - 16.8 \text{ ГПа}$$

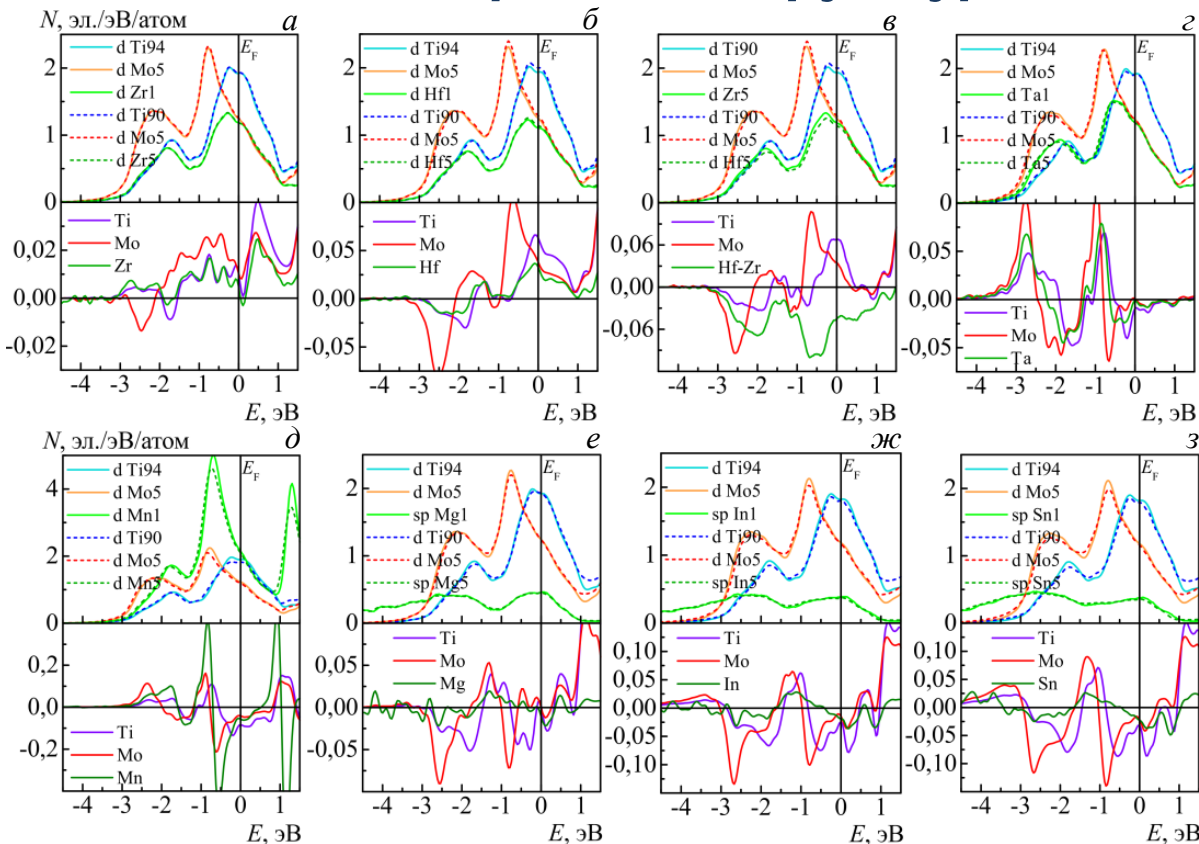
Упругие свойства сплавов $Ti-Mo5-Mex$ и $Ti-Nb25-Mex$



Концентрационные зависимости модулей упругости (а) сплавов $Ti-Mo5-Mex$ и (б) $Ti-Nb25-Mex$.
Горизонтальные линии соответствуют значениям, полученным для бинарных сплавов

- Минимальное значение модуля Юнга для сплавов $Ti-Mo5-Mex$ составляет ~64 ГПа ($Ti-Mo5-Hf5$), тогда как в случае сплавов с Nb – ~52 ГПа ($Ti-Nb25-Hf5$).

Электронная структура сплавов Ti-Mo5-Mex



Локальные ПЭС Ti-Mo5-Mex сплавов для разных концентраций Zr (а), Hf (б), Ta (г), Mn (д), Mg (е), In (ж), Sn (з) на верхних панелях и их разности на нижних панелях, а также ПЭС сплавов с 5 ат.% Zr и Hf (в).

