

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

УДК 538.91

DOI: 10.17223/00213411/65/8/42

ВЛИЯНИЕ ПРИМЕСЕЙ V, Nb И Mo НА СТАБИЛЬНОСТЬ ФАЗ ТИТАНА*

С.О. Каспарян, А.В. Бакулин, С.Е. Кулькова

Институт физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск, Россия

Методом проекционных присоединенных волн в рамках теории функционала электронной плотности проведено систематическое изучение атомной и электронной структуры трех фаз (α , β и α'') титана, легированного V, Nb и Mo, в зависимости от концентрации примеси. Определены особенности электронной структуры, обусловленные примесными элементами. Установлены критические концентрации примесей, при которых происходят структурные превращения. Выявлена корреляция между критической концентрацией примеси и плотностью валентных электронов. Показано, что β -стабилизирующий эффект ванадия выражен сильнее, чем ниобия, но слабее, чем Mo. Полученные тенденции согласуются с имеющимися экспериментальными результатами.

Ключевые слова: фазовая стабильность, электронная структура, теория функционала электронной плотности, титан, примеси.

Введение

Титан и сплавы на его основе благодаря уникальным механическим свойствам, среди которых эффект памяти формы, сверхпластичность, высокая удельная прочность и другие, широко применяются в различных технологических приложениях от аэрокосмической промышленности до медицины [1]. Одним из перспективных направлений применения сплавов на основе титана является 3D-печать деталей и узлов [2, 3]. Металлические имплантаты из титана и его сплавов интенсивно используются в современной ортопедии [4, 5]. Известно, что титан при температуре 1670 °С кристаллизуется в β -фазу с объемно-центрированной кубической структурой, которая, в свою очередь, при температуре ~ 882 °С превращается в α -фазу с гексагональной плотноупакованной структурой [6]. Эти фазы отличаются как механическими свойствами, так и растворимостью различных примесей. Легирование позволяет не только варьировать температуру фазового перехода, но и контролировать механические свойства титана, а также стабилизировать дополнительные фазы, например, α' , α'' , ω_1 , ω_2 [7–9]. Для разработки новых многокомпонентных сплавов на основе титана различного назначения необходимо понимать влияние примесей на механизмы структурных превращений и взаимосвязь между формирующимися фазами в легированном титане. В этой связи такие исследования находятся в фокусе как экспериментаторов, так и теоретиков. В частности экспериментальные исследования сплавов титана с β -структурой показали, что данные материалы имеют наиболее близкие к желаемым биомеханические свойства из-за их способности сохранять однофазную структуру до комнатных температур [10–12].

Согласно исследованиям, проведенным в [13, 14], ОЦК-решетка титана, содержащая свыше ~ 20 ат.% ванадия, характеризуется высокой механической стабильностью. Уменьшение концентрации V до ~ 6 ат.% может приводить к фазовому превращению $\beta \rightarrow \alpha$ [13]. В то же время при концентрации ванадия, равной 18.75 ат.%, сжатие β -фазы также может индуцировать $\beta \rightarrow \alpha$ -переход. Более того, расчеты предсказывают фазовое превращение $\alpha'' \rightarrow \alpha$ при уменьшении атомного объема до $14.9 \text{ \AA}^3/\text{атом}$, где α'' -фаза имеет орторомбическую структуру. Стоит отметить, что $\beta \rightarrow \alpha$ -превращение является обратимым, в отличие от $\alpha'' \rightarrow \alpha$, что обусловлено недостаточным содержанием β -стабилизирующего элемента. Последнее согласуется с результатами моделирования методом молекулярной динамики [13]. Считается, что формирование α'' -фазы в титановых сплавах обусловлено β -стабилизирующими элементами, такими как V, Nb, Mo, вследствие их особенности образовывать непрерывный ряд твердых растворов в β -Ti, но эти элементы имеют низкую растворимость в α -Ti [13]. Расчеты показали, что α'' -фаза формируется, если содержание ванадия в спла-

* Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, проект FWRW-2022-0001. Численные расчеты проводились на суперкомпьютере «СКИФ Cyberia» в Томском государственном университете.

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>