

Школа Инженерная школа ядерных технологий
 Направление подготовки 03.03.02 Физика
 Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы
Численное моделирование физико-механических свойств сплава системы Ti-Nb медицинского назначения

УДК 669.293.018:669.295.5:519.876:615.4

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОБ81	Саядян Артем Каренович		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший научный сотрудник	Грубова Ирина Юрьевна	к.ф.-м.н.		

КОНСУЛЬТАНТЫ ПО РАЗДЕЛАМ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН ШБИП ТПУ	Меньшикова Екатерина Валентиновна	к.ф.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ООД	Сечин Андрей Александрович	к.т.н.		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент ОЭФ	Склярова Елена Александровна	к.п.н.		

ПЛАНИРУЕМЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ОСВОЕНИЯ ООП

Код компетенции	Наименование компетенции
Универсальные компетенции	
УК(У)-1	Способен осуществлять поиск, критический анализ и синтез информации, применять системный подход для решения поставленных задач
УК(У)-2	Способен определять круг задач в рамках поставленной цели и выбирать оптимальные способы их решения, исходя из действующих правовых норм, имеющихся ресурсов и ограничений
УК(У)-3	Способен осуществлять социальное взаимодействие и реализовать свою роль в команде.
УК(У) -4	Способен осуществлять деловую коммуникацию в устной и письменной формах на государственном и иностранном (-ых) языке.
УК(У)-5	Способен воспринимать межкультурное разнообразие общества в социально-историческом, этическом и философском контекстах.
УК(У)-6	Способен управлять своим временем, выстраивать и реализовывать траекторию саморазвития на основе принципов образования в течение всей жизни.
УК(У)-7	Способен поддерживать должный уровень физической подготовленности для обеспечения полноценной социальной и профессиональной деятельности.
УК(У)-8	Способен создавать и поддерживать безопасные условия жизнедеятельности, в том числе при возникновении чрезвычайных ситуаций.
УК(У)-9	Способен проявлять предприимчивость в практической деятельности, в т.ч. в рамках разработки коммерчески перспективного продукта на основе научно-технической идеи.
Общепрофессиональные компетенции	
ОПК(У)-1	Способностью использовать в профессиональной деятельности базовые естественнонаучные знания, включая знания о предмете и объектах изучения, методах исследования, современных концепциях, достижениях и ограничениях естественных наук (прежде всего химии, биологии, экологии, наук о земле и человеке).
ОПК(У)-2	Способностью использовать в профессиональной деятельности базовые знания фундаментальных разделов математики, создавать математические модели типовых профессиональных задач интерпретировать полученные результаты с учетом границ применимости моделей.
ОПК(У)-3	Способностью использовать базовые теоретические знания фундаментальных разделов общей и теоретической физики для решения профессиональных задач.
ОПК(У)-4	Способностью понимать сущность и значение информации в развитии современного общества, осознавать опасность и угрозу, возникающие в этом процессе, соблюдать основные требования информационной безопасности.
ОПК(У)-5	Способностью использовать основные методы, способы и средства получения, хранения, переработки информации и навыки работы с компьютером как со средством управления информацией.

ОПК(У)-6	Способностью решать стандартные задачи профессиональной деятельности на основе информационной и библиографической культуры с применением информационно-коммуникационных технологий и с учетом основных требований информационной безопасности.
ОПК(У)-7	Способностью использовать в своей профессиональной деятельности знание иностранного языка.
ОПК(У)-8	Способностью критически переосмысливать накопленный опыт, изменять при необходимости направление своей деятельности.
ОПК(У)-9	Способностью получить организационно-управленческие навыки при работе в научных группах и других малых коллективах исполнителей.
Профессиональные компетенции	
ПК(У)-1	Способностью использовать специализированные знания в области физики для освоения профильных физических дисциплин.
ПК(У)-2	Способностью проводить научные исследования в избранной области экспериментальных и (или) теоретических физических исследований с помощью современной приборной базы (в том числе сложного физического оборудования) и информационных технологий с учетом отечественного и зарубежного опыта.
ПК(У) -3	Готовностью применять на практике профессиональные знания теории и методов физических исследований.
ПК(У)-4	Способностью применять на практике профессиональные знания и умения, полученные при освоении профильных физических дисциплин.
ПК(У)-5	Способностью пользоваться современными методами обработки, анализа и синтеза физической информации в избранной области физических исследований.
ПК(У)-6	Способностью понимать и использовать на практике теоретические основы организации и планирования физических исследований
ПК(У)-7	Способностью участвовать в подготовке и составлении научной документации по установленной форме.
ПК(У)-8	Способностью понимать и применять на практике методы управления в сфере природопользования.

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
 федеральное государственное автономное
 образовательное учреждение высшего образования
 «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» (ТПУ)

Школа Инженерная школа ядерных технологий
 Направление подготовки 03.03.02 Физика
 Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

УТВЕРЖДАЮ:
 Руководитель ООП
 _____ Склярова Е.А.
 (Подпись) (Дата)

ЗАДАНИЕ
на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

бакалаврской работы

(бакалаврской работы, дипломного проекта/работы, магистерской диссертации)

Студенту:

Группа	ФИО
0Б81	Саядяну Артему Кареновичу

Тема работы:

Численное моделирование физико-механических свойств сплава системы Ti-Nb медицинского назначения	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<p>Исходные данные к работе</p> <p><i>(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).</i></p>	<ul style="list-style-type: none"> – Объект исследования: сплав β-титана (β-Ti) легированный атомами ниобия (Nb) с концентрациями Nb 35, 40, 45, 50 ат.% – Методы исследования: численное моделирование с использованием программного пакета VASP; – Цель работы: определение влияния концентрации ниобия на физико-механические и электронные свойства сплава Ti-Nb.
---	--

<p>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</p> <p><i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i></p>	<ul style="list-style-type: none"> – Обзор литературных источников; – Расчет энергии формирования и когезии; – Расчет и анализ упругих свойств; – Анализ анизотропных свойств; – Расчет и анализ электронных свойств; – Социальная ответственность; – Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение; – Заключение.
<p>Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы</p> <p><i>(с указанием разделов)</i></p>	
Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Меньшикова Екатерина Валентиновна, Доцент ОСГН ШБИП ТПУ
Социальная ответственность	Сечин Андрей Александрович, Доцент ООД
<p>Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:</p>	

<p>Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику</p>	
--	--

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОБ81	Саядян Артем Каренович		

**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА
«ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И
РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»**

Студенту:

Группа	ФИО
0Б81	Саядян Артему Кареновичу

Школа	ИЯТШ	Отделение школы (НОЦ)	ОЭФ
Уровень образования	Бакалавриат	Направление/специальность	03.03.02 Физика

Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:

1. <i>Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих</i>	<i>Стоимость материальных ресурсов определялась по средней стоимости по г. Томску. Оклады в соответствии с окладами сотрудников «НИ ТПУ».</i>
2. <i>Нормы и нормативы расходования ресурсов</i>	<i>- 30% премии; - 20% надбавки; - 16% накладные расходы; - 30% районный коэффициент</i>
3. <i>Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования</i>	<i>- отчисления во внебюджетные фонды 30,2%</i>

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. <i>Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения</i>	<i>- Потенциальные потребители результатов исследования; - проведение анализа конкурентоспособности</i>
2. <i>Планирование и формирование бюджета научных исследований</i>	<i>- цели и результаты проекта; - организационная структура проекта.</i>
3. <i>Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования</i>	<i>- структура работ в рамках научного исследования; - разработка графика проведения научного исследования; - бюджет научно-технического исследования</i>

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. <i>Оценка конкурентоспособности технических решений</i>
2. <i>Матрица SWOT</i>
3. <i>Альтернативы проведения НИ</i>
4. <i>График проведения и бюджет НИ</i>
5. <i>Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИ</i>

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	
---	--

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ОСГН ШБИП ТПУ	Меньшикова Екатерина Валентиновна	к.ф.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0Б81	Саядян А.К.		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа		ФИО	
0Б81		Саядян Артему Кареновичу	
Школа	ИЯТШ	Отделение (НОЦ)	ОЭФ
Уровень образования	Бакалавриат	Направление/специальность	03.03.02 «Физика»

Тема ВКР:

Численное моделирование физико-механических свойств сплава системы Ti-Nb медицинского назначения	
Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
<p>Введение</p> <ul style="list-style-type: none"> – Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика) и области его применения. – Описание рабочей зоны (рабочего места) при разработке проектного решения/при эксплуатации 	<p><i>Объект исследования: сплав β-титана (β-Ti) легированный атомами ниобия (Nb) с концентрациями Nb 35, 40, 45, 50 ат. %</i></p> <p><i>Область применения: научные центры, организации по производству медицинских имплантатов</i></p> <p><i>Рабочая зона: лаборатория</i></p> <p><i>Количество и наименование оборудования рабочей зоны: рабочая поверхность с ПЭВМ</i></p> <p><i>Рабочие процессы, связанные с объектом исследования, осуществляющиеся в рабочей зоне: расчет с помощью программного пакета VASP, изучение источников литературы</i></p>
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
<p>1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности при разработке проектного решения</p> <ul style="list-style-type: none"> – специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны. 	<ul style="list-style-type: none"> – Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. От 27.12.2018) – ГОСТ 12.2.032-7 «ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования.» – ПНД Ф 12.13.1-03
<p>2. Производственная безопасность при разработке проектного решения</p> <ul style="list-style-type: none"> – Анализ выявленных вредных и опасных производственных факторов 	<ul style="list-style-type: none"> – Отклонение показателей микроклимата – Превышение уровня шума – Отсутствие или недостаток необходимого освещения – Опасность поражения током
<p>3. Экологическая безопасность при разработке проектного решения</p>	<ul style="list-style-type: none"> – Безотходное производство
<p>4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях при разработке проектного решения</p>	<ul style="list-style-type: none"> – Сильные морозы – Пожары – Несанкционированное проникновение – Наиболее типичная ЧС: Пожар
Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ООД	Сечин Андрей Александрович	к.т.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
0Б81	Саядян Артем Каренович		

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Школа – Инженерная школа ядерных технологий

Уровень образования Бакалавриат

Направление подготовки – Физика конденсированного состояния

Отделение школы (НОЦ) – Отделение экспериментальной физики

Период выполнения (осенний / весенний семестр 2021/2022 учебного года)

Форма представления работы:

Бакалаврская работа
(бакалаврская работа, дипломный проект/работа, магистерская диссертация)

**КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН
выполнения выпускной квалификационной работы**

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
01.02.2022	– Обзор литературных источников	7
06.03.2022	– Расчет энергии формирования и когезии	10
26.03.2022	– Расчет и анализ упругих свойств	15
16.04.2022	– Анализ анизотропных свойств	15
30.04.2022	– Расчет и анализ электронных свойств	15
07.05.2022	– Социальная ответственность	10
16.05.2022	– Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	10
23.05.2022	– Заключение	5

СОСТАВИЛ:

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший научный сотрудник	Грубова Ирина Юрьевна	к.ф.-м.н.		

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
доцент ОЭФ	Склярова Елена Александровна	к.п.н., доцент		

РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа: 84 с., 17 рис., 25 табл., 44 источника.