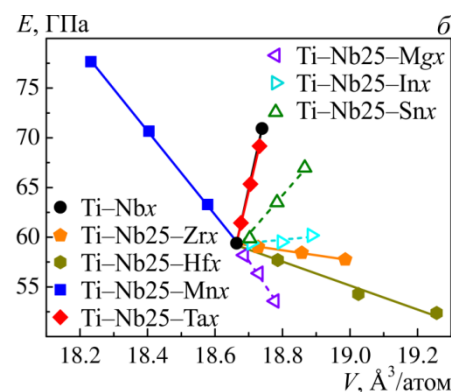
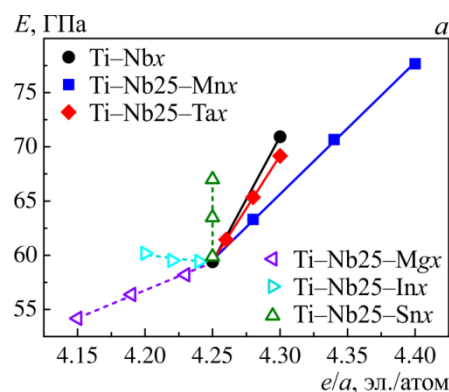
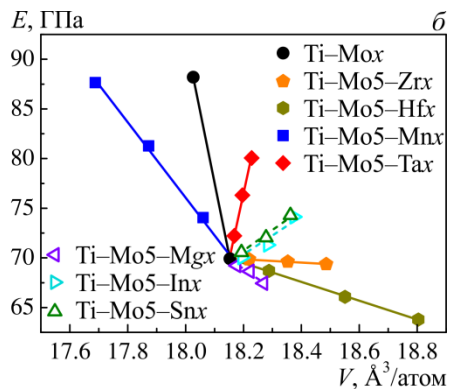
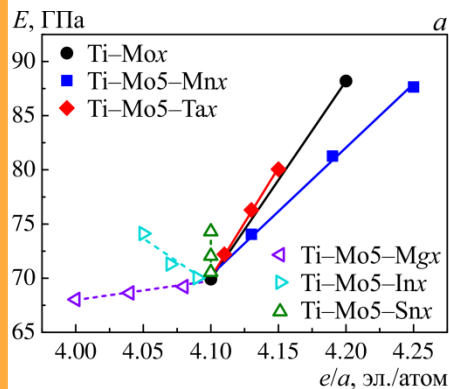
- Локальные ПЭС имеют двух пиковую структуру, как и в бинарных сплавах.
- Повышение плотности состояний на уровне Ферми коррелирует с понижением C' в случае Zr, Hf и Mg.
- Ta и Mn индуцируют понижение плотности состояний на уровне Ферми и, как следствие, повышение C' .
- В отличие от работы [**] можно сделать вывод, что переходные металлы могут оказывать как одинаковое, так и противоположное влияние на константы C' и C_{44} .

$$E = \frac{1}{2} \left[\frac{9}{1/B + 15/(2C' + 3C_{44})} + \frac{5}{5/(9B) + 2/(3C') + 1/C_{44}} \right]$$

[**] Kwasniak, P. Origin of low Young modulus of multicomponent, biomedical Ti alloys-seeking optimal elastic properties through a first principles investigation / P. Kwasniak, J.S. Wróbel, H. Garbacz // J. Mech. Behav. Biomed. Mater. – 2018. – Vol. 88. – P. 352-361.

Сплавы Ti-Mo5-Mex

Сплавы Ti-Nb25-Mex



Корреляция модуля Юнга с числом валентных электронов в расчете на атом (а) и с объемом, приходящимся на атом (б)

- Наибольший рост модуля Юнга характерен для Ta и Mn.
- Добавление 5 ат.% Nb ведет к большому повышению E , чем добавление такого же количества Ta.
- Влияние In и Sn на модуль Юнга подобно влиянию d -элементов, а эффект Mg противоположен.
- Понижение отношения e/a при легировании не всегда ведет к понижению модуля Юнга.

Понижение содержания Mo за счет Nb позволяет получить $E = 51$ ГПа в сплаве Ti-Mo2.5-Nb15-Hf5 по сравнению с 64 ГПа в сплаве Ti-Mo5-Hf5.

- Наибольшее увеличение объема происходит в случае Hf, хотя его ковалентный радиус лишь на 0.01 Å меньше, чем у циркония, что указывает на ослабление связей в сплаве.
- При увеличении концентрации s,p -элементов имеет место повышение атомного объема сплавов, но в отличие от Zr и Hf, это ведет к понижению модуля Юнга лишь в случае Mg.
- В случае Zr, Hf и Mg понижение модуля Юнга в основном обусловлено размерным эффектом.

Цикл работ

1. **Каспарян, С.О.** Электронные, колебательные и тепловые свойства α и β титана / С.О. Каспарян, А.В. Бакулин, С.Е. Кулькова // Известия Алтайского государственного университета. – 2022. – No. 4 (126). – С. 29-35.
2. **Каспарян, С.О.** Влияние примесей V, Nb и Mo на стабильность фаз титана / С.О. Каспарян, А.В. Бакулин, С.Е. Кулькова // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2022. – Т. 65, вып. 8. – С. 42-48.
перевод: Kasparyan, S.O. Effect of V, Nb, and Mo impurities on the stability of titanium phases / S.O. Kasparyan, A.V. Bakulin, S.E. Kulkova // Russian Physics Journal. – 2022. – Vol. 65, No. 8. – P. 1283–1289.
3. **Каспарян, С.О.** Механические свойства тройных сплавов состава XY_3Ti_{11} / С.О. Каспарян, А.В. Бакулин, С.Е. Кулькова // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2024. – Т. 67, вып. 7. – С. 77-85.
4. **Каспарян, С.О.** Механические свойства ряда бинарных β -титановых сплавов / С.О. Каспарян, А.В. Бакулин, С.Е. Кулькова // Физическая мезомеханика. – 2025. – Т. 28, вып. 1. – С. 54-65.
перевод: Kasparyan, S.O. Mechanical properties of some binary β -titanium alloys / S.O. Kasparyan, A.V. Bakulin, S.E. Kulkova // Phys. Mesomech. – 2025. – Vol. 28, No. 3. – P. 324-334.
5. **Kasparyan, S.O.** Elastic and thermal properties of some ternary β -Ti based alloys / S.O. Kasparyan, A.E. Ordabaev, A.V. Bakulin, S.E. Kulkova // Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics. – 2025. – Vol. 16, No. 2. – P. 225-234.
6. **Kasparyan S. O.** Electronic structure, elastic and mechanical properties of disordered Ti–Nb₂₅–Mex alloys / Bakulin A. V., Kasparyan S. O., Kulkova S. E. // Journal of Alloys and Compounds. – 2026. – Vol. 1067. – P. 188367.
7. **Kasparyan S. O.** Influence of Alloying Elements on the Elastic Properties of β -Ti / Kasparyan S. O., Bakulin A. V., Kulkova S. E. // Journal of Experimental and Theoretical Physics. – 2026. – Vol. 169. – No. 1. – P. 71-81.

