

УДК 538.9

Сравнительные характеристики альфа титана в микро- и наноструктурах

Фомин М.Г., Чан Ван Туан, Чан Сюаньхао

Научный руководитель: Ерофеева Галина Васильевна, профессор, д.н.п., член-корреспондент РАН (№ диплома – 6051)

Национальный Исследовательский Томский политехнический университет

Email: tuanmanu1993@gmail.com

Аннотация

Титан, как один из современных материалов, имеет высокую плотность, прочность и устойчивость к коррозии. В данной работе рассмотрены свойства альфа модификации титана в микро- и наноструктуре, приведены поверхность Ферми и зона Бриллюэна для данной модификации. Кроме того, представлены таблица сравнительных характеристик альфа титана в микро- и наноструктуре, технологии получения и применения в промышленной и медицинской областях.

Ключевые слова: наноструктура, альфа титан, прямая решетка, обратная решетка, поверхность Ферми, зона Бриллюэна, классический размерный эффект.

Properties of alpha titanium in nanostructures and microstructures

Mark F.G., Tran Van Tuan, Chang Xuanhao

Tomsk Polytechnic University

Scientific Supervisor: Prof., Dr. Erofeeva G. V.

E-mail: tuanmanu1993@gmail.com

Abstract

Titanium, as a modern material, has high density, light durability and high corrosion resistance. In this article the author showed the properties of a modification titanium in micro, nanostructures, Fermi surface and Brillouin zone of alpha modification titanium. Besides, the author provided the table of comparative characteristics of alpha titanium in micro, nanostructures and the production technology and applications in medical and industrial fields.

Key words: nanostructure, alpha titanium, direct lattice, reciprocal lattice, Fermi surface, Brillouin zone, the classic size effect.

Введение

Титан – уникальный по своим свойствам металл. Благодаря удивительным свойствам его называют металлом будущего. Титан в основном существует в двух кристаллических модификациях: α -Ti с гексагональной плотноупакованной решёткой, β -Ti с кубической объёмно-центрированной упаковкой. Объектом исследования в данной работе является α -Ti, который является основным компонентом во многих марках технического титана и его сплавах.

Свойство α -Ti в микро- и наноструктурах

α -Ti обладает гексагональной плотноупакованной структурой с параметрами решетки $a=2,951 \text{ \AA}$, $c=4,697 \text{ \AA}$. Соответственно, отношение c/a составляет 1,587.

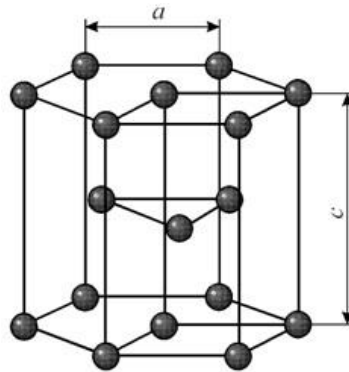


Рисунок 1. Прямая решетка α -Ti

Векторы трансляций прямой решетки:

$$\vec{a}_1 = \frac{\sqrt{3}a}{2} \vec{x} + \frac{a}{2} \vec{y}; \quad \vec{a}_2 = -\frac{\sqrt{3}a}{2} \vec{x} + \frac{a}{2} \vec{y}; \quad \vec{a}_3 = c \vec{z}$$

$$|\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = a; \quad |\vec{a}_3| = c$$

Векторы трансляций обратной решетки определяются следующими формулами:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a} \vec{x} + \frac{2\pi}{a} \vec{y}; \quad \vec{b}_2 = -\frac{2\pi}{\sqrt{3}a} \vec{x} + \frac{2\pi}{a} \vec{y}; \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi}{c} \vec{z}$$

$$|\vec{b}_1| = |\vec{b}_2| = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a}; \quad |\vec{b}_3| = \frac{2\pi}{c}$$