ТИ-Nb, НИЗКОМОДУЛЬНЫЕ СПЛАВЫ, ПЕРВОПРИНЦИПНЫЕ РАСЧЕТЫ, МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА, СПЛАВЫ ТИТАНА, БИОСОВМЕСТИМОСТЬ

Объект исследования: сплав β -титана (β -Ti) легированный атомами ниобия (Nb) с концентрациями Nb 35, 40, 45, 50 ат.%

Цель работы: определение влияния концентрации ниобия на физико-механические и электронные свойства сплава Ti-Nb

В ходе выполнения работы было реализовано построение атомных конфигураций изучаемых структур Ti-xNb бета-типа с использованием подхода специальных квазислучайных структур (SQS), рассчитаны энергии формирования и когезии. С помощью расчетов в рамках теории функционала плотности определены упругие постоянные изучаемых структур. Проведен анализ влияния концентрации Nb на изотропные свойства сплава Ti-Nb. Проведен анализ электронных свойств 54-атомной ячейки Ti-Nb. В результате была установлена зависимость между концентрацией Nb в сплаве Ti-Nb и его физико-механическими и электронными свойствами. Выявлено, что с повышением концентрации Nb происходит снижение модулей сдвига и Юнга, а также повышение значений давления Коши, что говорит о том, что сплав становится более пластичным. Также после построения и анализа графика распределения валентной зарядовой плотности на атомной плоскости (110) в ячейке Ti-50Nb было установлено, что замещение атомов Ti атомами Nb привело к образованию ковалентных связей между атомами Ti-Nb и Nb-Nb, но все же в большей степени материал имеет металлическую природу, а также увеличение количества ковалентных связей уменьшает сопротивление материала упругим деформациям, что и приводит к уменьшению модулей Юнга и сдвига, а также к увеличению значений давления Коши.

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	12
Глава 1. Литературный обзор, определяющий актуальность исследовательской работы.....	15
1.1 Типы кристаллических решёток, понятие элементарной ячейки, плоскости в кристаллах, узлы элементарной ячейки	15
1.2 Кристаллическая структура титана: альфа-, бета-фазы.....	19
1.3 Сплавы титана для медицины, области медицинского применения .	20
1.4 Механические свойства сплавов на основе β -Ti	22
1.5 Подробнее о свойствах β -Ti и о легировании Ti различными элементами	23
Глава 2. Метод исследования свойств веществ из первых принципов	26
2.1 Иерархия обменно-корреляционных функционалов	26
2.2 Базисные множества, потенциалы и псевдопотенциалы	28
2.3 Решение уравнений Кона-Шэма	29
2.4 Ограничения.....	30
2.5 Основы работы в VASP	31
Глава 3. Результаты моделирования	35
3.1 Расчет энергии формирования и когезии	37
3.2 Расчет и анализ упругих свойств	39
3.3 Анализ анизотропных свойств	43
3.4 Расчет и анализ электронных свойств	44
Глава 4. Социальная ответственность.....	49
Введение	49
4.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности..	49
4.2 Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя.	50
4.3 Производственная безопасность.	50
4.3.1 Анализ вредных и опасных факторов, которые могут возникнуть на рабочем месте при проведении исследований.	50
4.3.2 Превышение уровня шума	51
4.3.3 Отклонение показателей микроклимата.....	53
4.3.4 Недостаточная освещенность рабочей зоны	54
4.3.5 Электробезопасность и пожаробезопасность.....	56
4.4 Экологическая безопасность.	58

4.5	Безопасность в чрезвычайных ситуациях.....	59
4.5.1	Анализ вероятных ЧС, которые могут возникнуть на рабочем месте при проведении исследований.	59
4.5.2	Обоснование мероприятий по предотвращению ЧС и разработка порядка действия в случае возникновения ЧС.....	60
	Выводы по главе «Социальная ответственность».....	61
	Глава 5. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение.....	62
	Введение	62
5.1	Потенциальные потребители данного исследования.....	62
5.2	Анализ конкурентных технических решений	63
5.3	SWOT – анализ.....	65
5.4	Планирование научно-исследовательских работ	68
5.4.1	Определение трудоемкости выполнения работ	68
5.4.2	Разработка графика проведения научного исследования	70
5.5	Бюджет научно-технического исследования	72
5.5.1	Расчет затрат на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ... ..	72
5.5.2	Основная заработная плата исполнителей темы.....	72
5.5.3	Дополнительная заработная плата исполнителей темы	74
5.5.4	Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)	74
5.5.5	Прочие прямые затраты.....	75
5.5.6	Накладные расходы	75
5.5.7	Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта 76	
5.6	Оценка эффективности проекта	76
	Выводы по главе «Финансовый менеджмент ресурсоэффективность и ресурсосбережение».....	79
	ЗАКЛЮЧЕНИЕ	80
	Список литературы	82

ВВЕДЕНИЕ

Разработка новых биоматериалов в настоящее время – сложный процесс, включающий в себя следующие основные этапы: постановка проблемы, анализ литературы, проведение фундаментальных теоретических и экспериментальных исследований, представление полученных результатов научному сообществу в виде научных публикаций итд., внедрение результатов исследования в практику. В особенности это касается медицины, ведь при использовании нового материала необходимо учитывать множество факторов, таких как, например, его прочность, упругость и токсичность. Говоря о протезировании, конструкция на основе нового материала может вызвать непредсказуемые изменения в организме человека и серьезно навредить его здоровью, если она не будет удовлетворять основным требованиям, предъявляемым к такого рода имплантационным материалам.

Именно поэтому важно понимать природу используемого материала, его свойства и особенности. Как известно, сейчас для создания имплантатов для биомедицины большой популярностью пользуются сплавы на основе титана. Сам по себе титан является биоинертным по отношению к организму человека, более того он обладает рядом преимуществ по отношению к другим материалам, используемым в медицине, например, титан немагнитный материал, что позволяет пациенту с титановым имплантатом проходить процедуру МРТ. Также ряд элементов, в комбинации с титаном способствует повышению биосовместимости сплава и уменьшает вероятность аллергических реакций. Однако и в случае использования сплавов титана часто наблюдается ряд осложнений. Например, существует такой эффект как экранирование напряжения, он возникает в результате снятия напряжения с кости человека внедрённым в нее имплантатом, следовательно, из-за снижения нагрузки на кость, она становится менее плотной и более подверженной различным деформациям [1]. Поэтому во избежание данного эффекта в настоящее время начали активно использовать низкокомодульные

сплавы на основе титана. Стремление к разработке низко модульных сплавов Ti привело к повышенному вниманию к сплавам β -типа, которые демонстрируют относительно низкие модули по сравнению со сплавами α и $(\alpha+\beta)$ Ti [2].

В настоящее время ведется активная разработка различных сплавов на основе β -фазы Ti, легированного различными стабилизаторами β -фазы (Ta, Mo, Nb, Zr и т. д.) [3]. Например, в Украине был разработан сплав Zr-Ti-Nb, в котором удалось достичь модуля упругости величиной в 47 ГПа [4]. Также используются сплавы с добавлением тантала - Ti-29Nb-13Ta-7.1Zr, олова - Ti-29Nb-13Ta-2Sn [5]. Наиболее перспективным из них является сплав Ti-Nb, так как сам по себе титан биоинертен, а ниобий, в зависимости от его массового содержания в сплаве, придает материалу биосовместимые свойства.

Содержание Nb 22–23% в сплаве Ti-Nb приводит к стабилизации β -Ti а также такие сплавы обладают эффектом памяти формы. Однако данный эффект не является приоритетным в проведенном нами исследовании, в отличие от низкого модуля Юнга, в связи с чем были использованы концентрации Nb 40-45 % [6]. Известно, что такая концентрация Nb позволяет уменьшить значение модуля Юнга Ti-Nb сплавов до 55-60 ГПа. В перспективе это сопоставимо с модулем упругости человеческой кости (30–40 ГПа) [7].

Обычно, для исследования таких сплавов используют широкий спектр экспериментальных подходов и методов. В текущей работе, было принято решение использовать подход, основанный на первопринципном моделировании, основывающееся на модели взаимодействия атомов и молекул из квантовой механики. Данный метод основан на теории функционала плотности (ТФП), которая рассматривает твердые тела как систему большого количества взаимодействующих между собой электронов, связанных друг с другом решеткой из ядер.

Такой подход позволит прогнозировать свойства моделируемых сплавов еще до проведения этапа практических экспериментов, что в свою очередь

позволит снизить время поиска оптимальной концентрации легируемого элемента.

Таким образом, целью данной работы является определение влияния концентрации ниобия на физико-механические и электронные свойства сплава Ti-Nb

Согласно цели, были сформулированы задачи, необходимые к выполнению:

1. Реализовать построение атомных конфигураций изучаемых структур Ti-xNb бета-типа с использованием подхода специальных квазислучайных структур (SQS) и провести расчёты структурных параметров из первых принципов на основании которых выделить структуры, в которых полная энергия системы достигает своего минимума.
2. Рассчитать энергии когезии и формирования выбранных систем Ti-xNb, для определения наиболее стабильной структуры.
3. С помощью проведения расчетов в рамках ТФП, реализованных в компьютерном коде VASP, определить упругие постоянные изучаемых структур, для оценки механических характеристик исследуемых систем сплавов и выбора концентрации Nb, позволяющей получать стабильные бета сплавы с низким модулем Юнга.
4. С помощью полученных данных в ходе проведения расчетов в VASP, проанализировать электронные свойства полученной ячейки с помощью программного пакета VESTA для подтверждения выводов сделанных в результате анализа упругих свойств.

Глава 1. Литературный обзор, определяющий актуальность исследовательской работы

1.1 Типы кристаллических решёток, понятие элементарной ячейки, плоскости в кристаллах, узлы элементарной ячейки

Что такое кристалл? Определим его как тело, состоящее из атомов, расположенных в пространственной решетке так, что можно ввести три вектора основных трансляций a , b , c , обладающих следующим свойством. При рассмотрении этой атомной решетки из произвольной точки r решетка имеет тот же вид, что и при рассмотрении из точки r' [8]:

$$r' = r + n_1 a + n_2 b + n_3 c \quad (1.1)$$

где n_1, n_2, n_3 – произвольные целые числа.

Кристаллическая решетка – это математическая абстракция, которая образуется, когда с каждой точкой решетки связан базис.

Кристаллическая решетка называется примитивной, а векторы a , b , c – векторами примитивной трансляций, если две любые точки r и r' , при наблюдении из которых атомное расположение будет иметь одинаковый вид, всегда удовлетворяют соотношению (1.1).

Рассмотрим понятие примитивной ячейки. Примитивная ячейка – это частный случай элементарной ячейки. Это ячейка с минимальным объемом. На нее приходится только одна точка примитивной решетки. Ее объем может быть найден по следующей формуле [8]:

$$V_c = |a \times b \cdot c| \quad (1.2)$$

Существует несколько типов кристаллических решеток, например, такие как, двумерные и трехмерные.

Начнем с описания двумерных кристаллических решеток. Их можно построить бесконечное количество, так как на длины a и b векторов и на угол между ними не накладывается никаких ограничений. На рисунке ниже представлены, косоугольные решетки, которые являются инвариантными относительно поворота на π и 2π (Рис.1).

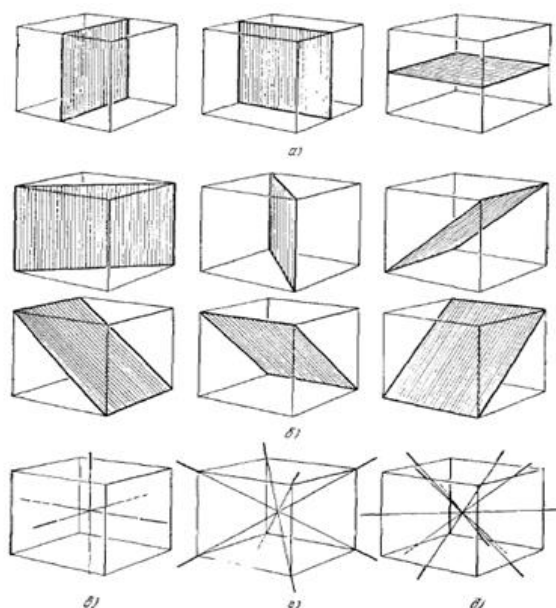


Рисунок 1 – Плоскости и оси симметрии в кубе. а) Три плоскости симметрии, параллельные граням куба, б) Шесть диагональных плоскостей симметрии, в) три оси, г) четыре оси

Некоторые косоугольные решетки инвариантны по отношению к повороту на $2\pi/3$, $2\pi/4$ или $2\pi/6$, или же по отношению к операции зеркального отражения.