Апробация работы

- Основные результаты цикла научных работ были представлены на следующих конференциях: XIX Международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Перспективы развития фундаментальных наук» (Томск, 2023 г.), Международной конференции «Физическая мезомеханика. Материалы с многоуровневой иерархически организованной структурой и интеллектуальные производственные технологии» (Томск, 2024 г.), и **дважды** на XII Международная школа-конференция «Физическое материаловедение» (Тольятти, 2025 г.), 72-й международная мультидисциплинарная научно-практическая конференция «Advances in Science and Technology» (Москва, 2025 г.)
- Опубликовано 7 статей в журналах, включенных в Перечень рецензируемых научных изданий (из них 3 статьи в российских научных журналах, переводные версии которых входят в Web of Science и Scopus; 1 статья в российском научном журнале, входящем в Web of Science и Scopus).
- Цикл работ был поддержан и входил в ГЗ ИФПМ СО РАН, FWRW-2022-0001.



Благодарю за внимание!

Выводы

1. На основе систематического изучения влияния V, Nb и Mo на стабильность α , β и α'' фаз титана определены интервалы стабильности разных фаз. Показано, что $\beta \rightarrow \alpha$ превращение происходит при концентрациях 16.3 (V), 20.8 (Nb) и 7.5 (Mo) ат.%, что находится в согласии с экспериментом, при этом сопровождается скачкообразным увеличением плотности валентных электронов.
2. Изучено влияние разупорядочения на упругие константы и модули бинарных титановых сплавов, легированных V, Nb, Mo и Ta. В целом значения упругих констант и модулей выше, чем полученные для упорядоченных сплавов, однако тенденции в их изменении совпадают. Легирующие элементы оказывают подобное влияние на упругие константы, повышая C_{11} и C' , тогда как C_{12} увеличивается незначительно, а поведение C_{44} зависит от конкретного элемента. Показано, что EMTO-CPA расчет завышает интервал стабильности β -фазы.
3. Объемный модуль упругости в разупорядоченных бинарных сплавах титана обнаруживает линейное поведение с увеличением концентрации второго компонента, тогда как модули Юнга и сдвига изменяются существенно нелинейно, при этом первый демонстрирует резкое уменьшение значений вблизи области неустойчивости β -фазы. Расчет ориентационной зависимости модуля Юнга направления показал, что в направлении $\langle 100 \rangle$ его значения в сплавах с V и Ta равны 30–45 ГПа, тогда как несколько большие значения 35–55 ГПа были получены для сплавов с Nb и Mo.

Выводы

4. В модели «кластер плюс атом клея» изучена электронная структура и упругие свойства ряда упорядоченных тройных сплавов титана состава XY_3Ti_{11} с простыми и переходными металлами на X и Y позициях. Все рассмотренные сплавы с переходными металлами на X и Y позициях имеют значения модуля Юнга меньше, чем чистый титан, при этом у пяти сплавов ($NbZr_3Ti_{11}$, $ZrTa_3Ti_{11}$, VNb_3Ti_{11} , $MoNb_3Ti_{11}$, $MoTa_3Ti_{11}$) он ниже 45 ГПа. Установлено, что низкие значения модуля Юнга коррелируют с меньшей прочностью связи X–Ti в титановом кластере. Разупорядочение ведет к существенному увеличению модуля Юнга, но его значения остаются меньше, чем у чистого титана.

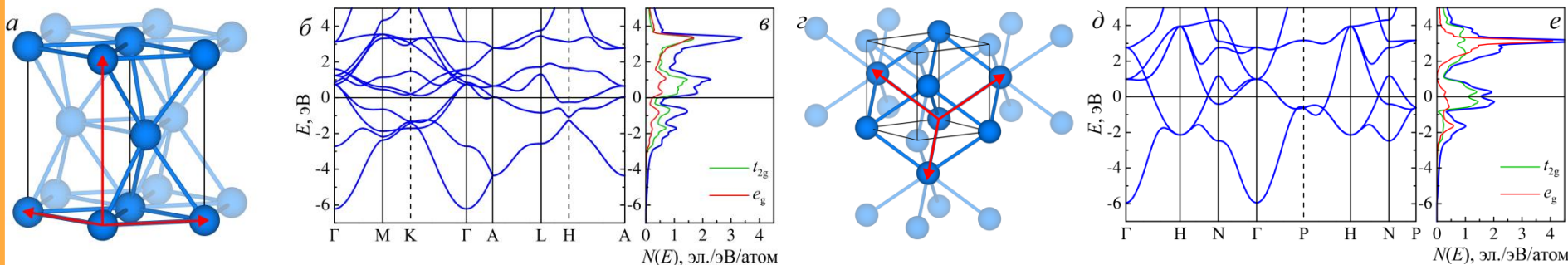
5. В случае простых металлов на X или Y позициях минимальные значения модуля Юнга (~37 ГПа) были получены для сплавов $InHf_3Ti_{11}$ и $SnHf_3Ti_{11}$. Наименьшие значения модуля Юнга также как и в бинарных сплавах соответствуют направлению $\langle 100 \rangle$, а влияние s,p-элементов на X или Y позициях на модуль Юнга менее выражено по сравнению с переходными металлами. Установлено, что в сплавах XY_3Ti_{11} с s,p-элементами модуль Юнга возрастает с увеличением прочности связей титана с атомами клея (Y–Ti).