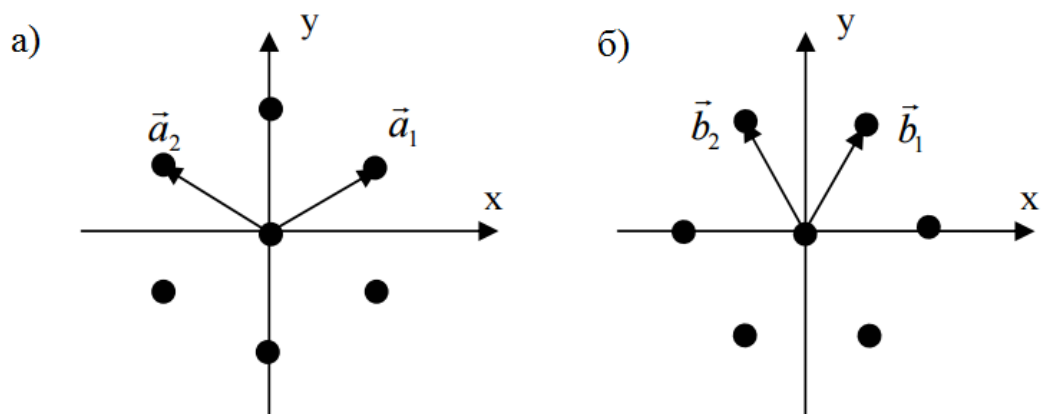


Рисунок 2. Векторы трансляций прямой решетки (а) и обратной решетки (б)

Таким образом, обратная решетка гексагональной структуры α -титан является гексагональной, повернутой на угол 30° относительно прямой решетки вокруг оси Oz.

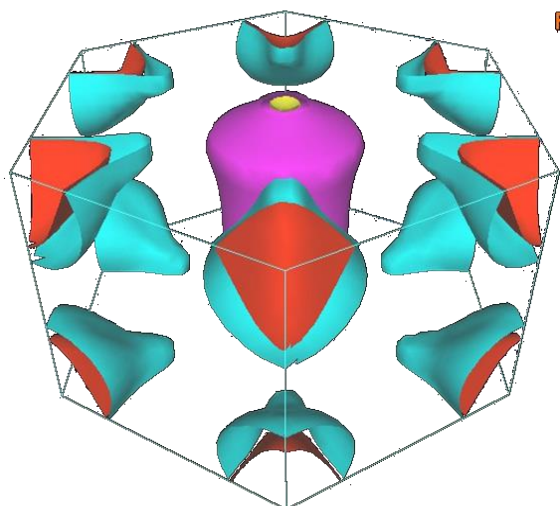


Рисунок 3. Поверхности Ферми α -Ti [1]

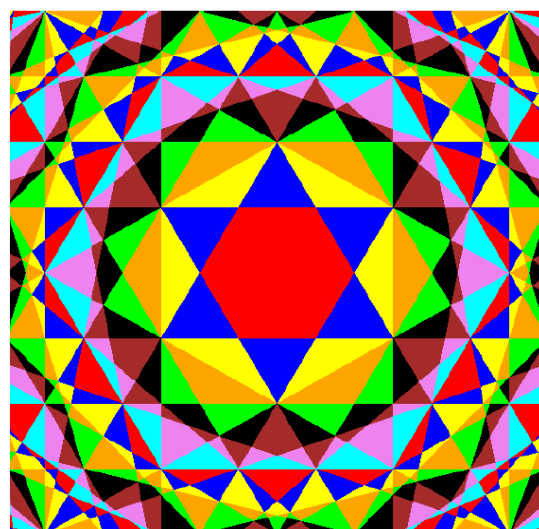


Рисунок 4. Зоны Бриллюэна α -Ti [2]

Как видно из рисунка 3, поверхность Ферми α -Ti представляет собой сложную геометрическую структуру, содержащую по четыре уровня на каждую элементарную ячейку. На рисунке 4, красная центральная область соответствует первой зоне Бриллюэна.