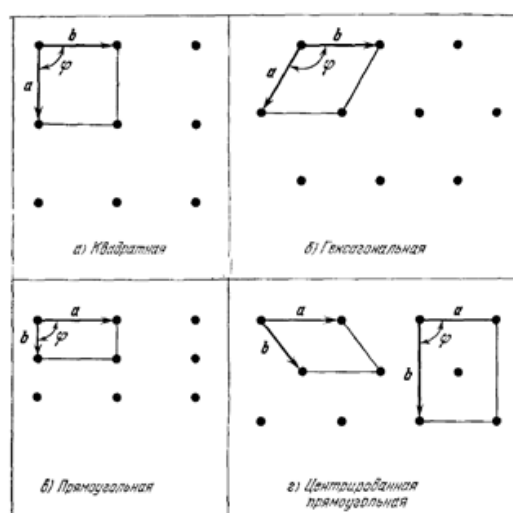


Рисунок 2 – Основные двумерные решетки. а) Квадратная $|a|=|b|$, $\varphi=90^\circ$, б) Гексагональная: $|a|=|b|$, $\varphi=120^\circ$, в) Прямоугольная; $|a|\neq|b|$, $\varphi=90^\circ$, г) Центрированная прямоугольная; показаны оси как для примитивной, так и для прямоугольной элементарной ячейки, для которой $|a|\neq|b|$, $\varphi=90^\circ$

Если нам необходимо построить решетку, инвариантную к одному или нескольким таким поворотам, то на векторы \mathbf{a} и \mathbf{b} нужно наложить ограничения. Имеется 4 типа ограничений, и каждый из этих типов приводит к специальному типу кристаллической решетки.

Таким образом, имеется 5 типов двумерных кристаллических решеток. К ним относятся косоугольная и 4 других типа специальных решеток. Они имеют общее название: решетки Браве (Рис.2).

Довольно важным фактором является наличие плоскости зеркального отражения. Векторы примитивных трансляций \mathbf{a} , \mathbf{b} выразим с помощью единичных векторов \hat{x} и \hat{y} , а также через оси x и y [8]:

$$\mathbf{a} = a_x \hat{x} + a_y \hat{y}, \quad \mathbf{b} = b_x \hat{x} + b_y \hat{y} \quad (1.3)$$

При отражении векторов \mathbf{a} и \mathbf{b} относительно оси x получим векторы \mathbf{a}' и \mathbf{b}' [8]:

$$\mathbf{a}' = a_x \hat{x} - a_y \hat{y}, \quad \mathbf{b}' = b_x \hat{x} - b_y \hat{y} \quad (1.4)$$

В случае инвариантности решетки относительно отражения векторы \mathbf{a}' и \mathbf{b}' будут являться векторами решетки, выраженными как $n_1 \mathbf{a} + n_2 \mathbf{b}$, если же имеются следующие соотношения [8]:

$$\mathbf{a} = a \hat{x}, \quad \mathbf{b} = b \hat{y}, \quad (1.4)$$

тогда получается, что $\mathbf{a}' = \mathbf{a}, \mathbf{b}' = -\mathbf{b}$, таким образом решетка повторяет сама себя. Такая решетка является прямоугольной.

Рассмотрим другой тип решетки инвариантный по отношению к отражению. Вектор \mathbf{b}' является вектором решетки если $\mathbf{b}' = \mathbf{a} - \mathbf{b}$. Используя соотношение (1.4), запишем [8]:

$$\mathbf{b}'_x = a_x - b_x = b_x, \quad \mathbf{b}'_y = a_y - b_y = -b_y \quad (1.5)$$

Решением данной системы является $a_y = 0, b_x = \frac{a_x}{2}$, потому в качестве векторов примитивных трансляций для решетки с отражательной симметрией имеем [8]:

$$\mathbf{a} = a \hat{x}, \quad \mathbf{b} = \frac{a \hat{x}}{2} + b_y \hat{y} \quad (1.6)$$

Данные соотношения относятся к центрированной прямоугольной решетке.

Таблица 1 – Параметры элементарной ячейки для двумерных решеток Браве

Решетка	Элементарная ячейка	Точечная группа симметрии
Косоугольная	Параллелограмм; $a \neq b$, $\varphi \neq 90^\circ$	2
Квадратная	Квадрат; $a=b$, $\varphi=90^\circ$	4mm
Гексагональная	60°-ный ромб; $a=b$, $\varphi=120^\circ$	6mm
Примитивная прямоугольная	Прямоугольник; $a \neq b$, $\varphi=90^\circ$	2mm
Центрированная прямоугольная	Прямоугольник; $a \neq b$, $\varphi=90^\circ$	2mm
Обозначение mm указывает на наличие двух плоскостей зеркального отражения		

В таблицу 1 вынесены систематизированные данные о решетках, описанных выше.

Теперь рассмотрим трехмерные кристаллические решетки. Типов трехмерных уже гораздо больше – четырнадцать (Рис.3).

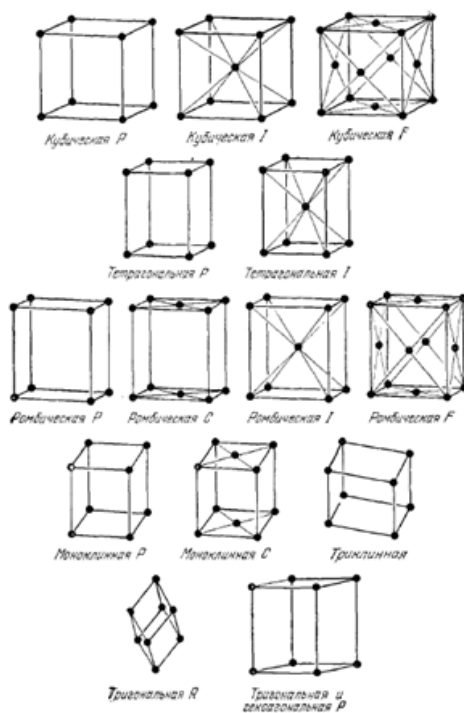


Рисунок 3 – Четырнадцать пространственных решеток Браве. Показаны обычно используемые ячейки, которые не всегда являются примитивными. P-

символ примитивной ячейки, I-объемцентрированной, F-гранецентрированной, C-с центрированными основаниями, R-ромбоэдрической

Более подробная информация о пространственных решетках Браве представлена в таблице 2:

Таблица 2 – Элементарные ячейки четырнадцати пространственных решеток Браве

Кристаллографическая система	Число ячеек в системе	Символ ячейки	Характеристики элементарной ячейки
Триклинная	1	P	$a \neq b \neq c; \alpha \neq \beta \neq \gamma$
Моноклинная	2	P,C	$a \neq b \neq c; a = \gamma = 90^\circ \neq \beta$
Ромбическая	4	P,C,I,F	$a \neq b \neq c; a = \beta = \gamma = 90^\circ$
Тетрагональная	2	P,I	$a = b \neq c; a = \beta = \gamma = 90^\circ$
Кубическая	3	P,I,F	$a = b = c; a = \beta = \gamma = 90^\circ$
Тригональная	1	R	$a = b = c; a = \beta = \gamma < 120^\circ, \neq 90^\circ$
Гексагональная	1	P	$a = b \neq c; a = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$

1.2 Кристаллическая структура титана: альфа-, бета-фазы

В данной работе описаны две фазы титана. Титан – это легкий и прочный металл серебристо-белого цвета. В отчете будет рассмотрено две его модификации: α -Ti и β -Ti.

Фаза α -Ti является низкотемпературной модификацией титана, которая существует до $T = 882^\circ\text{C}$ и имеет гексагональную плотноупакованную решетку с периодами, $a = 2,95$ нм и $c = 4,686$ нм. Плотность α -Ti составляет $4,505$ г/см³ при $T = 20^\circ\text{C}$ [9]. Схематическое изображение фазы α -Ti представлено на рисунке 4.

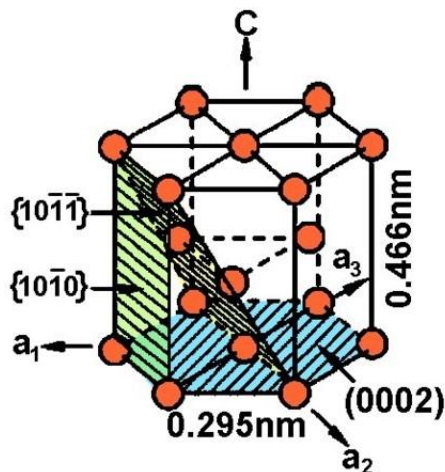


Рисунок 4 – Решетка α -титана

При достижении $T = 882^\circ\text{C}$ и последующем медленном охлаждении происходит полиморфное превращение по нормальному механизму, с образованием, так называемых, равноосных зерен. В то время как при быстром охлаждении, превращение происходит по мартенситному механизму с образованием игольчатых структур.

Фаза β -Ti – это высокотемпературная модификация титана. Она имеет объемно-центрированную кубическую решетку с периодом $a = 3,2$ нм. Плотность β -Ti составляет $4,32 \text{ г/см}^3$ при $T = 900^\circ\text{C}$. Элементарная решетка β -Ti представлена на рисунке 5.

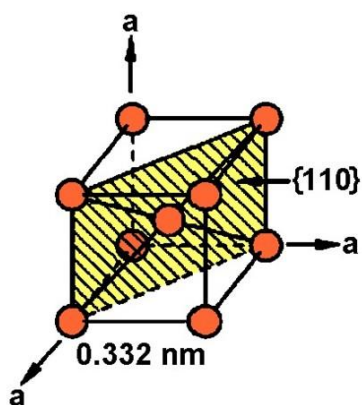


Рисунок 5 – Решетка β -титана

1.3 Сплавы титана для медицины, области медицинского применения

Известно, что титан, активно применяется в медицине. Причин широкого применения данного материала в медицинской отрасли довольно много.

Таблица 3 – Состав титановых сплавов используемых для изготовления медицинских изделий [10]

Сплав	Стандарт	Легирующие элементы, % по массе				Примеси, % по массе не более				
		Al	V	Mo	Zr	O	C	N	H	Fe
Grade I ELI Grade 4A	ISO 5832- 2	-	-	-	-	0,10 0,40	0,10 0,10	0,12 0,05	0,0125 0,0125	0,1 0,4
Ti-6Al- 4V	ISO 5832- 3	5,5- 6,75	3,5- 4,5	-	-	0,20	0,08	0,05	0,015	0,3
Ti-6Al - 7Nb	ISO 5832- 11	5,5- 6,5	-	Nb 6,5- 7,5	-	0,20	0,08	0,05	0,09	0,25
Ti- 15Mo- 5Zr- 3Al	ISO 5832- 14	2,5- 3,5	-	14,0- 16,0	4,5 - 5,5	0,2	0,08	0,05	0,02	0,3
BT1-00 BT1-0	ГОСТ 19807 ГОСТ 19807	-	-	-	-	0,10 0,20	0,05 0,07	0,04 0,04	0,008 0,010	0,008 0,010
BT20	ГОСТ 19807	5,5- 7,0	0,8- 2,5	0,5- 2,0	1,5 - 2,5	0,15	0,10	0,05	0,015	0,25
BT6	ГОСТ 19807	5,3- 6,8	3,5- 4,5	-	-	0,15	0,10	0,04	0,015	0,25

Например, титан биологически инертен по отношению к организму живого существа. Он хорошо обрастает костной и мышечной тканью. Также он почти не подвергается воздействию коррозии в агрессивных средах человеческого тела. Более того структура тканей, которые окружают титановый имплантат не изменяются на протяжении очень большого количества времени.

В настоящее время в медицине используется довольно широкий спектр сплавов, основанных на титане, в таблице 3, приведенной ниже, можно увидеть некоторые из них.

Самым прочным из рассмотренных материалов является сплав Ti-6Al-4V. Данный сплав является сплавом первого поколения и вызывает опасения из-за токсичного ванадия (в настоящее время сплав Ti-6Al-7Nb рассматривается как его менее токсичная замена). Исходя из этого, сейчас являются наиболее перспективны вещества, которые относятся к “чистому” титану.

