

УДК 544.7-022.532

## Изучение характеристик альфа титана в микро- и наноструктурах

Юань Цзяхун , Дин Южунь , Чжао Ицзунь

*e-mail: [531048368@qq.com](mailto:531048368@qq.com)*

*Национальный исследовательский Томский политехнический университет*

*Научные руководители: Ерофеева Г.В, Гирякова Ю.Л.*

### Аннотация

Титан — современный металл, который имеет высокую плотность при сохранении на удовлетворительном уровне пластичности, высокую усталостную прочность, высокую биосовместимость и устойчивость к коррозии. Существует в двух кристаллических модификациях:  $\alpha$ -Ti с гексагональной плотноупакованной решёткой,  $\beta$ -Ti с кубической объёмно-центрированной упаковкой. В данной работе, сравниваются свойства альфа модификации титана в микро- и наноструктурах, приводятся поверхность Ферми и зона Бриллюэна для данной модификации, а также таблица сравнительных характеристик альфа титана в микро- и наноструктурах, описываются технологии получения и применения титана. Титан применяется в химической промышленности, военной промышленности , промышленных процессах (опреснительных установках, процессах получения целлюлозы и бумаги), автомобильной промышленности, сельскохозяйственной промышленности, пищевой промышленности и т. д. а нанотитан, это сверхпрочный материал для имплантатов.

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

# **Properties of alpha titanium in nanostructures and microstructures**

*Jiahong Yuan , Yourun Ding , Yizun Zhao*

*e-mail: [531048368@qq.com](mailto:531048368@qq.com)*

*Tomsk Polytechnic University*

*Scientific Supervisor: Erofeeva G. V. , Giryakova Yu.L.*

## **Abstract**

**Titanium is a modern metal that has a high density while maintaining a satisfactory level of ductility, high fatigue strength, high biocompatibility and corrosion resistance. There are two crystal modifications:  $\alpha$ -Ti with a hexagonal close-packed lattice,  $\beta$ -Ti with cubic bulk-centered packing. In this paper, the properties of the alpha modification Titanium in micro- and nanostructures, the Fermi surface and the Brillouin zone for this modification are given, as well as a table of comparative characteristics of alpha titanium in micro- and nanostructures, are described by technicians Of the production and use of titanium. Titanium is used in the chemical industry, in the military industry, in industrial processes (desalination plants, pulp and paper processes), in the automotive industry, in the agricultural industry, in the food industry and many more, and nanotitanium is an extremely strong material for implants.**

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

## **Введение**

Титан — элемент 4 группы, четвёртого периода периодической системы химических элементов Д. И. Менделеева, с атомным номером 22. Простое вещество титан — лёгкий прочный металл серебристо-белого цвета. Существует в двух кристаллических модификациях:  $\alpha$ -Ti с гексагональной

плотнупакованной решёткой,  $\beta$ -Ti с кубической объёмно-центрированной упаковкой, температура полиморфного превращения  $\alpha \leftrightarrow \beta$  883 °C.[1]

Вид и параметры прямой и обратной решеток  $\alpha$ -Ti приведены на рис.1 и 2 соответственно.

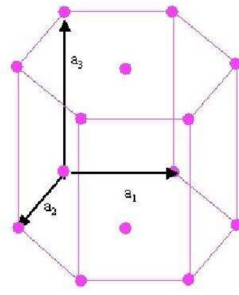


Рисунок 1. Прямая решетка  $\alpha$ -Ti

Параметры прямой решетки:  $a=2,951 \text{ \AA}$ ,  $c=4,697 \text{ \AA}$ .

$$|a_1|=|a_2|=a; |a_3|=c$$

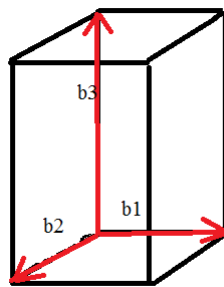


Рисунок 2. Обратная решетка  $\alpha$ -Ti

Параметры обратной решетки:  $|b_1|=|b_2|=4\pi/\sqrt{3}*a$   $|b_3|=2\pi/c$

Поверхность Ферми — поверхность постоянной энергии в  $k$ -пространстве, равной энергии Ферми в металлах или вырожденных полупроводниках. Знание формы поверхности Ферми играет важную роль во всей физике металлов и вырожденных полупроводников, так как благодаря вырожденности электронного газа транспортные свойства его, такие как проводимость, магнетосопротивление зависят только от электронов вблизи поверхности Ферми. Поверхность Ферми разделяет заполненные состояния от пустых при абсолютном нуле температур.

Поверхность Ферми не является реальной поверхностью, а лишь наглядной иллюстрацией поведения электронов в металлах. Картины поверхностей Ферми объясняют такие свойства металлов, как блеск, ковкость, электропроводимость и теплопроводность. Собственно металл можно определить как твердое тело, обладающее поверхностью Ферми.

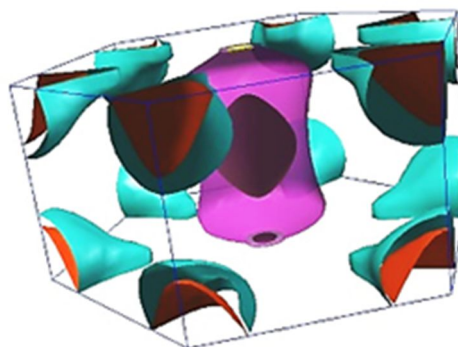


Рисунок 3. Поверхности Ферми  $\alpha$ -Ti

Зона Бриллюэна — ячейка обратной решетки кристалла, содержащая все трансляционно-неэквивалентные точки. Поскольку состояния квазичастиц твёрдого тела, в которых значения квазиимпульсов  $p$  отличаются на один из векторов трансляции обратной решётки, являются эквивалентными, то ячейка Вигнера-Зейтца выделяет в пространстве квазиимпульсов области, включающие в себя все неэквивалентные значения квазиимпульсов  $p$ , характеризующие состояние квазичастиц.[2]

Поверхность Ферми приведена на рисунке 3, зона Бриллюэна  $\alpha$ -Ti приведены на рисунке 4.