Как следует из таблицы 1, значения плотности, температуры плавления и температуры кипения титана для зерен размером 80 нм практически не изменяются по сравнению с микроструктурами. Изменение механических свойств титана связано с влиянием классических размерных эффектов. Квантовые эффекты не влияют на изменение свойства титана, поскольку длина волны де Бройля находится в интервале от 0.1 нм до 1.0 нм.

Таблица 1. Сравнительные характеристики α -Ti в микроструктурах и в наноструктурах [3, 4]

Свойства	Микроструктура	Наноструктура (размер зерен 80 нм)
Плотность	4,540 г/см ³	4.506 г/см ³
Температура плавления	1668 °С	1660 °С
Температура кипения	3287 °С	3287 °С
Микротвердость	180 HV	285 HV
Предел текучести	380 МПа	915 Мпа
Предел прочности	460 МПа	1100 Мпа

Технология получения

Одним из распространенных методов получения наноструктурного титана является механосинтез. Механическое воздействие при измельчении материалов является импульсным, т.е. возникновение поля напряжений и его последующая релаксация только в момент соударения частиц и в короткое время после него. Механическое воздействие является также и локальным, так как происходит там, где возникает и затем релаксирует поле напряжений.

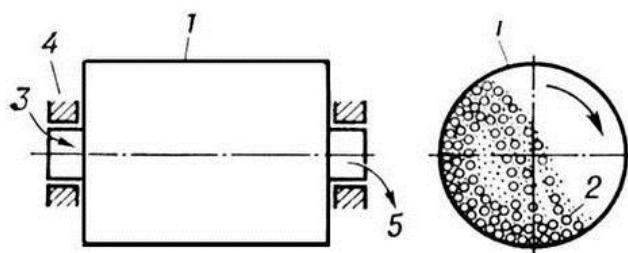


Рисунок 5. Барабанная мельница (шаровая): 1 – барабан; 2 – дробящие тела (шары); 3 – загрузка исходного материала; 4 – подшпикники; 5 – разгрузка измельченного материала.

Благодаря импульсности и локальности в небольших областях материала в течение короткого времени сосредотачиваются большие нагрузки. Это приводит к возникновению в материале дефектов, напряжений, полос сдвига, деформаций, трещин. В результате происходит измельчение вещества.

Наиболее распространенными методами получения объемных наноструктурных материалов на основе больших деформаций являются: кручение под давлением, равноканальное угловое прессование, аккумулялируемая прокатка, винтовая экструзия и мультиосевая деформация.

В работе [5] была исследована эволюция микроструктуры технически чистого титана ВТ1-0 в ходе прокатки до 93% при 77 К и 293 К. В микроструктуре титана в исходном состоянии наблюдались равноосные зерна со средним размером 15 мкм.