В настоящее время известно довольно большое число областей медицины, в которых широко используется титан и сплавы на его основе. Например, из титановых сплавов получают проволочную сетку, такая сетка используется для пластики мягких тканей, также титановая монокристаллическая сетка используется в офтальмологии. Титановые сплавы нашли широкое применение в стоматологии. Дело в том, что такие сплавы легко соединяются с композитами и фарфором. Из этих соединений делают литые каркасы зубных протезов, стоматологические мосты и коронки. Врачи широко используют самую передовую технологию для изготовления зубных протезов – титановые имплантаты. Титановый корень вживляется в челюсть, после чего на него наращивают верхнюю часть зуба. Также, с помощью титановых имплантатов исправляют различные деформации грудной клетки, активно используют при лечении переломов костей при помощи металлического остеосинтеза [10].

1.4 Механические свойства сплавов на основе β -Ti

Одной из важнейших характеристик имплантата является его модуль Юнга (E). У человеческой кости он составляет порядка 4-40 ГПа. У одного из самых популярных сплавов Ti-6Al-4V, используемых для изготовления имплантатов, модуль Юнга равен примерно 110 ГПа. Из-за большой разницы в значениях модуля Юнга происходит эффект экранирования напряжения. Данный эффект заключается в том, что в результате снятия напряжения с кости имплантатом плотность кости значительно снижается. Поэтому в данный момент популярность набирают сплавы с меньшими значениями

модуля Юнга. Например, сплавы, имеющие в своей основе титан и ниобий (Таблица 4).

Таблица 4 – Значение модуля Юнга сплавов Ti-Nb-Zr и Ti-Nb-Zr-Sn

Сплав	E, ГПа	Сплав	E, ГПа
Ti-20Nb-4Zr	70	Ti-20Nb-4Zr-3,5Sn	72
Ti-20Nb-8Zr	68	Ti-20Nb-4Zr-7,5Sn	68
Ti-20Nb-12Zr	62	Ti-20Nb-4Zr-11,5Sn	56
Ti-24Nb-4Zr	66	Ti-22Nb-4Zr-3,5Sn	70
Ti-24Nb-8Zr	62	Ti-22Nb-4Zr-7,5Sn	62
Ti-24Nb-12Zr	53	Ti-22Nb-4Zr-11,5Sn	63
Ti-28Nb-4Zr	63	Ti-24Nb-4Zr-3,5Sn	63
Ti-28Nb-8Zr	56	Ti-24Nb-4Zr-7,5Sn	46
Ti-28Nb-12Zr	52	Ti-24Nb-4Zr-11,5Sn	72
Ti-32Nb-4Zr	64	Ti-26Nb-4Zr-3,5Sn	66
Ti-32Nb-8Zr	60	Ti-26Nb-4Zr-7,5Sn	48
Ti-32Nb-12Zr	58	Ti-26Nb-4Zr-11,5Sn	71

1.5 Подробнее о свойствах β -Ti и о легировании Ti различными элементами

Известно, что у титана есть четыре группы легирующих элементов. К первой группе относятся α -стабилизаторы, такие как Al, O, N, которые используются для повышения температуры полиморфного превращения α -фазы титана в β -фазу [9]. Но если взять во внимание то, что кислород и азот оказывают довольно сильное охрупчивающее воздействие на титан, то для практического применения они мало подходят. Что же касается алюминия, его

используют очень широко во всех промышленных сплавах титана. Он применяется для уменьшения хрупкости сплавов, увеличения модуля упругости и повышения прочности (Рис.6).

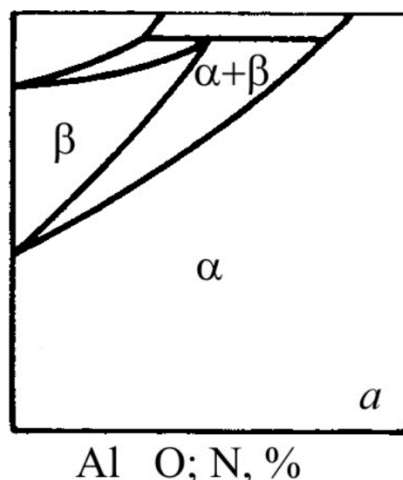


Рисунок 6 – Диаграмма состояния системы Ti-α-стабилизатор

Вторая группа, это изоморфные β-стабилизаторы, например, Mo, Ta, Ni, V, наоборот понижают температуру полиморфного превращения, а также расширяют область твердых растворов на основе β-титана (Рис.7) [9].

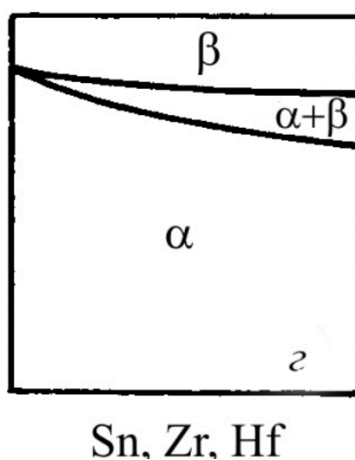
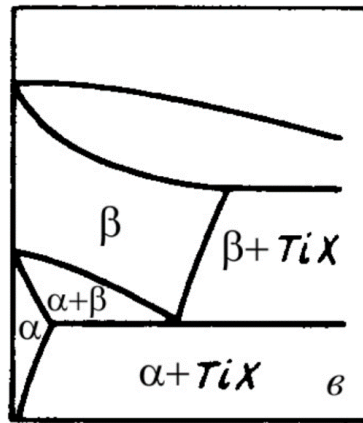


Рисунок 7 – Диаграмма состояния системы Ti-β-стабилизатор

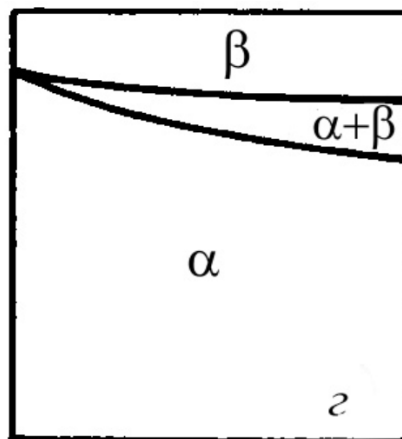
К третьей группе относятся эвтектоидообразующие β-стабилизаторы [10]. К ним относятся такие элементы, как Cr, Cu, Mn и другие. Они образуют с титаном соединения типа TiX. β-стабилизаторы повышают жаропрочность, прочность и термическую стабильность титановых сплавов, правда, несколько снижая их пластичность (Рис. 8).



Cr; Mn; Fe; Ni; Si;
Cu; W %

Рисунок 8 – Диаграмма состояния системы Тi-эвтектоидообразующий β -стабилизатор

И последнюю четвертую группу легирующих элементов составляют нейтральные стабилизаторы, такие как цирконий и олово [11].



Sn, Zr, Hf

Рисунок 9 – Диаграмма состояния системы Тi-нейтральный стабилизатор
Они не оказывают особого влияния на температуру перехода α -Ti в β -Ti и не
меняется фазовый состав титановых сплавов (Рис. 9)

Глава 2. Метод исследования свойств веществ из первых принципов

В течение последнего десятилетия компьютерное моделирование, основанное на квантово-механическом описании взаимодействий между электронами и атомными ядрами, сильно повлияло на развитие материаловедения. Влияние квантовой механики не ограничивается академическими исследованиями, текущие разработки прокладывают путь к разработке квантовых материалов для будущих технологий.

Важнейшими факторами, определяющими уровень теории квантово-механического компьютерного эксперимента, являются выбор обменно-корреляционного функционала, выбор базиса для разложения Кона-Шэмовских орбиталей, зарядовая и спиновая плотности и потенциалов, а также принятый алгоритм решения уравнений Кона-Шэма и расчета энергий, сил и напряжений. Степень учета выбранным функционалом многоэлектронных корреляций и полнота базиса определяют точность расчета, решающую роль в его эффективности играют численные алгоритмы.

2.1 Иерархия обменно-корреляционных функционалов

В течение последних двух десятилетий было предложено множество приближений к обменно-корреляционному функционалу, которые в рамках DFT давали бы точно такое же основное состояние, как и решение уравнения Шрёдингера для многих тел. Пердью называет иерархию приближенных функционалов «лестницей Якоба» для теории функционала плотности [12].

Самой нижней ступенью этой лестницы является приближения локальной плотности (LDA). На этом уровне локальная обменно-корреляционная энергия $E_{xc}[n(\vec{r})]$, считается таким же, как в однородном электронном газе той же плотности, полученной в результате квантового моделирования методом Монте-Карло.

Обобщенное градиентное приближение (GGA) вводит зависимость E_{xc} на локальном градиенте электронной плотности, $[\nabla n(\vec{r})]$. В литературе было предложено множество различных форм GGA. Для моделирования материалов рекомендуется использовать функционалы без параметров, полученные из известных коэффициентов разложения и правил сумм теории многих тел [13], и избегать эмпирических параметризаций, популярных в молекулярной квантовой химии.

Функционалы мета-GGA вводят плотность кинетической энергии или лапласиан $\Delta n(\vec{r})$ [электронной плотности] в качестве дополнительной переменной.

Гипер-GGA использует одноэлектронные орбитали (вместо многоэлектронных волновых функций) для оценки обменной энергии Хартри – Фока; это часто называют «точным обменом».

Гибридные функционалы смешивают точный обмен (т. е. Хартри-Фока) и DFT и описывают корреляцию на уровне DFT [14].

Все функционалы существуют в спин-вырожденном и спин-поляризованном (для магнитных расчетов) варианте. LDA и GGA на сегодняшний день являются наиболее часто используемыми функциональными возможностями. GGA исправляет склонность LDA к чрезмерному связыванию (хотя и с определенной тенденцией к чрезмерной коррекции для тяжелых элементов) и дает правильный ответ в некоторых случаях, когда LDA довольно эффектно терпит неудачу (например, предсказание правильного основного состояния). Fe (ферромагнитный) и Cr (антиферромагнитный), оба из которых предсказаны как немагнитные в LDA] [15] и расположение энергетического барьера для диссоциации малых молекул на металлических поверхностях [16]. Дальнейшее восхождение по лестнице DFT к мета-GGA или гипер-GGA не приводит к систематическому улучшению по сравнению с GGA [17]. Гибридные функционалы чрезвычайно популярны в молекулярной химии, но их применение к проблемам твердого тела и материалов все еще находится на начальном этапе. Предварительные

исследования [18] показывают большие перспективы для диэлектрических и полупроводниковых систем, хотя очевидны серьезные трудности при применении этих функционалов к металлам. Новые функционалы с разделением диапазонов могут предложить жизнеспособное решение и для металлов [19].

2.2 Базисные множества, потенциалы и псевдопотенциалы

На практике уравнения Кона – Шэма решаются итеративно с использованием разложения орбиталей по правильно выбранному набору базисных функций. Базис плоской волны (PW), принятый в VASP, предлагает два основных преимущества.

– Контроль сходимости базиса, который имеет решающее значение для точности расчетов (и, в частности, для прогнозирования давлений, сил и напряжений), почти тривиален. Требуются очень большие локальные базисные наборы, чтобы соответствовать точности расчета хорошо сходящихся PW [20].

– Вычисление сил, действующих на атомы, и напряжений в элементарной ячейке с использованием теоремы Хеллмана–Фейнмана не вызывает затруднений. Это открывает путь к моделированию квантовой молекулярной динамики *ab-initio* для изучения развития системы во времени.