6. Проведен расчет решеточной теплопроводности, температуры Дебая, акустического параметра Грюнайзена и других характеристик. Наблюдается корреляция теплопроводности с модулем Юнга – низкие значения модуля Юнга соответствуют низким значениям температуры Дебая и, как следствие, низкой теплопроводности. В сплавах с простыми металлами на Y-позиции данная тенденция может нарушаться. В целом влияние s,p-элементов на упругие и тепловые характеристики менее выражено по сравнению с переходными металлами независимо от занимаемой ими X- или Y-позиции, и отражает в основном размерный эффект.

Выводы

7. Рассмотрено влияние третьего компонента на упругие свойства разупорядоченных сплавов Ti-Mo₅-Mex и Ti-Nb₂₅-Mex. Добавления Zr, Hf и Mg приводит к ослаблению межатомных связей и понижению модуля Юнга, тогда как повышение электронной концентрации (e/a) за счет легирования элементами с большим числом валентных электронов приводит к росту модуля Юнга вследствие повышения ковалентного вклада в межатомное взаимодействие. Легирующие s,p -элементы с полностью заполненной d -оболочкой (In, Sn) индуцируют незначительное повышение модуля Юнга, несмотря на понижение (In) или неизменность (Sn) электронной концентрации и увеличение параметра решетки.
8. В тройных сплавах титана с β -фазой выявлена сильная анизотропия упругих свойств, при этом для модуля Юнга справедливо соотношение $E_{\langle 100 \rangle} < E_{\langle 110 \rangle} < E_{\langle 111 \rangle}$. Минимальные значения $E_{\langle 100 \rangle}$ для сплавов Ti-Nb₂₅-Mex меньше 10 ГПа, за исключением сплавов с Ta и Mn, что сопоставимо с модулями упругости кортикальной кости (~10–35 ГПа). В то же время легирование сплавов Ta и Mn значительно повышает $E_{\langle 100 \rangle}$ и $E_{\langle 110 \rangle}$, понижая анизотропию упругости.
9. Сравнительный анализ показал, что тройные β -сплавы на основе Ti-Mo обладают, как правило, более высокими модулями Юнга (~60–90 ГПа) по сравнению со сплавами на основе Ti-Nb (50–80 ГПа), которые характеризуются такими же значениями C' . Дальнейшей стратегией поиска низкомодульных Ti сплавов является нахождение оптимальных концентраций легирующих элементов, таких как Zr, Hf, Mg и Sn, в многокомпонентных сплавах на основе Ti-Nb₂₅.

Электронная структура и упругие модули β -сплавов Ti



Элементарная ячейка (а, е), электронный энергетический спектр (б, д) и полная плотность электронных состояний титана (в, е): α -фаза (а–в) и β -фаза (г–е). Базисные вектора показаны красными стрелками

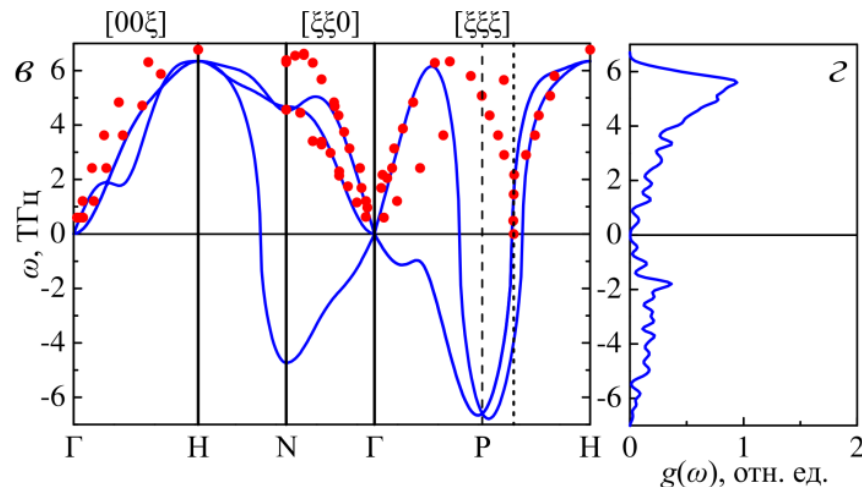
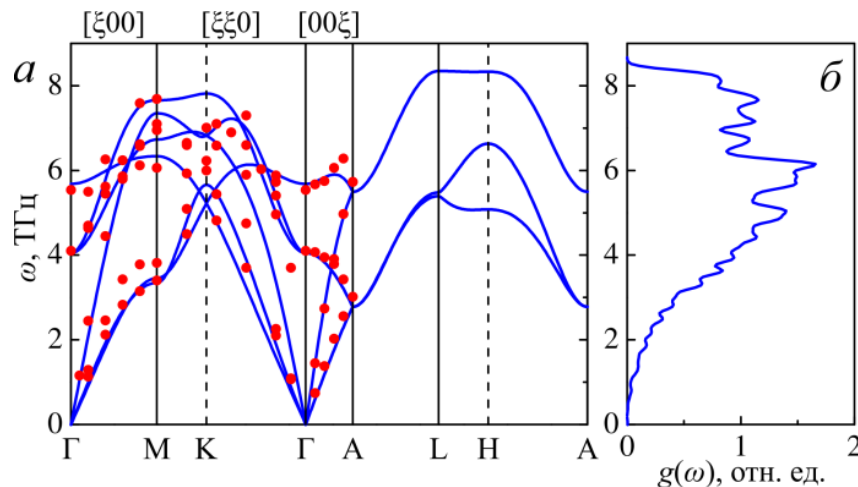
Электронные характеристики α - и β -Ti

Характеристики	α -Ti	β -Ti	Источник
Ширина ВЗ, эВ	6.16	5.92	Настоящая работа
	6.2	6.0	Расчет [1]
$N(E_F)$, эл./эВ/атом	0.93	2.10	Настоящая работа
γ , мДж/К ² /моль	2.19	4.94	Настоящая работа
	3.35	—	Эксперимент [2]

1. Lekka, Ch.E. Electronic origin and structural instabilities of Ti-based alloys suitable for orthopaedic implants / Ch.E. Lekka, J.J. Gutiérrez-Moreno, M. Calin // J. Phys. Chem. Solids. – 2017. – Vol. 102. – P. 49–61.

