

**УДК 544.7-022.532**

## **Свойства альфа титана в нано – и микроструктурах**

**Люй Цзюньлин, Лю Ланьцзэ, Сюй Янь, Чжоу Даи**

Национальный Исследовательский Томский политехнический университет

e-mail: [larrymath@163.com](mailto:larrymath@163.com)

Научный руководитель : Профессор Ерофеева Г.В.

### **Аннотация**

Титан находится в побочной подгруппе четвертой группы, четвертого периода, с атомным номером 22. Это серебристо-белый переходный металл, который обладает легким весом, высокой прочностью, имеет металлический блеск и высокую коррозионную стойкость. Титан в микро- и наноструктура имеет существенно различно свойств, изучению этих свойств посвящена данная статья. Подчеркивается влияние размерного эффекта на изменение свойств титана. Указаны технологии получения нанопорошков химические методы и физические методы и схема установки для получения нанопорошков титана и его применения(в авиационной технике, ракетостроении, судостроении, химическом машиностроении).

Приведены: типы решеток; схема Векторы трансляций прямой решетки; поверхность Ферми; зона Бриллюэна; дана сравнительная таблица свойств  $\alpha$ -титана в микро- и наноструктурах, отличие свойств; указаны причины изменение свойств и классический размерный эффект.

Ключевые слова: Тип решетки, параметры , особые свойства , поверхность Ферми , зона Бриллюэна , технология получения

## **Properties of alpha titanium in nano - and microstructures**

**Lyu Junlin, Liu Lanze, Xu Yan, Zhou Dayi**

Tomsk Polytechnic University

e-mail: [larrymath@163.com](mailto:larrymath@163.com)

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

Titanium is in the subgroup of the fourth group, the fourth period, with the atomic number 22. This silver-white transition metal, which has a light weight, high strength, has a metallic sheen and high corrosion resistance. Titanium in micro- and nanostructures has significantly different properties, this article is devoted to the study of these properties. The influence of the size effect on the change in the properties of titanium is emphasized. The technology of obtaining nanopowders is given in the chemical methods and physical methods and the scheme of the installation for obtaining titanium nanopowders and its application (in aircraft engineering, rocket engineering, shipbuilding, chemical engineering).

The following types are given: types of lattices; scheme Directions of translations of a direct lattice; the Fermi surface; Brillouin zone; a comparative table of the properties of  $\alpha$ -titanium in micro- and nanostructures, a difference in properties; The reasons for the change in properties and the classical dimensional effect are given.

Key words: Lattice type, parameters, special properties, Fermi surface, Brillouin zone, production technolog