Предпосылкой для успешного использования базисных наборов PW является описание электронно-ионного взаимодействия псевдопотенциалом, что устраняет необходимость в явном рассмотрении сильно связанных и химически инертных остовных электронов. Теория псевдопотенциалов является зрелой и современной, так называемые «ультрамягкие» псевдопотенциалы обладают тем достоинством, что делают расчеты для d- и f-электронных систем возможными при приемлемых вычислительных затратах [21]. Некоторым недостатком псевдопотенциалов является то, что из-за нелинейности обменно-корреляционного функционала в DFT требуются

сложные нелинейные остовные поправки для точного описания валентно-остовного взаимодействия во всех системах, где перекрытие между остово- и валентными электронами плотности не пренебрежимо малы.

Метод проекционных присоединенных волн (PAW) реконструирует полную плотность всех электронов и позволяет избежать необходимости нелинейных остовных поправок. Версия VASP-PAW с расслабленным ядром, недавно разработанная Марсманом и Крессе [22], определенно ставит расчеты PW на основе псевдопотенциала на тот же уровень точности, что и наиболее точные расчеты для всех электронов, такие как линейаризованные полные потенциалы с расширенной плоской волной (FLAPW), которые, однако, в вычислительном отношении гораздо менее эффективны.

2.3 Решение уравнений Кона-Шэма

Наиболее прямым подходом к решению уравнений Кона – Шэма (КШ) является прямая диагонализация гамильтониана КШ. Однако для больших систем и базисных наборов плоских волн это очень неэффективно, учитывая размер гамильтоновой матрицы. Как правило, для достижения базисной конвергенции требуется от 100 до 150 плоских волн на атом. Следовательно, для систем с несколькими сотнями атомов на ячейку размер матрицы гамильтониана колеблется между $10^4 \cdot 10^4$ и $10^5 \cdot 10^5$. Кроме того, требуются не все собственные значения, а только занятые и низшие пустые собственные состояния, а это обычно лишь 10% или даже меньше общего числа собственных значений. По этой причине итеративные вариационные подходы следует предпочесть прямой диагонализации. Общий вариационный принцип квантовой механики может применяться либо к полной энергии, либо к собственным значениям КС, либо к норме остаточного вектора к собственному состоянию. Вариационная минимизация полной энергии может быть основана на динамическом моделировании отжига связанной электронной системы (как в методе Кар-Парринелло (КП) [23]) или на сопряженно-

градиентной минимизации [24]. Оба подхода сталкиваются с трудностями применительно к металлам – в КП-расчетах контроль адиабатичности возможен только через термостаты Ноузе, присоединенные как к электронной, так и к ионной подсистемам, сходимость минимизации полной электронной энергии затруднена флуктуациями заряда подвижных валентных электронов. Успешная стратегия, применяемая в VASP, основана на поэтапной оптимизации собственных состояний посредством минимизации нормы остаточного вектора для каждого собственного состояния. Преимущество минимизации остаточного вектора вместо собственного значения состоит в том, что он свободен от ограничений ортогональности. После обновления всех необходимых собственных состояний повторная ортогонализация путем диагонализации подпространства является достаточной и простой. Уменьшение количества ортогонализации значительно улучшает масштабирование вычислительных усилий с размером системы, масштабирование остается $O(N^x)$ при $x < 2$ вплоть до очень больших размеров системы. Вместе с оптимизированным предварительным смешиванием зарядовой и спиновой плотности минимизация остаточных величин является очень стабильной и эффективной стратегией решения уравнений Кона-Шэма.

2.4 Ограничения

Расчеты DFT для десятков атомов на ячейку теперь выполняются чрезвычайно быстро, расчеты для нескольких сотен атомов становятся рутинными, если VASP используется в параллельном режиме на кластере среднего размера (от 10 до 30 процессоров). Самые большие системы, обработанные до сих пор с использованием VASP, представляют собой большие суперячейки с числом атомов до 2744.

2.5 Основы работы в VASP

VASP (Vienna Ab initio Simulation Package является кодом, используемым для первопринципного изучения электронной структуры веществ, написан он на языке Фортран. Данный программный пакет использует большое количество входных файлов, необходимых для корректной работы и получения требуемых результатов. Также, после выполнения требуемых расчетов, формируются выходные файлы, которые содержат конечные данные.

Разберем четыре основных входных файла, которые использует пакет VASP. К ним относятся: INCAR, POSCAR, POTCAR и KPOINTS файлы.

Таблица 5 – Основные теги INCAR файла

IBRION	Ионный алгоритм релаксации: 0-MD 1– квазиновый 2 –конъюгированный градиент
POTIM	Временной шаг для ионного движения. Собственное значение может ускорить вычисление
ISIF	Что релаксировать. Обычно 7 – объем, 2 – кластер и 3 или 2 для поверхности
NSW	Количество шагов для ионной релаксации
EDIFF	Критерий остановки для электронного самосогласованного цикла
EDIFFG	Критерий остановки ионной релаксации Обычно в десять раз превышает значение EDIFF
ISPIN	Состояние спина 1 – неполяризованное 2 – поляризованное Различные настройки приведут к различной энергетической ценности
ENCUT	Энергия обрезания. Непосредственно влияет на точность

	расчет и вычисленное значение абсолютной энергии
PREC	Точность расчета.
LCHARG	Для создания CHGCAR файла
LWAVE	Для создания WAVECAR файла
LORBIT	Для записи DOSCAR файла

INCAR файл – основной входной файл. Он содержит информацию о том, как выполнять расчеты и какие именно расчеты требуются. Если обратиться к руководству по использованию программного пакета VASP, можно изучить все существующие теги, необходимо разобрать только те, что будут необходимы в ходе выполнения текущей работы (Таблица 5).

POSCAR файл несет в себе информацию о постоянных решетке, координатах атомов, типе решетки и т.д.

В качестве примера необходимо привести POSCAR файл для элементарной решетки NaCl:

β -Titanium

1.0

```

3.2000000477    0.0000000000    0.0000000000
0.0000000000    3.2000000477    0.0000000000
0.0000000000    0.0000000000    3.2000000477

```

Ti

4

Direct

```

0.0000000000    0.0000000000    0.0000000000
0.5000000000    0.5000000000    0.5000000000
0.5000000000    0.5000000000    0.5000000000
0.0000000000    0.0000000000    0.0000000000

```

Разберем для чего нужна каждая строка в данном файле. Первая строка содержит в себе название системы, в данном случае β -Titanium. Во второй строке находится значение постоянной решетки. В строках 3, 4, 5 находятся вектора решетки, которые определяют элементарную решетку. Следующие две строки содержат в себе информацию о количестве атомов каждого типа, в данном случае тип атомов лишь один. Восьмая строка отвечает за то, в каких

координатах будут описаны положения атомов. Последние четыре строки записаны координаты этих атомов.

Структура элементарной ячейки была визуализирована с помощью программы VESTA (Рис. 10).

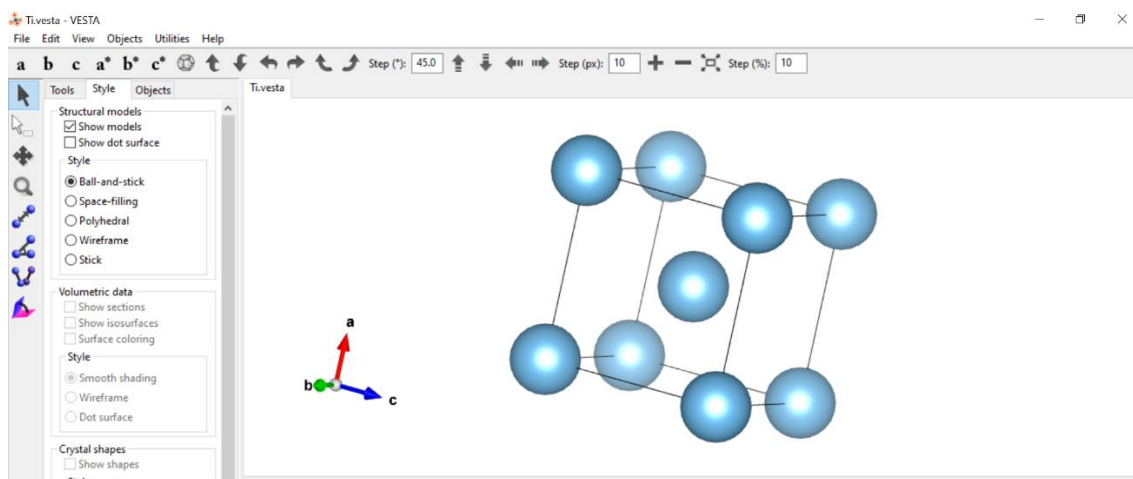


Рисунок 10 – Кристаллическая структура элементарной ячейки β -Ti

POTCAR файл содержит в себе данные о псевдопотенциалах для всех элементов рассматриваемого вещества.

KPOINTS определяет сетку k-точек в зоне Бриллюэна. Выбор набора таких точек зависит типа системы и размера рассматриваемой элементарной ячейки. Чем больше количество k-точек, тем точнее будет производиться расчет, но при этом он будет дороже. Поэтому количество k-точек должно быть подобрано таким образом, чтобы гарантировать высокую точность, но при этом расчет не должен стать слишком затратным.

Далее, по завершении всех расчетов, будут сформированы следующие выходные файлы:

OUTCAR файл, содержащий полную информацию о проведенном вычислении.

- Конечное положение ионов и значение сил
- Количество неприводимых точек
- Время, затраченное для завершения моделирования

OSZICAR: файл содержит информацию о значении свободной энергии (E_0) и скорости сходимости.

CONTCAR: содержит информацию о координатах атомов при последнем шаге релаксации: информация о конечной геометрии структуры

DOSCAR: плотность состояний и уровень Ферми.

CHGCAR: зарядовая плотность.

LOCPOT: полный локальный потенциал (в эВ).

Все расчеты в текущей работе были проведены с использованием метода проекционных присоединенных волн (PAW) [25] с обобщенным градиентным приближением PBE для обменно-корреляционного функционала в программном пакете VASP [26-27]. Для изучаемых систем была выбрана энергия обрезания в 520 эВ. Интегрирование по зоне Бриллюэна проводилось с использованием сетки k-точек 9x9x9, полученной по схеме Монхорста-Пака [28]. Критерий сходимости считался достигнутым, в том случае, когда силы всех атомов изучаемой системы были ниже заданного порогового значения 0,01 эВ/А.

Визуализация атомных структур проводилась в программном пакете VESTA-3 [29]. Для того, чтобы оценить стабильность изучаемых сплавов типа Ti-xNb была рассчитана энергия формирования Гельмгольца и энергия когезии.

Глава 3. Результаты моделирования

Для начала моделирования было необходимо построить конфигурации изучаемых структур Ti-xNb β -типа с помощью подхода специальных квазислучайных структур (SQS). Далее с использованием литературных данных [30] и построенных 16, 54 и 128-атомных ОЦК суперячеек β -Ti ($a=3,320$, $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$, пространственная решетка Im-3m (229)).

На первом этапе моделирования были построены атомные конфигурации изучаемых структур Ti-xNb β -типа с использованием подхода специальных квазислучайных структур (SQS). Исходя из имеющихся литературных данных [30], с помощью построения 16, 54 и 128-атомных ОЦК суперячеек β -Ti ($a=3,320$, $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$, пространственная решетка Im-3m (229)) была получена атомная структура β Ti для проведения компьютерного моделирования. Специальные квазислучайные структуры (SQS) были сгенерированы с помощью mcsqs кода от ATAT (Alloy Theoretic Automated Toolkit) [30] для следующих концентраций Nb: Ti-35Nb, Ti-40Nb, Ti-45Nb, Ti-50Nb (ат.%) (Таблица 6).

Таблица 6 – Структуры суперячеек с указанием их химического состава

Количество элементов в атомных моделях			Химический состав
16 атомов	54 атома	128 атомов	
Ti-5Nb	Ti-19Nb	Ti-45Nb	Ti-35Nb
Ti-6Nb	Ti-22Nb	Ti-51Nb	Ti-40Nb
Ti-7Nb	Ti-24Nb	Ti-58Nb	Ti-45Nb
Ti-8Nb	Ti-27Nb	Ti-64Nb	Ti-50Nb

Далее было необходимо выбрать оптимальную группу сформированных структур для дальнейшего детального исследования свойств, для чего был использован программный пакет VASP.