2. Киттель, Ч. Введение в физику твердого тела / Ч. Киттель // – Москва: Наука, Главная редакция физико-математической литературы, – 1978. – 790 с.

Фононная структура Ti



Фононный спектр (а, в) и плотности фоновых состояний (б, г) для α -Ti (а, б) и β -Ti (в, г), рассчитанные в гармоническом приближении. Красными точками показаны экспериментальные значения [3] для α - и β -фазы, соответственно. Мнимые частоты соответствуют отрицательным частотам на рисунке

α -Ti: Динамически стабильна (полож. частоты). Согл. эксп. (295 K).

β -Ti: Динамически **нестабильна** (мнимые частоты). Смягчение мод вдоль $[\xi\xi0](N)$ и $[\xi\xi\xi](\Gamma-P-H) \rightarrow 2$ механизма перехода (смещения $[110]$ или $[111]$).

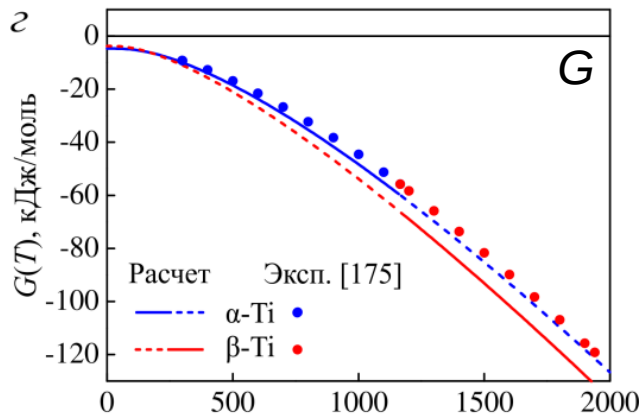
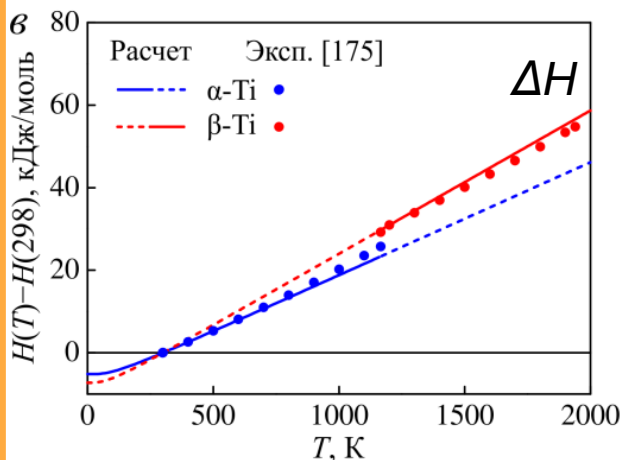
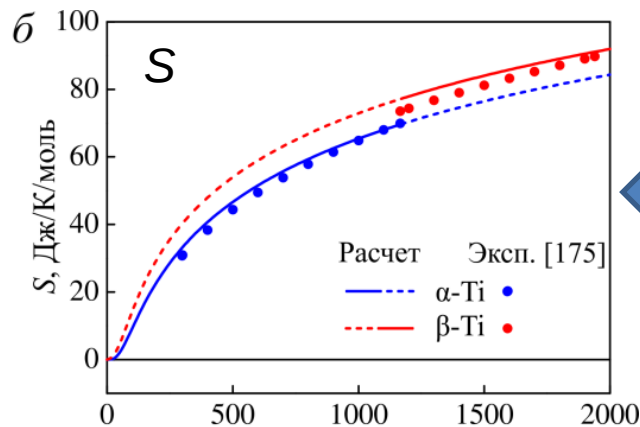
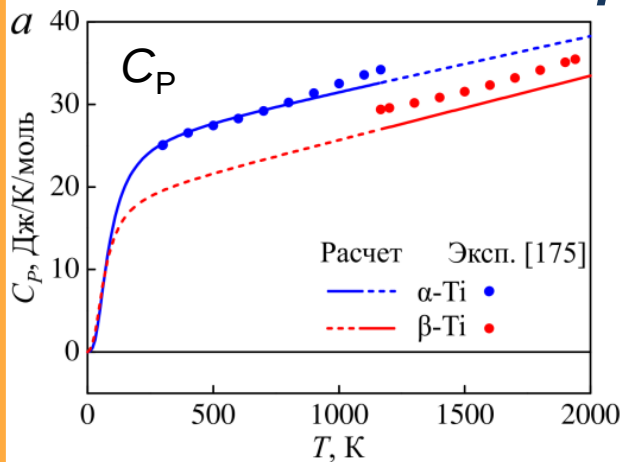
Макс. частота фононов выше в α -Ti.