**1. Тип решетки и векторы (прямой и обратной):**

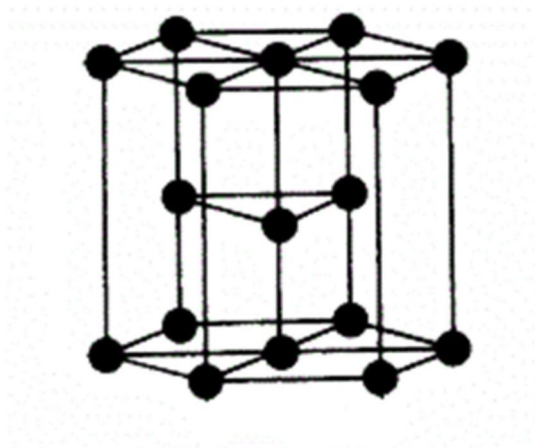


Рис.1 - прямая решётка  $\alpha$ -титана

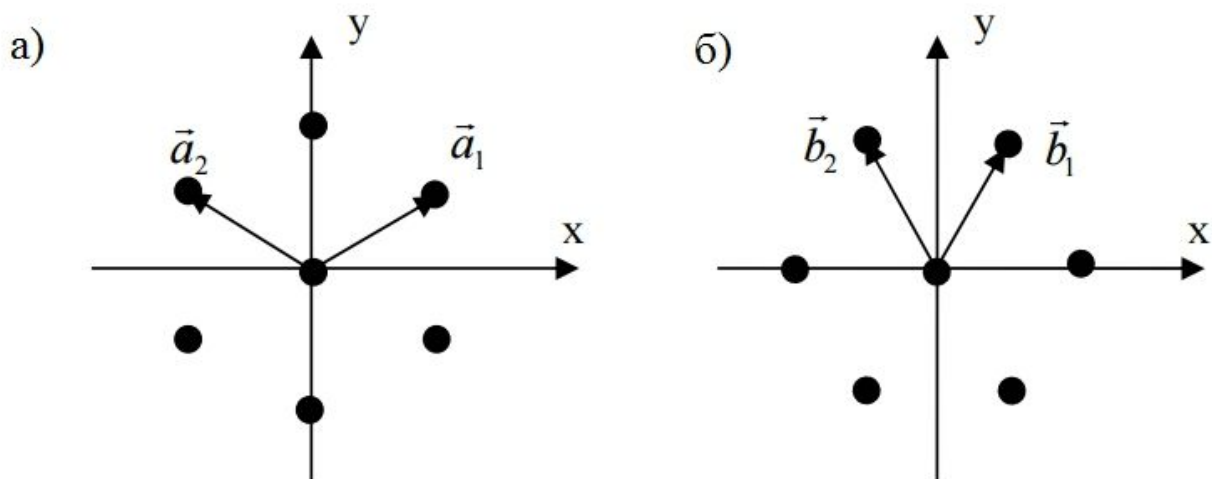


Рис.2 - Векторы трансляций прямой решетки (а) и обратной решетки (б)

**2. свойства  $\alpha$ -титана[1]:**

Название, символ, номер	Титан (Ti), 22
Атомная масса (молярная масса)	47,867(г/моль)
Электронная конфигурация	[Ar] 3d <sup>2</sup> 4s <sup>2</sup>
Радиус атома	147 пм
Структура решётки	гексагональная плотнупакованная ( $\alpha$ -Ti)
Параметры решётки	a=2,951 c=4,697 ( $\alpha$ -Ti)

Отношение $c/a$	1,587
Температура Дебая	380 К
Плотность, кг / м <sup>3</sup>	4540
Температура плавления, $T_{пл}$ , °С	1665
Модуль упругости, Е, ГПа	103,0
Коэффициент термического расширения, $\alpha \times 10^6$ , 1 / °С	8,35
Теплоемкость, с, Дж / г × К	0,52
Удельное электросопротивление, нОм × м	420,0

### ***3. Поверхность Ферми и зона Бриллюэна (титан альфа):***

**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.

**Зона Бриллюэна** — отображение ячейки Вигнера-Зейтца в обратном пространстве. В приближении волн Блоха волновая функция для периодического потенциала решётки твёрдого тела полностью описывается её поведением в первой зоне Бриллюэна.

Топология поверхности Ферми титана имеют сложную форму по сравнению , например, с топологией поверхности Ферми меди, которая не намного отличается от поверхности сферы. Это отличие свойств металлов (Ti и Cu) в микроструктуре объясняется различием топологий поверхностей Ферми.