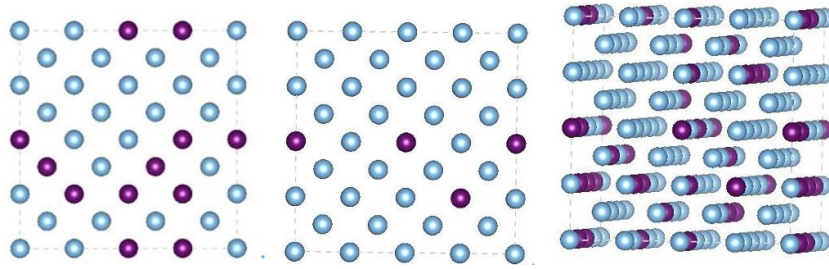


Рисунок 11 – Схематическое изображение структурной ОЦК модели SQS Ti-35Nb (128 атомов всего), Ti-голубой шар, Nb –фиолетовый шар

В ходе расчетов равновесной геометрии, для каждой выбранной концентрации Nb в ячейках с 16, 54 и 128 атомами, были определены 10 лучших (полная энергия системы (E_{tot}) достигает своего минимума в ходе оптимизации в VASP) атомных моделей SQS из листа сформированных. На рисунке 11 можно подробно рассмотреть изображение одной из выбранных структур.

По результатам расчетов энергии формирования и когезии, рассмотренных ниже, было принято решение использовать 54-атомную суперячейку для минимизации вычислительных затрат, так как она показала высокую стабильность системы и достаточную точность полученных данных.

После того как был определен оптимальный размер суперячейки, были выбраны четыре атомные конфигурации (по одной из каждой группы замещения с минимальным значением E_{tot} системы) для проведения первопринципных расчетов определения структурных параметров изучаемых систем.

В таблице 7 приведены расчетные постоянные решетки для сплавов Ti-Nb β -типа. Результаты, полученные для β -фазы Ti-Nb, хорошо согласуются с экспериментальными и литературными данными [31] с погрешностью менее 2%. Отсюда можно сделать вывод о том, что выбранные псевдопотенциалы верны. Как видно из таблицы 7, постоянная решетки сплавов Ti-Nb увеличивается почти линейно с увеличением содержания Nb.

Таблица 7 – Значения постоянной решетки (нм)

Формула(β)	Ti	Ti-35Nb	Ti-40Nb	Ti-45Nb	Ti-50Nb
Данные для настоящей работы	0,3247	0,3278	0,3283	0,3295	0,3301
Экспериментальные данные	0,3282 [31]				0,3287 [31]

3.1 Расчет энергии формирования и когезии

Для определения стабильной конфигурации, т.е. для нахождения оптимального количества и набора атомов в суперячейке, была рассчитана энергия формирования при 0 К, как функция от содержания легирующего элемента в сплаве для различного количества атомов в структуре (16, 54 и 128 атомов). Известно, что чем ниже энергия формирования, тем выше стабильность фазы. Таким образом, для оценки стабильности β фазы в сплавах Ti-Nb рассчитывалась энергия по формуле:

$$E_{for} = \frac{1}{(m+n)} (E_{Ti-xNb} - mE_{Ti}^g - nE_{Nb}^g) \quad (3.1)$$

где E_{Ti-xNb} полная энергия системы Ti-xNb, которая содержит m атомов Ti и n атомов Nb, E_{Ti}^g и E_{Nb}^g полные энергии атомов Ti и Nb в основном состоянии, соответственно.

На рисунке 12 представлены значения энергии формирования при 0 К для всех изучаемых атомных конфигураций суперячейки, содержащей 16, 54, 128 атомов.

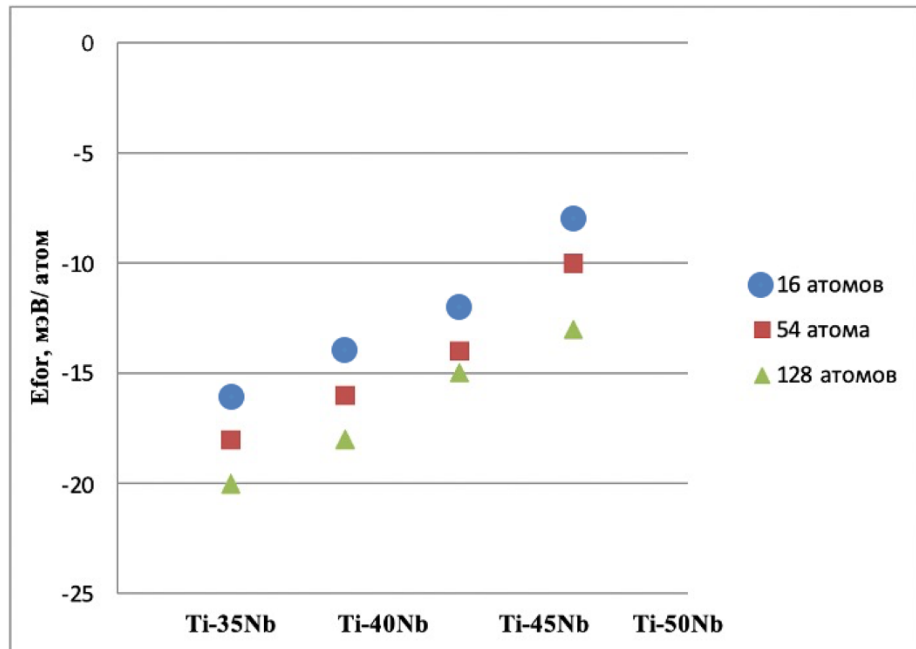


Рисунок 12 – Теоретически рассчитанные энергии формирования сплавов при $T = 0$ К для бинарных сплавов Ti-Nb в зависимости от состава сплава

Полученные результаты показали, что энергии формирования при 0 К имеют отрицательные значения, что подтверждает стабильность изучаемых структур, значение энергии формирования по модулю уменьшается с ростом концентрации Nb для бинарных сплавов Ti-Nb не зависимо от размера суперячейки. Энергия формирования для сплавов Ti-Nb (54 атома) имеет самые низкие значения в случае концентрация Nb = 35 ат.% и составляет -18 мЭВ/атом.

Также, был проведен расчет энергии когезии для сплавов Ti-xNb, расчет которой позволит сделать заключение о влиянии Nb на силы связи атомов в сплаве. Ее расчет был проведен по формуле:

$$E_{coh} = (E_{tot(mTi-nNb)} - mE_{Ti}^{spin} - nE_{Nb}^{spin}) \quad (3.2)$$

где E_{Ti-xNb} полная энергия системы Ti-xNb, содержащая m атомов Ti и n атомов Nb, E_{Ti}^g и E_{Nb}^g полные энергии свободных атомов Ti и Nb, полученных с помощью спин поляризованного расчета, соответственно.

Результаты расчета представлены на рисунке 13. Показано, что энергии когезии сплавов Ti-Nb (16, 54 и 128 атомов в суперячейки) монотонно возрастают по модулю по мере увеличения содержания Nb.

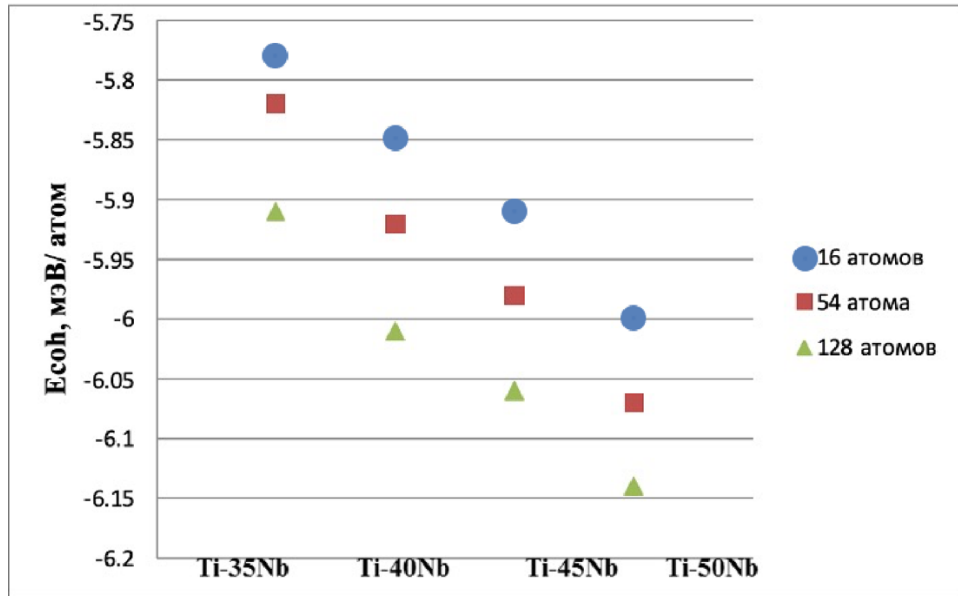


Рисунок 13 – Теоретически рассчитанные энергии когезии сплавов при $T = 0$ К для бинарных сплавов Ti-Nb

Это говорит о том, что фазовая стабильность сплавов Ti-Nb может быть улучшена за счет увеличения содержания Nb. Кроме того, результаты расчетов определили, что рост концентрации Nb влияет на усиление сил связи в Ti-Nb сплавах.

3.2 Расчет и анализ упругих свойств

Также было проведено прогнозирование упругих свойств. Для этого проводился расчёт модуля Юнга (E) с помощью приближения Фойгта – Ройсса– Хилла:

$$E = \frac{9BG}{3B+G}, \quad (3.3)$$

где B - поликристаллический объемный модуль G - модуль сдвига.

B и G были рассчитаны с помощью следующей формулы:

$$G_V = \frac{3C_{44}+C_{11}-C_{12}}{5}, \quad G_R = \frac{5(C_{11}-C_{12})C_{44}}{4C_{44}+3(C_{11}-C_{12})}, \quad G_H = \frac{1}{2}(G_V + G_R),$$

$$B = \frac{C_{11}+2C_{12}}{3}, \quad (3.4)$$

Расчёт упругих постоянных (C_{ij}) проводился в VASP с помощью следующих тэгов INCAR файла программы:

IBRION =6

ISIF=3

NFREE=2

POMIT=0.015

Тензор жесткости в программном пакете VASP был определен путем выполнения шести конечных искажений решетки и получения упругих постоянных из зависимости деформации от напряжения.

$$C = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} - \text{тензор для ОЦК структуры}$$

Тензор модулей податливости S_{ij} был получен с помощью формирования обратной матрицы для матрицы C_{ij} .

Известно, что ОЦК решётка имеет три независимые упругие постоянные: C_{11} , C_{12} и C_{44} .

Для того чтобы кристаллическая решетка ОЦК была стабильной, её упругие постоянные C_{11} , C_{12} и C_{44} удовлетворяли следующим соотношениям:

$$(C_{11}+2C_{12})/3 > 0; C_{11}-C_{12} > 0; C_{44} > 0 \quad (3.5)$$

В таблице 8 представлены значения расчетных упругих постоянных C_{11} , C_{12} и C_{44} для ОЦК Ti-Nb для различных концентраций легирующего элемента, на основе которых проведен расчёт значения модуля Юнга, коэффициент Пуассона и анизотропное отношение Зенера.

Как видно из таблицы 8, при увеличении концентрации ниобия происходит увеличение значения упругой константы C_{11} характеризующей эластичность материала по длине, следовательно, можно сделать вывод о том, что при увеличении концентрации ниобия растет эластичность сплава Ti-xNb, утверждение справедливо как для 16-атомной ячейки, так и для 54-атомной ячейки. Исходя из полученных значений сдвиговой констант C_{12} , C_{44} , можно сказать о том, их значение для чистого титана гораздо выше чем для сплава Ti-Nb.