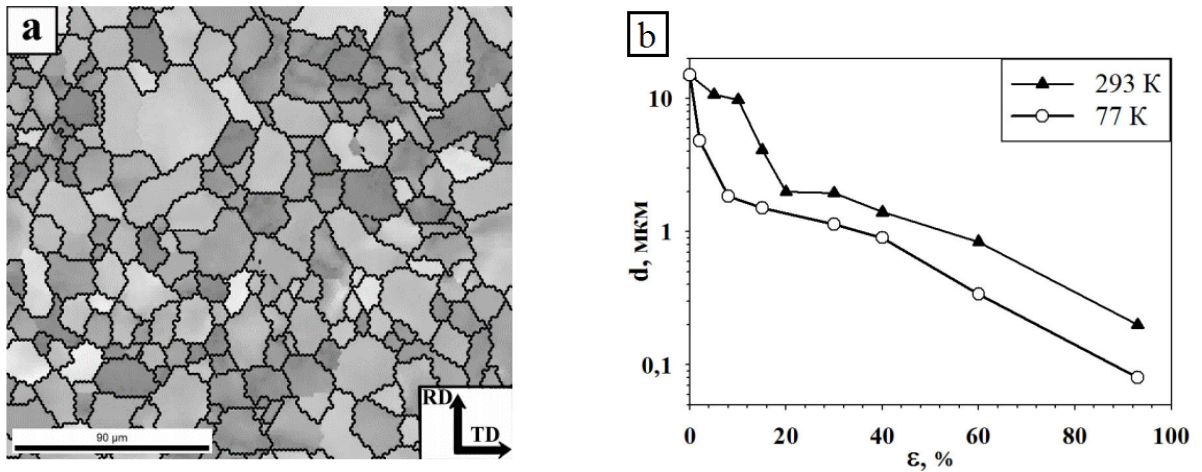


Рисунок 5. Микроструктура титана VT1-0 в исходном состоянии (а) и изменение среднего размера зерна d в титане с ростом степени деформации при комнатной (293 К) и криогенной (77 К) прокатке (b) [5].

Прокатка титана VT1-0 на 93% приводит к формированию наноструктуры со средним размером зерна ~ 80 нм и 200 нм при 77 К и 293 К, предел прочности на растяжение составил 1180 МПа и 910 МПа, соответственно.

Применение титана

Титан и его сплавы нашли широкое применение в технике ввиду своей высокой механической прочности, которая сохраняется при высоких температурах, коррозионной стойкости, жаропрочности, удельной прочности, малой плотности и прочих полезных свойств. Высокая стоимость титана и его сплавов во многих случаях компенсируется их большей работоспособностью, а в некоторых случаях они являются единственным материалом, из которого можно изготовить оборудование или конструкции, способные работать в данных конкретных условиях.

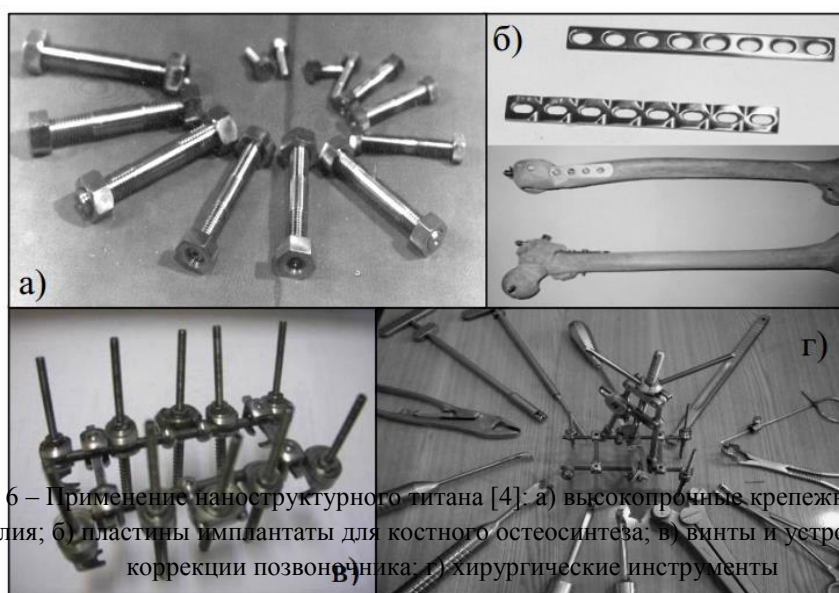


Рисунок 6 – Применение наноструктурного титана [4]: а) высокопрочные крепежные резьбовые изделия; б) пластины имплантаты для костного остеосинтеза; в) винты и устройство для коррекции позвоночника; г) хирургические инструменты

В настоящее время использование титановых сплавов с наноструктурой, обеспечивающей высокие механические свойства при статическом и циклическом нагружении, позволяет разработать новые конструкции имплантатов с улучшенными функциональными свойствами, областью применения которых, в основном, является медицина: ортопедия, травматология, стоматология и др. [6,7].