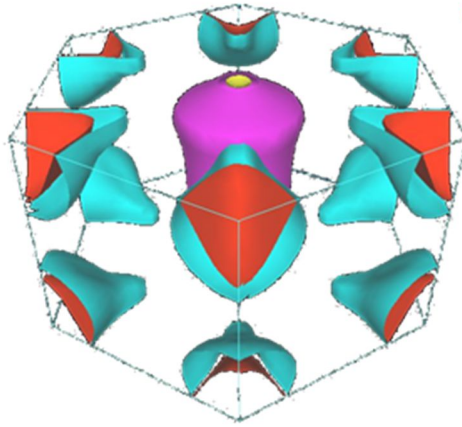


Рис.3 - Поверхности Ферми  $\alpha$ -Ti

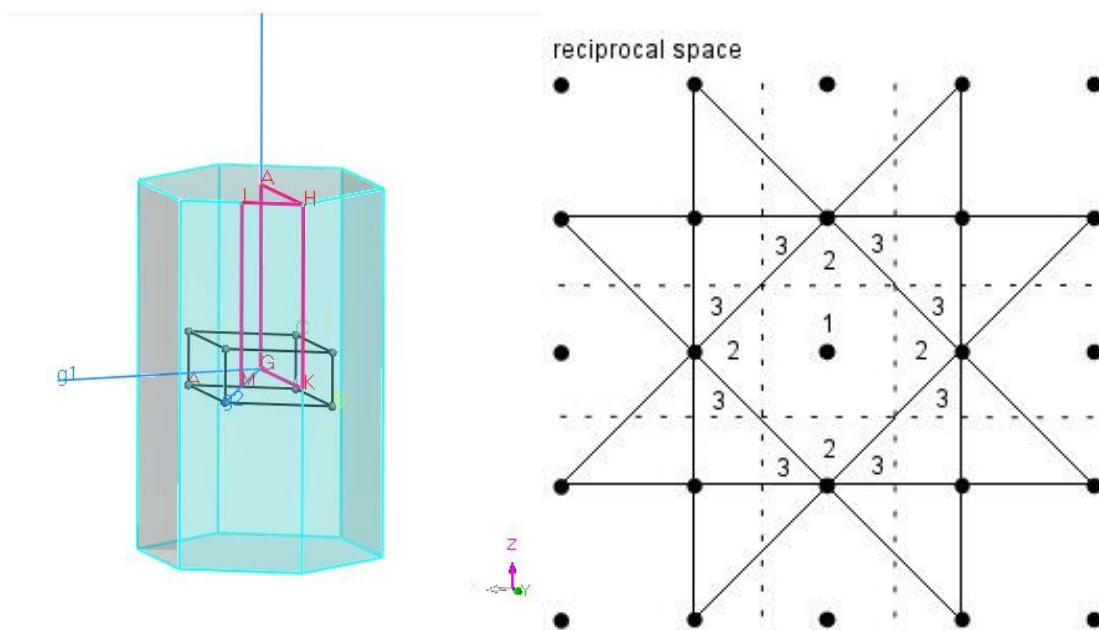


Рис.4 - Бриллюэна  $\alpha$ -Ti

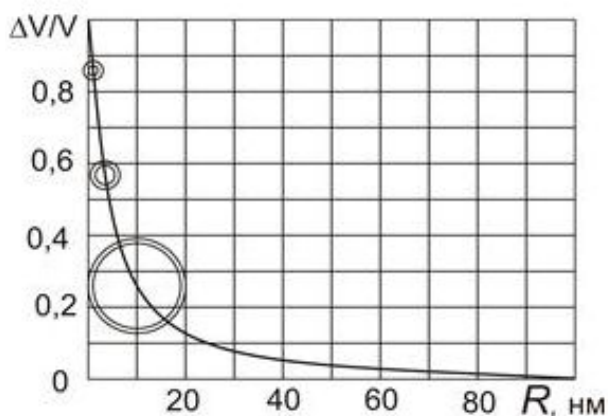
**4. Сравнительная таблица свойств  $\alpha$ -титана в микро- и наноструктурах , отличие свойств[2]:**

Ti	Микроскопическое структур	Нано-структур (2-10нм)
Температура плавления	1668 °С	527 °С--1427°С
Температура кипения	3260°С	3287°С
Плотность	4.54г/см <sup>2</sup>	4,56г/см <sup>2</sup>
Микротвердость	180 НВ	285 НВ
Предел текучести	380 МПа	915 Мпа
Предел прочности	460 МПа	1100 Мпа
Внешность	Серебристо-белый	Черный

## 5. Причины изменение свойств

*Сравнение данных, приведенных в таблице: у nano-титана температура плавления значительно уменьшается по сравнению с микроструктурой, кроме того, существенно увеличивается микротвердость, предел текучести и предел прочности, менее чем титан в микроструктура.*

Причины изменения свойств – размерные эффекты: для nano-структуры 2 нм основное влияние оказывают квантовые размерные эффекты, для nano-структуры 10 нм – классические размерные эффекты[3].



*Рис 5 - зависимость доли объема  $DV/V$ , занимаемого поверхностными атомами от радиуса nano-частицы  $R$*

*$DV/V$  увеличивается при уменьшении радиуса частицы  $Ti$ , поэтому объем занимаемый поверхностными атомами и химическая активность nano-титана увеличивается.*

## 6. Технология получения

Развитие технологий, использующих наноматериалы, сдерживается из-за отсутствия возможности их получения в достаточных количествах. Весьма перспективным в этом отношении является плазмохимический способ. Он дает возможность как синтезировать наноструктурированные материалы с использованием нагрева и сублимации, так и разлагать исходные вещества в плазме высокочастотного индукционного газового разряда.

Есть, правда, и другие способы – электродуговой, лазерный, метод электронного пучка. Но принцип нагрева газа и исходных химических веществ с помощью высокочастотных индукционных плазмотронов (ВЧ-плазмотронов) имеет в сравнении с ними ряд существенных преимуществ. Прежде всего это уникальные параметры плазменных струй, генерируемых в ВЧ-плазмотронах[4].