Таблица 8 – Расчетные упругие постоянные C_{11} (ГПа), C_{12} (ГПа) и C_{44} (ГПа), модуль Юнга – E (ГПа), коэффициент Пуассона – ν , анизотропное отношение Зенера – A , объемный модуль – B , (ГПа), модуль сдвига – G_H (ГПа), и давление Коши ($C_{11} - C_{44}$) – P_c (ГПа) для ОЦК бинарных систем различного состава

Состав (атомов)	C_{11}	C_{12}	C_{44}	E	A	ν	B	G_H	$E/2*(1+\nu)$	B/G_H	P_c	
16	Ti	96,40	117,40	40,21	86,39	3,83	0,37	110,40	31,54	31,53	3,50	56,19
	Ti-35Nb	147,18	90,09	28,04	77,99	0,98	0,38	109,12	28,24	28,25	3,86	119,14
	Ti-40Nb	153,76	93,51	24,64	74,29	0,82	0,39	113,59	26,705	26,72	4,25	129,12
	Ti-45Nb	156,96	93,44	32,79	88,76	1,03	0,37	114,61	32,37	32,39	3,54	124,17
	Ti-50Nb	168,27	102,54	31,23	88,10	0,95	0,38	124,45	31,87	31,92	3,90	137,04
54	Ti	93,14	115,52	39,84	92,04	3,56	0,36	108,06	33,89	33,84	3,19	53,30
	Ti-35Nb	149,31	95,21	39,85	93,00	1,47	0,36	113,24	34,11	34,19	3,32	109,46
	Ti-40Nb	152,24	98,04	33,91	85,40	1,25	0,38	116,11	30,99	30,94	3,75	118,33
	Ti-45Nb	159,36	101,34	32,41	85,68	1,12	0,38	120,68	31,00	31,04	3,89	126,95
	Ti-50Nb	163,87	107,23	28,42	79,19	1,01	0,40	126,11	28,38	28,38	4,44	135,46

Как видно из таблицы 8, при увеличении концентрации ниобия происходит увеличение значения упругой константы C_{11} характеризующей эластичность материала по длине, следовательно, можно сделать вывод о том, что при увеличении концентрации ниобия растет эластичность сплава Ti-xNb, утверждение справедливо как для 16-атомной ячейки, так и для 54-атомной ячейки. Исходя из полученных значений сдвиговой констант C_{12} , C_{44} , можно сказать о том, их значение для чистого титана гораздо выше чем для сплава Ti-Nb.

Модуль Юнга характеризует способность материала сопротивляться растяжению или же сжатию при упругой деформации, Его значения так же меняются при изменении концентрации ниобия в сплаве. Наиболее близкими к значению модуля Юнга для человеческой кости является сплав с 40% концентрацией Nb (74,29 ГПа) для 16-атомной ячейки. В случае 54-атомной ячейки, сплавом с наиболее низким модулем Юнга стал Ti-50Nb (79,19 ГПа).

В ходе работы было рассчитано анизотропное соотношение Зенера, которое является мерой анизотропии твердого материала, также известно, что при $A \approx 1$ материал считается полностью изотропным. Исходя из полученных значений можно сделать вывод о том, что при добавлении ниобия в сплав титана, материал становится более изотропным относительно чистого титана. Однако построить функциональную зависимость значения соотношения Зенера от концентрации ниобия в сплаве не представляется возможным, так как значения меняются случайным образом.

Коэффициент Пуассона также, как и модуль Юнга характеризует упругие свойства материала. Чем он выше, тем более пластичным является материал, анализируя измеренные значения, можно сделать вывод о том, что присутствие ниобия в сплаве практически никак не отражается на пластичности материала (максимальное изменение коэффициента Пуассона составило 0,02),

Объемный модуль показывает, насколько велика способность материала сопротивляться сжатию. Полученным значениям показывают, что с ростом концентрации Nb растет и сопротивление материала деформации при сжатии.

Модуль сдвига, характеризующий способность материала сопротивляться сдвиговой деформации, также изменяется с увеличением концентрации Nb в сплаве, Наименьший показатель модуля сдвига в 16-атомной ячейке демонстрирует сплав Ti-40Nb (26,7 ГПа), а в 54-атомной ячейке Ti-50Nb (28,38 ГПа).

Соотношение объемного и сдвиговых модулей используется в качестве характеристики пластичности или же хрупкости материала. При $V/G_H < 1,75$ материал является хрупким, при $V/G_H > 1,75$ материал считается пластичным. Как видно из таблицы 8, с увеличением концентрации ниобия материал становится более пластичным.

Значение давления Коши для материалов с металлической связью положительное, и чем оно больше, тем более пластичным является материал. Исходя из полученных значений можно сказать о том, что с увеличением

концентрации ниобия материал становится более пластичным, это в свою очередь согласуется с анализом соотношения V/G_H .

Также, исходя из того, что при $C_{11} < C_{12}$ фаза является нестабильной, можно сделать вывод о том, что в чистом титане β -Ti крайне нестабильна. Однако, при увеличении концентрации Nb стабильность β -Ti начинает увеличиваться вместе с увеличением C_{11} относительно C_{12} .

3.3 Анализ анизотропных свойств

Исходя из полученных выше данных об упругих свойствах, была также исследована зависимость изотропных свойств сплава Ti-Nb от концентрации Nb. Расчет модулей Юнга проводился для плоскостей (100), (110) и (111) в 16- и 54- атомной ячейке. Результаты расчетов представлены в таблице 9.

Таблица 9 – Модуль Юнга (ГПа) для разных кристаллографических плоскостей и составов сплава (ат.%)

Состав		E_{100}	E_{110}	E_{111}
16- атомов	Ti-35Nb	76,92	76,92	76,92
	Ti-40Nb	83,33	72,72	69,77
	Ti-45Nb	90,91	90,91	90,91
	Ti-50Nb	90,91	86,96	85,71
54- атома	Ti-35Nb	76,92	97,56	107,14
	Ti-40Nb	76,92	88,89	93,75
	Ti-45Nb	83,33	88,89	90,91
	Ti-50Nb	76,92	78,4	78,95

Как видно из таблицы 10, с ростом концентрации Nb происходит повышение изотропных свойств сплава, так как для разных плоскостей значения модуля становятся приблизительно равными.

3.4 Расчет и анализ электронных свойств

Для того, чтобы подтвердить выводы, сделанные исходя из анализа механических свойств, был проведен анализ распределения заряда в 54-атомной ячейке Ti-50Nb. Для этого были получены файлы CHGCAR с помощью пакета VASP, а затем построена сама ячейка с отображенным на ней распределением зарядов.

Для более детального анализа разности плотности зарядов, была выделена плоскость (110) в трехмерной ячейке Ti-50Nb (Рис. 14).

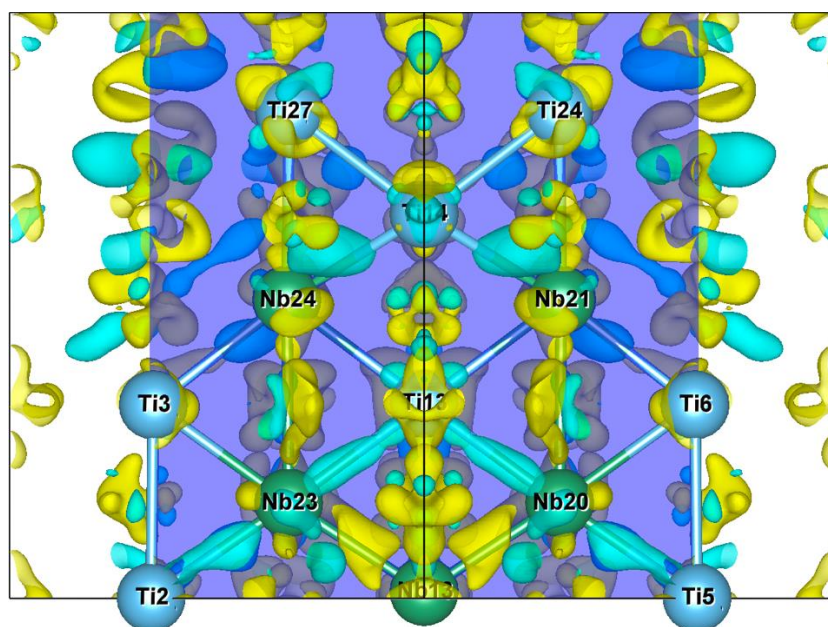


Рисунок 14 – Плоскость (110) в трехмерной ячейке (уровень изоповерхности: $\pm 0,008 \frac{e}{\text{Å}^3}$, желтый цвет – зона накопления заряда, синий цвет – зона истощения)

А также была построена проекция распределения зарядовой плотности на плоскость (110) (Рис. 15).

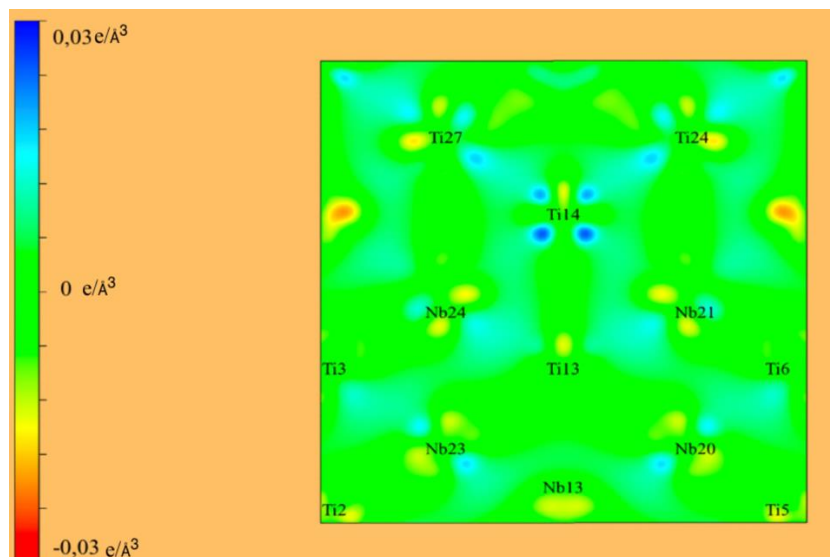


Рисунок 15 – Проекция распределения зарядовой плотности на плоскость (110)

На обоих рисунках синим цветом обозначены участки большой плотности заряда, а желтым или же оранжевым цветом обозначены участки с низкой зарядовой плотностью. Как видно из рисунков 14 и 15, атом Ti14 активно отдает электроны атомам Ti24, Ti27, Nb24 и Nb21. Между атомами титана находятся по две зоны большой плотности заряда, что может говорить о сильной металлической связи. Между атомами Ti и Nb со стороны атома Ti находится зона большой плотности заряда, а возле атома Nb находится зона истощения, это говорит о том, что заряд от Ti переносится к атому Nb. Это говорит о существовании ковалентной связи. Взаимодействие же между атомами Nb довольно схоже с взаимодействием Ti-Nb, отличается оно лишь тем, что оно намного слабее, об этом можно судить по величине заряда на рисунке 15. Такая связь называется гомополярной ковалентной. Так же по рисунку 14 можно судить о том, что сила взаимодействия между атомами сильно зависит от межатомных расстояний.

Подтвердить выводы о том, что заряд переносится от атомов Nb к атомам Ti можно с помощью Бейдеровского анализа переноса интегрального заряда, проведенного с помощью кода от Henckelman Group (таблица 10).