Термодинамические свойства Ti

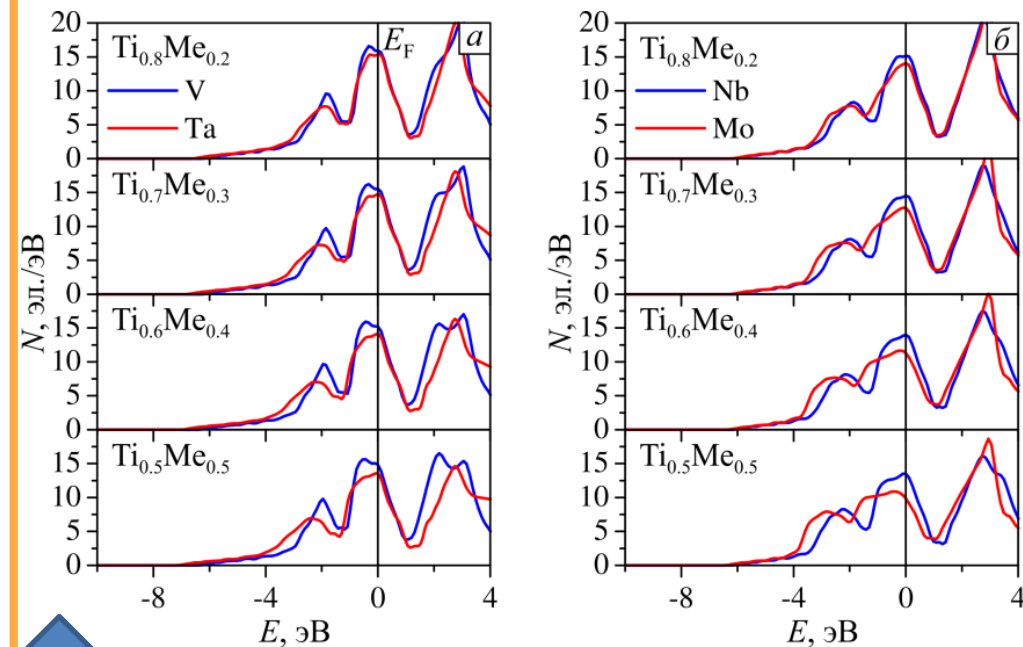
Зависимость решеточной теплоемкости (а), колебательной энтропии (б), энтальпии (в) и энергии Гиббса (г) α и β фаз титана. Экспериментальные значения из работы [175] показаны точками



Результаты расчетов удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными.

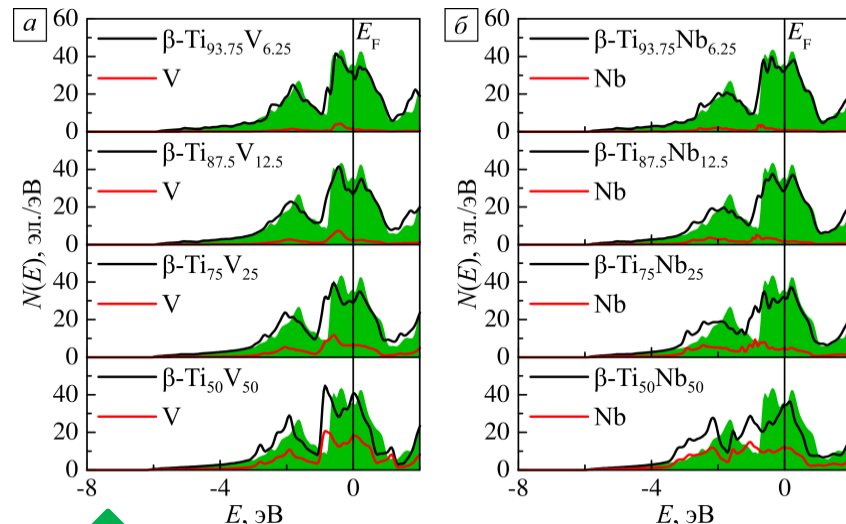


Электронная структура сплавов Ti-Me



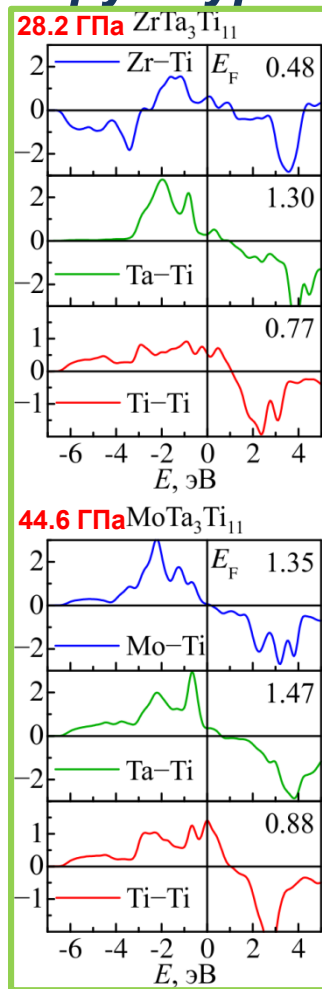
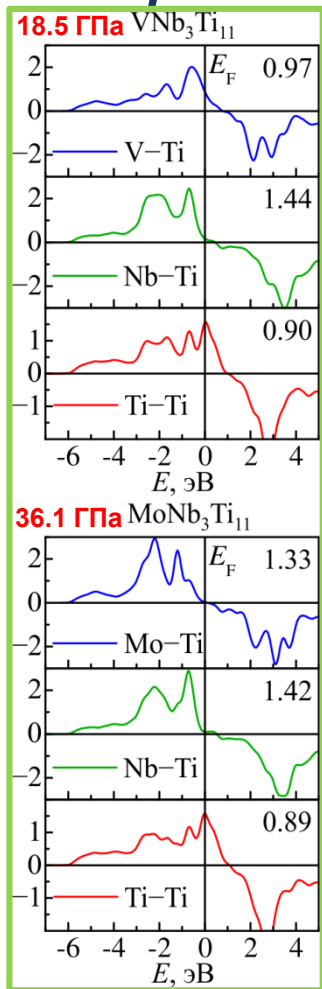
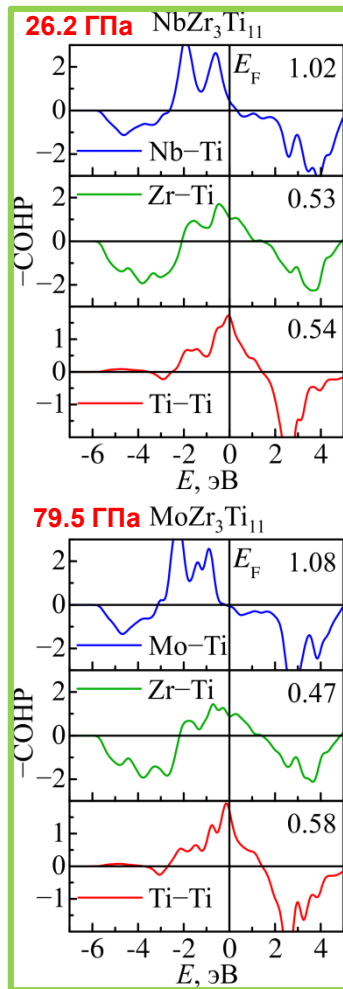
Изменение ПЭС Ti-Me разупорядоченных сплавов от концентрации второго компонента