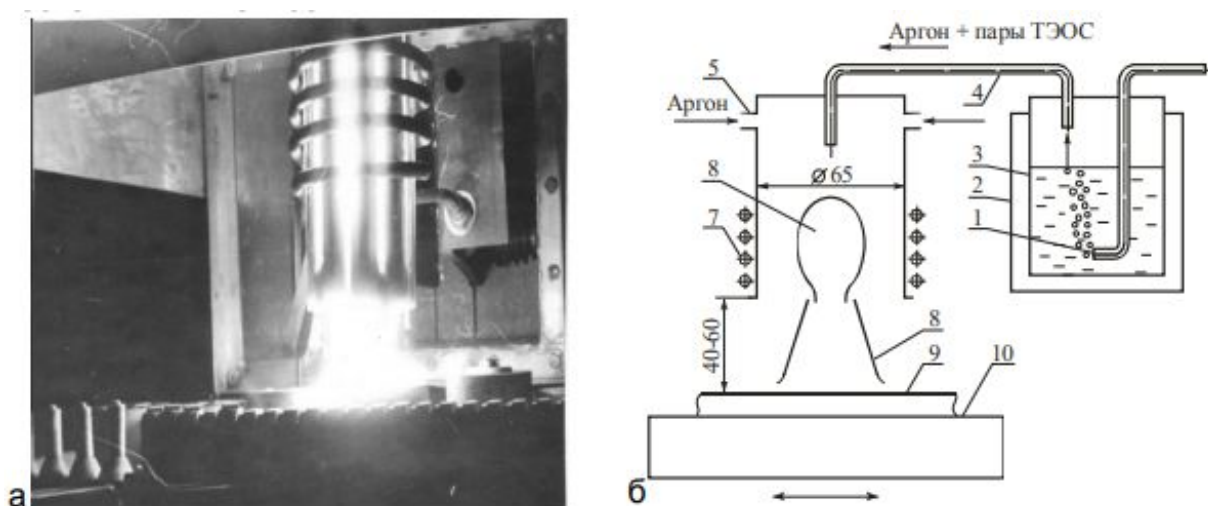


Рис.6 - Высокочастотный индукционный плазмотрон в работе (а) и схема подачи реагентов (б), где 1 – подача аргона, 2 – термостат, 3 – металлическая емкость; 4 – подача смеси аргона с парами реагента; 5 – газоформирователь; 6 – реакционная камера; 7 – высокочастотный индуктор, 8 – плазменный факел с парами реагентов; 9 – обрабатываемое изделие; 10 – стол-манипулятор

### 7. Применение титана[5]

Нано-титан широко используется во многих областях( в авиационной технике, ракетостроении, судостроении, химическом машиностроении), но основными областями применения наноструктурного титана являются медицина. Это инструмент, наружные и внутренние протезы, внутрикостные фиксаторы, зажимы и многое другое. При использовании титана в протезировании, наряду с прочностью и коррозионной стойкостью на первый план выходит биосовместимость. Имплантаты, изготовленные из технически чистого титана и его сплавов, обрастают костной и мышечной тканью, не корродируют в организме, структура окружающей титановый элемент ткани не изменяется на протяжении десятилетий. Высокая удельная прочность и

низкий модуль упругости титановых сплавов являются весьма благоприятным сочетанием свойств с точки зрения протезирования.



## Список литературы

1. Илларионов А. Г., Попов А. А. Технологические и эксплуатационные свойства титановых сплавов: учебное пособие. – 2014. – С. 4
2. Гаврилов Д. И., Карягин М. О., Нуяндин В. Д. ТИТАН: СВОЙСТВА, ПОЛУЧЕНИЕ, ПРИМЕНЕНИЕ //Academy. – 2017. – №. 5. – С. 29-31.
3. Сергеев Г. Б. Размерные эффекты в нанохимии //Российский химический журнал. – 2002. – Т. 46. – №. 5. – С. 22-29.
4. Фильков М. Н., Дунаев А. В. НИЗКОТЕМПЕРАТУРНОЕ ВЫСОКОЧАСТОТНОЕ ПЛАЗМЕННОЕ УПРОЧНЕНИЕ //Агротехника и энергообеспечение. – 2014. – Т. 1. – №. 1. – С. 590-595.
5. Леоха Ф. Л., Ратиев С. Н. Современные способы получения сплавов титана, легированных кислородом //Наукови праці Донецького національного технічного університету. Сер.: Металургія. – 2012. – №. 1-2. – С. 85–94.