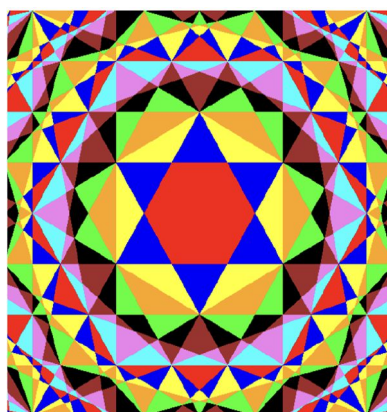


Рисунок 4. Зоны Бриллюэна  $\alpha$ -Ti

Поверхность Ферми  $\alpha$ -Ti — сложная структура, содержащая по четыре уровня в каждой ячейке (рисунок 3). В зоне Бриллюэна  $\alpha$ -Ti красной центральной области соответствует первая зона Бриллюэна (рисунок 4).

При изменении размеров зерна меняются и свойства материала. Сравнительные характеристики  $\alpha$ -Ti в микроструктуре и в наноструктуре приведены в таблице 1.

Таблица 1. Сравнительные характеристики  $\alpha$ -Ti в микроструктуре и в наноструктуре

Свойства	Микроструктура	Наноструктура (80 нм )
Плотность	4,540 г/см <sup>3</sup>	4.506 г/см <sup>3</sup>
Температура плавления	1941 К	1933 К
Температура кипения	3560 К	3560 К
Микротвердость	1700 МПа	3300 МПа
Предел текучести	270 МПа	1100 МПа
Предел прочности	400 МПа	1160 МПа
Пластичность при растяжении	23 %	6%

По сравнению с микроструктурным титаном плотность, температура плавления и температура кипения наноструктурного титана изменяются мало (таблица 1). А пластичность при растяжении, предел текучести и прочности

нанотитана изменяются. Изменение механических свойств титана связано с влиянием классических размерных эффектов. Квантовые эффекты не влияют на изменение свойств титана, поскольку длина волны де Бройля для металлов находится в интервале от 0.1 нм до 1.0 нм. [3]

### **Получение наноструктурного титана**

Существует несколько вариантов получения наноструктурного титана, однако, самой распространенной является технология получения наноструктурного титана, включающая в себя деформационную обработку исходной заготовки технически чистого титана методом интенсивной пластической деформации, состоящей из многократного одноосного прессования в пресс-форме, многоходовой прокатки и низкотемпературного отжига.[4]

Сочетание пластической деформации и нагрева способствует дальнейшей эволюции полученной после прессования структуры: трансформации субзеренных границ в зеренные, формированию новых зерен, снижению плотности дислокаций за счет одновременно протекающих процессов возврата и динамической рекристаллизации. Таким образом, в результате комбинированной обработки в технически чистом титане формируется нанокристаллическая структура, в которой до 90% составляют зерна со средним размером 100 нм.

Полученный материал имеет повышенную прочность, усталостную долговечность и биосовместимость, повышение механических свойств титана.[5]

### **Применение нанотитана**

Основными областями применения разработанной опытно-промышленной технологии могут быть медицина, ортопедия, травматология, стоматология. И нанотитан, это сверхпрочный материал для имплантатов.[6]



Результатом стала разработка технологии получения сверхпрочного материала – нанотитана. Исходным материалом служит чистый титан, его сильно деформируют под высоким давлением при относительно небольшом нагреве. Этот процесс основывается на так называемом методе интенсивной пластической деформации. Зарубежные коллеги тоже научились получать нанотитан, но их образцы микроскопических размеров. В уфимских же лабораториях так называемые «прутки» достигают длины в несколько метров. А из такого «сырья» можно делать, например, имплантаты. В медицине и сейчас применяют конструкции из сплавов титана, но имплантаты из нанотитана в два раза прочнее и биологически совместимы с организмом человека – они не вызывают реакции отторжения и аллергии. Помимо этого наноимплантаты значительно легче и изящнее конструкций, которые сегодня использует медицина. Такой имплантат не нуждается в замене, к тому же с ним человек сохраняет дееспособность. [6]

## Список литературы

1. Флоридский Университет [Электронный ресурс]. Доступ: <http://www.phys.ufl.edu/fermisurface/html/Z022.html>
2. Институт Физики Прочности и Материаловедения Доступ: <http://www.ispms.ru/ru/production/42/>
3. Зима Т.М.,Егорова Анастасия. Инновационные подходы в имплантации: наноструктурный титан, получение, свойства и применение// новосибирский государственный технический университет. – 2016. – Т. 4. – №. 9.
4. Пекинский Университет [Электронный ресурс]. Доступ: <http://www.chinabaike.com/z/shenghuo/kp/2016/0519/5065337.html>
5. Научно-образовательный и инновационный центр «Наноструктурные материалы и нанотехнологии» [Электронный ресурс]. Доступ: <http://nano.bsu.edu.ru/nanotitan>
6. Каюмов Ф. И. Клинико-экспериментальное обоснование применения дентальных имплантатов из наноструктурного титана //Медицинский вестник Башкортостана. – 2012. – Т. 7. – No. 1.
7. American Elements. Производственное материаловедение. [Электронный ресурс]. Доступ: <https://www.americanelements.com/titanium-nanoparticles-7440-32-6>