- Мо имеет на один d -электрон больше, чем Nb, что ведет к сдвигу ПЭС в сторону отрицательных энергий, понижению высоты пика на уровне Ферми и уширению обоих пиков.
- Увеличение числа электронных состояний ведет к усилению металлической связи и ослаблению направленности связей.



Изменение ПЭС Ti-Me упорядоченных сплавов от концентрации второго компонента

Электронная структура сплавов XY_3Ti_{11}



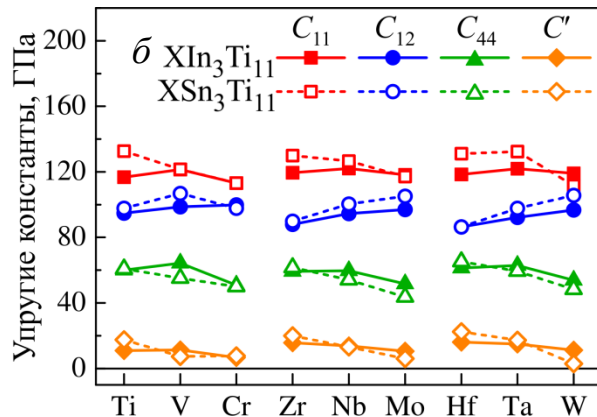
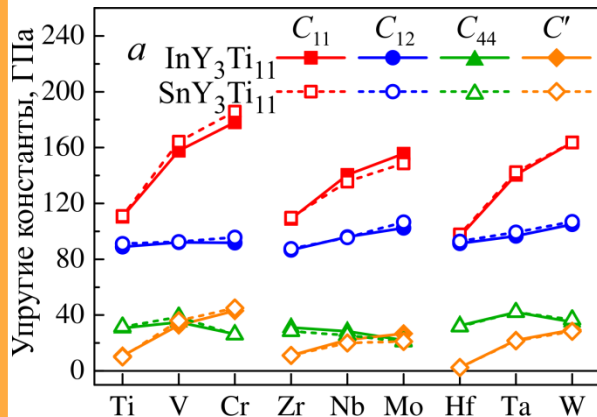
- Наименьшее значение E_F , полученное для сплава VNb_3Ti_{11} , соответствует меньшей прочности связи V–Ti, что обусловлено меньшим радиусом ванадия (1.22 Å) по сравнению с радиусами Mo (1.30 Å) и Ta (1.34 Å).
- В сериях сплавов с одним и тем же элементом на Y-позиции большая заселенность орбиталей на связях X–Ti коррелирует с большим значением модуля Юнга.
- Данная корреляция может быть менее совершенной в сплавах с разными Y-атомами, поскольку в этом случае необходимо учитывать влияние Y–Ti связей.

Crystal Orbital Hamilton Populations (COHP) – заселенность кристаллических орбиталей Гамильтона, позволяет разделить ПЭС на связующие и разрыхляющие состояния в методах DFT с нелокальным базисом.

$$ICOHP = \int_{-\infty}^{E_F} COHP(E) dE$$

Отражает прочность связей

Упругие свойства в сплавах $\text{In}(\text{Sn})\text{Y}_3\text{Ti}_{11}$ и $\text{XIn}(\text{Sn})_3\text{Ti}_{11}$



Наименьшее значение C' :
 $\text{InHf}_3\text{Ti}_{11}$ и $\text{SnHf}_3\text{Ti}_{11}$
 (слева), $\text{CrIn}_3\text{Ti}_{11}$ и
 $\text{WSn}_3\text{Ti}_{11}$ (справа)