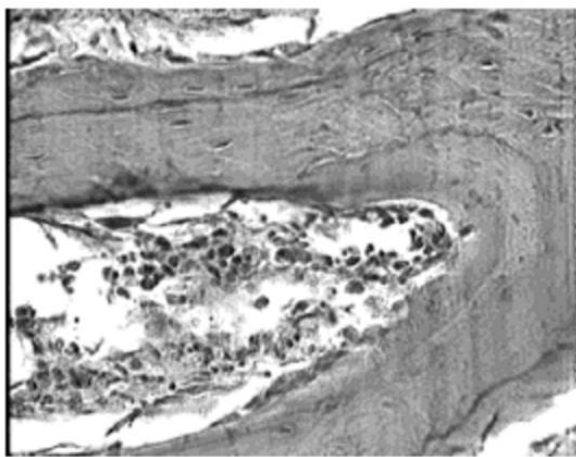


Рис 7 – Образование костной ткани в межтрабекулярном пространстве губчатой кости через 6 месяцев после имплантации титана.

Кроме того, нанотитан в полной мере соответствует требованиям биологической совместимости, а наносимые покрытия придают имплантату биоактивные свойства [8]. Титан не вызывает деструктивно-дегенеративных процессов костной ткани в послеоперационном периоде [9]. При изменении морфологии и состава оксида пленки значительно усиливаются протеиновое взаимодействие и последующая адгезия клеток, благодаря чему повышаются параметры остеоинтеграции наноструктурного титана [10].

Вывод

Рассмотрены прямая и обратная решетки, поверхность Ферми и зоны Бриллюэна α -титана. Проведен сравнительный анализ свойств α -титана в микро- и наноструктурах. Показано, что основное влияние на резкие изменения механических свойства α -титана в наноструктурах оказывают классические размерные эффекты.

Список литературы

1. Флоридский Университет [Электронный ресурс]. Доступ: <http://www.phys.ufl.edu/fermisurface/html/Z022.html>
2. Кембриджский Университет . Департамент высшей математики и теоретической физики [Электронный ресурс]. Доступ: <http://www.damtp.cam.ac.uk/user/rrh/notes/bzpics.pdf>
3. American Elements. Производственное материаловедение [Электронный ресурс]. Доступ: <https://www.americanelements.com/titanium-nanoparticles-7440-32-6>
4. Zhernakov, V. S. The developing of nanostructured SPD Ti for structural use / V. S. Zhernakov, V. V. Latysh, V. V. Stolyarov, A. I. Zharikov, R. Z. Valiev // Scripta Materialia. – 2001. – 44. – P. 1771.

5. Дьяконов Г. С., Жеребцов С. В., Салищев Г. А. Эволюция микроструктуры титана VT1-0 в ходе комнатной и криогенной прокатки //Вестник Нижегородского университета им. НИ Лобачевского. – 2013. – №. 2-2.Корпорация ВСМПО
6. Институт Физики Прочности и Материаловедения [Электронный ресурс]. Доступ: <http://www.ispms.ru/ru/production/42/>
7. Научно-образовательный и инновационный центр «Наноструктурные материалы и нанотехнологии»[Электронный ресурс]. Доступ: <http://nano.bsu.edu.ru/nanotitan>
8. Павлова Л. А. и др. Морфологический анализ костного дефекта при использовании импланта титана, обработанного пескоструйным методом с различными композитными покрытиями в динамике первого месяца регенерации //Научные ведомости Белгородского государственного университета. Серия: Медицина. Фармация. – 2010. – Т. 4. – №. 9.
9. Каюмов Ф. И. Клинико-экспериментальное обоснование применения дентальных имплантатов из наноструктурного титана //Медицинский вестник Башкортостана. – 2012. – Т. 7. – №. 1.
10. Валиев Р. З. и др. Наноструктурный титан для биомедицинских применений: новые разработки и перспективы коммерциализации //Российские нанотехнологии. – 2008. – Т. 3. – №. 9-10. – С. 80-89.