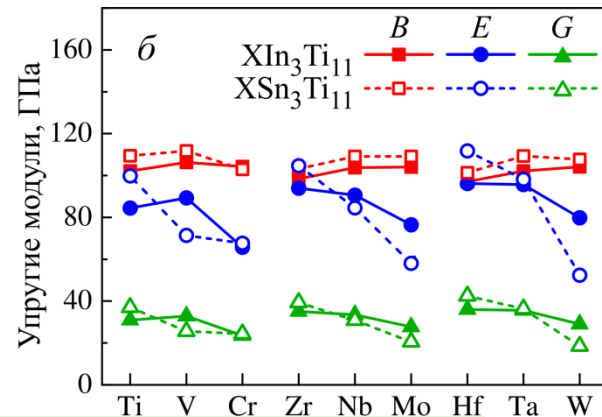
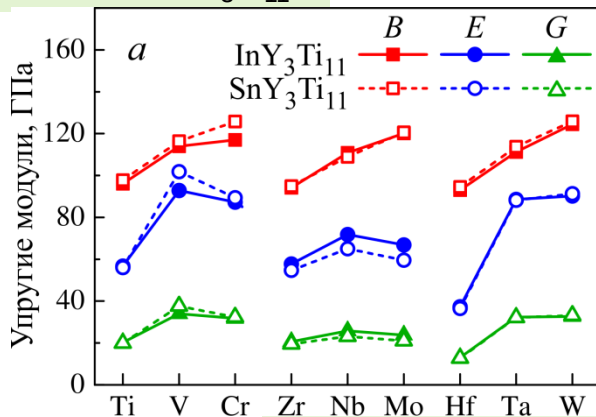
Теоретические упругие константы сплавов $\text{XY}_3\text{Ti}_{11}$

Наименьший E :

$\text{InHf}_3\text{Ti}_{11}$ (37.3 ГПа),
 $\text{SnHf}_3\text{Ti}_{11}$ (36.5 ГПа),
 $\text{CrIn}_3\text{Ti}_{11}$ (65.7 ГПа),
 $\text{WSn}_3\text{Ti}_{11}$ (52.4 ГПа).

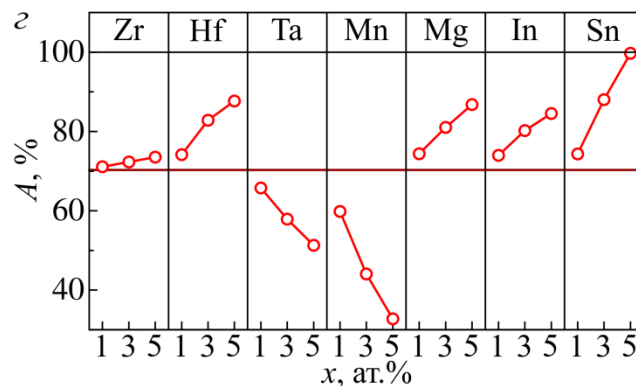
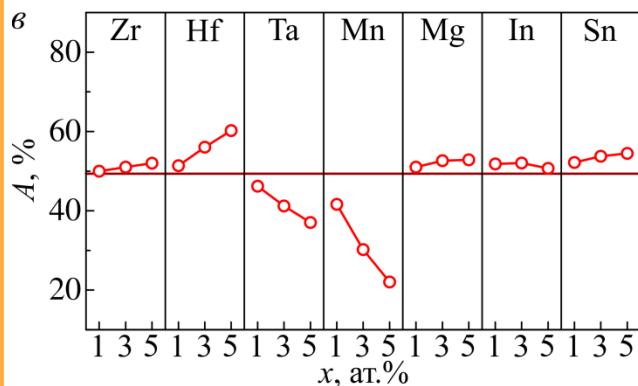
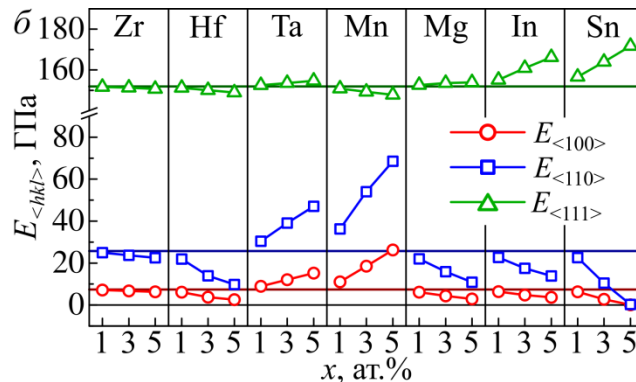
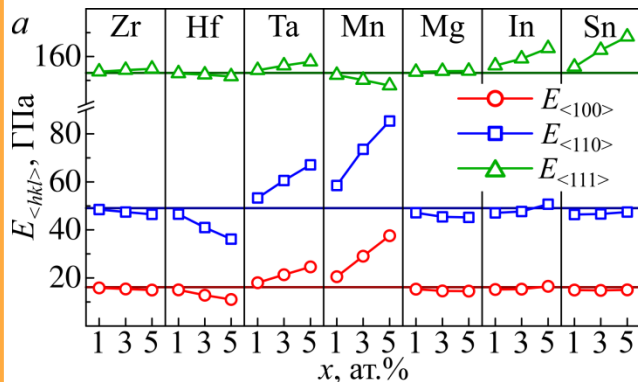
Для CP-Ti и Ti-6Al-4V

$E \approx 105\text{--}120$ ГПа (эксп.).



Теоретические упругие модули сплавов $\text{XY}_3\text{Ti}_{11}$

Анизотропия модуля Юнга



- Высокая анизотропия модуля Юнга обусловлена низкими значениями $E_{<100>}$, а не формированием направленных ковалентных связей в рассмотренных сплавах. Именно поэтому для сплавов с Hf получены достаточно высокие значения A .
- Для всех рассмотренных сплавов давление Коши $P_C > 0$ ГПа, что указывает на низкую степень ковалентности связей.

$$A = (E_V - E_R)/(E_V + E_R) \cdot 100\%$$

$$P_C = C_{11} - C_{44}$$

Значения модуля Юнга вдоль направлений $<100>$, $<110>$ и $<111>$ (а, б), а также коэффициента анизотропии (в, г) для сплавов Ti–Mo5–Mex (а, в) и Ti–Nb25–Mex (б, г). Горизонтальные линии соответствуют значениям, полученным для сплавов Ti–Mo5 и Ti–Nb25