Таблица 10 – Бейдеровский анализ интегрального переноса заряда

Nb				Ti			
Номер атома	Кол-во валентных электронов, \bar{e}	Исходное, \bar{e}	После взаимодействия, \bar{e}	Номер атома	Кол-во валентных электронов, \bar{e}	Исходное, \bar{e}	После взаимодействия, \bar{e}
1	11	11,78	-0,78	1	10	9,51	0,49
2		11,60	-0,60	2		9,26	0,74
3		11,48	-0,48	3		9,31	0,69
4		11,60	-0,60	4		9,47	0,53
5		11,58	-0,58	5		9,51	0,49
6		11,77	-0,77	6		9,43	0,57
7		11,57	-0,57	7		9,33	0,67
8		11,49	-0,49	8		9,37	0,63
9		11,75	-0,75	9		9,42	0,58
10		11,59	-0,59	10		9,46	0,54
11		11,52	-0,52	11		9,52	0,48
12		11,47	-0,47	12		9,30	0,70
13		11,40	-0,40	13		9,46	0,54
14		11,52	-0,52	14		9,39	0,61
15		11,48	-0,48	15		9,40	0,60
16		11,58	-0,58	16		9,44	0,56
17		11,56	-0,56	17		9,40	0,60
18		11,58	-0,58	18		9,47	0,53
19		11,62	-0,62	19		9,50	0,50
20		11,53	-0,53	20		9,44	0,56
21		11,66	-0,66	21		9,40	0,60
22		11,50	-0,50	22		9,28	0,72
23		11,44	-0,44	23		9,41	0,59
24		11,46	-0,46	24		9,50	0,50
25		11,58	-0,58	25		9,43	0,57
26		12,21	-1,21	26		9,36	0,64
27		11,48	-0,48	27		9,43	0,57
		Суммарно	-15,80			Суммарно	15,80

Из таблицы 10 видно, что от атомов Ti к атомам Nb переходит суммарно порядка 16 электронов, что согласуется с выводами, сделанными в результате анализа рисунков 14 и 15.

Выводы о типах связей, сделанные в результате анализа рисунков 14 и 15, можно подтвердить исходя из данных об электроотрицательности (Рис.16).

1	1A	H	3.04	2	2A	He	4.42																																																								
2	Li	2.17	Be	2.42	3	B	3.04	4	4A	C	3.15	5	5A	N	3.56	6	6A	O	3.78	7	7A	F	4.00	8	8A	Ne	4.44																																				
3	Na	2.15	Mg	2.39	9	Al	2.52	10	10A	Si	2.82	11	11A	P	3.16	12	12A	S	3.44	13	13A	Cl	3.50	14	14A	Ar	3.57																																				
4	K	2.07	Ca	2.20	15	Ti	2.23	16	IVB	V	2.08	17	VB	Cr	2.12	18	6B	Mn	2.20	19	7B	Fe	2.32	20	8B	Co	2.34	21	9B	Ni	2.32	22	10B	Cu	2.86	23	11B	Zn	2.26	24	12B	Ga	2.43	25	13B	Ge	2.79	26	14B	As	3.15	27	15B	Se	3.37	28	16B	Br	3.45	29	17B	Kr	3.37
5	Rb	2.07	Sr	2.13	31	Zr	2.05	32	IVB	Nb	2.59	33	5B	Mo	2.47	34	6B	Tc	2.82	35	7B	Ru	2.68	36	8B	Rh	2.65	37	9B	Pd	2.70	38	10B	Ag	2.88	39	11B	Cd	2.36	40	12B	In	2.29	41	13B	Sn	2.68	42	14B	Sb	3.05	43	15B	Te	3.14	44	16B	I	3.20	45	17B	Xe	3.12
6	Cs	1.97	Ba	2.02	47	Hf	2.01	48	IVB	Ta	2.32	49	5B	W	2.42	50	6B	Re	2.59	51	7B	Os	2.72	52	8B	Ir	2.79	53	9B	Pt	2.98	54	10B	Au	2.81	55	11B	Hg	2.92	56	12B	Tl	2.26	57	13B	Pb	2.62	58	14B	Bi	2.69	59	15B	Po	2.85	60	16B	At	3.04	61	17B	Rn	3.04
7	Fr	2.01	Ra	2.15	63	Rf	2.27	64	IVB	Db	2.38	65	5B	Sg	2.51	66	6B	Bh	2.48	67	7B	Hs	2.52	68	8B	Mt	2.66	69	9B	Ds	2.73	70	10B	Rg	2.83	71	11B	Cn	3.03	72	12B	Nh	2.49	73	13B	Fl	2.57	74	14B	Mc	2.21	75	15B	Lv	2.42	76	16B	Ts	2.61	77	17B	Og	2.59
8	La	2.49	89	Ce	2.61	90	Pr	2.24	91	92	Nd	2.11	93	94	Pm	2.24	95	96	Sm	1.90	97	98	Eu	1.81	99	100	Gd	2.40	101	102	Tb	2.29	103	104	Dy	2.07	105	106	Ho	2.12	107	108	Er	2.02	109	110	Tm	2.03	111	112	Yb	1.78	113	114	Lu	2.68							
9	Ac	2.22	115	Th	2.62	116	Pa	2.33	117	118	U	2.45	119	120	Np	2.35	121	122	Pu	2.22	123	124	Am	2.28	125	126	Cm	2.31	127	128	Bk	2.08	129	130	Cf	2.18	131	132	Es	2.29	133	134	Fm	2.38	135	136	Md	2.47	137	138	No	2.06	139	140	Lr	2.10							

Рисунок 16 – Значения электроотрицательности по шкале Оганова [32]

Далее используя формулу для расчета разности электроотрицательности:

$$\Delta\chi = \chi_{Nb} - \chi_{Ti} \quad (3.6)$$

А также формулу для расчета общей электроотрицательности:

$$\sum\chi = \frac{\chi_{Nb} + \chi_{Ti}}{2} \quad (3.7)$$

Получаем значения $\Delta\chi$ и $\sum\chi$ равные 0,36 и 2,41 соответственно и используя треугольник Ван Аркеля-Кетелара, делаем вывод о том, что суждения о связях между атомами в рассматриваемой ячейке были верны (Рис.17).

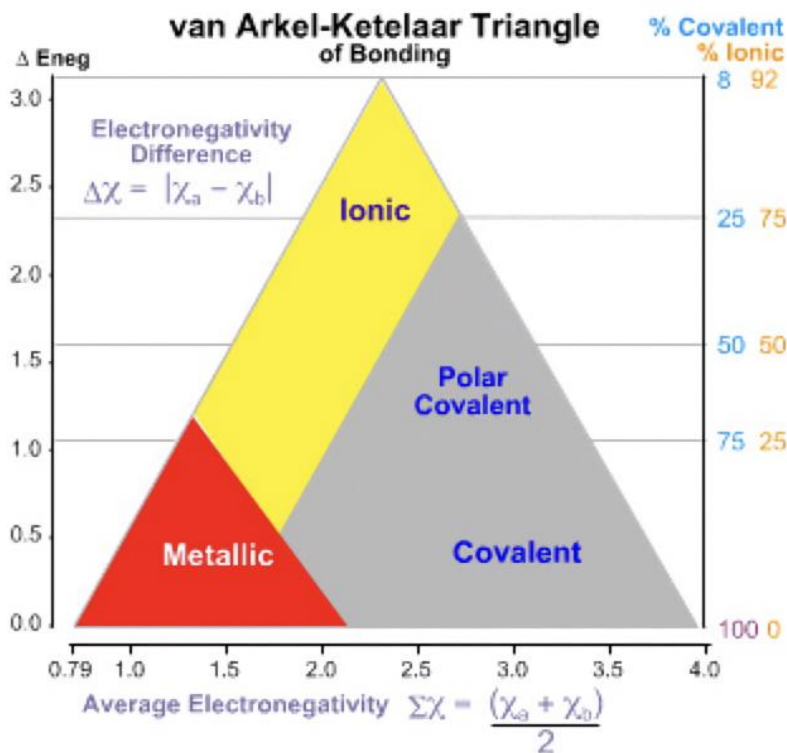


Рисунок 17 – Треугольник Ван Аркеля-Кетелара [33]

В итоге данного анализа, было установлено, что в ячейке между атомами Ti-Nb существует слабая ковалентная связь, атомы Ti и Ti связаны между собой металлической связью, а атомы Nb и Nb связаны гомополярной ковалентной связью. Из графиков на рисунках 14 и 15 можно сделать вывод о том, что некоторые из атомов Ti были замещены атомами Nb, что привело к образованию ковалентных связей между атомами Ti-Nb и Nb-Nb, но все же в большей степени материал имеет металлическую природу.

Глава 4. Социальная ответственность

Введение

Данный раздел выпускной квалификационной работы посвящен вопросам обеспечения нормативных условий труда и (санитарно-гигиенические требования, обеспечение пожарной безопасности, защита от опасных и вредных производственных факторов) в соответствии с нормативными документами.

В современных условиях труда для снижения производственного травматизма и профессиональной заболеваемости важным является внедрение системы целенаправленных действий по защите и охране труда на всех стадиях производственного процесса. В данной работе для проведения первопринципных расчетов использовалась персональная электронно-вычислительная машина (ПЭВМ). Для внедрения определенных правил и мер предосторожности необходимо разработать комплекс мероприятий технического, организационного, режимного и правового характера, минимизирующих негативные последствия.

Данный раздел рассматривает опасные и вредные факторы исследования, а также отвечает на вопросы безопасности рабочего и сохранности его здоровья.

4.1 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

Правовые нормы трудового законодательства, относительно работы в описанных выше условиях регулируются таким документом как, Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 27.12.2018) [34]. Согласно данному документу, нормальная продолжительность рабочего времени не может превышать 40 часов в неделю, в данном случае продолжительность рабочей недели составляет шесть дней. Как следствие, применяется следующий режим работы: с понедельника по пятницу 7 часов в день, в субботу 5 часов в день. Оплата труда производится в размере не ниже

уровня МРОТ, и нормы труда установлены в соответствии с уровнем техники, технологии, организации производства и труда.

4.2 Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя.

Рациональная планировка рабочего места должна обеспечивать наилучшее размещение орудий и предметов труда, не допускать общего дискомфорта, уменьшать утомляемость работника, повышать его продуктивность труда.

Рациональная планировка рабочего места предусматривает четкий порядок и постоянство размещения предметов, средств труда и документации. Согласно ГОСТу 12.2.032-78 «ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования.» [35], должны быть соблюдены требования о размере зоны досягаемости моторного поля в вертикальной и горизонтальной плоскостях, высоты рабочей поверхности, пространства для ног и рабочего сиденья. Отрегулировано размещение средств отображения информации, а именно мониторов ЭВМ: под углом $\pm 15^\circ$ от нормальной линии взгляда и в горизонтальной плоскости под углом $\pm 15^\circ$ от сагиттальной плоскости.

4.3 Производственная безопасность.

4.3.1 Анализ вредных и опасных факторов, которые могут возникнуть на рабочем месте при проведении исследований.

В ходе анализа рабочего места при проведении исследований было выявлено, что в лаборатории возможно наличие таких вредных и опасных факторов, как:

- Отклонение показателей микроклимата;
- Превышение уровня шума;
- Недостаточная освещенность рабочей зоны;

– Опасность электрического тока;

Все вышеописанные факторы объединены в таблице 11 и классифицированы в соответствии с ГОСТ 12.0.003-2015 [36].

Таблица 11 – Возможные опасные и вредные факторы

Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015)	Тип фактора		Нормативные документы
	Вредный	Опасный	
1.Отклонение показателей микроклимата	+	-	Требования к допустимым параметрам микроклимата регулируются СанПиН 2.2.4.548–96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений [37].
2. Превышение уровня шума	+	-	ГОСТ 12.1.003-2014 ССБТ. Шум. Общие требования безопасности.[38]
3.Недостаточная освещенность рабочей зоны	+	-	СанПиН 2.1.3685-21. Гигиенические нормативы и требования к обеспечению безопасности и (или) безвредности для человека факторов среды обитания.[40]
4. Опасность электрического тока	-	+	Система стандартов безопасности труда. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты. ГОСТ 12.1.019-2017[42]

4.3.2 Превышение уровня шума

Производственным шумом называется шум на рабочих местах, на участках или на территориях предприятий, который возникает во время производственного процесса. Источниками шума на производстве является транспорт, технологическое оборудование, системы вентиляции, пневмо- и гидроагрегаты, а также источники, вызывающие вибрацию.

Следствием вредного действия производственного шума могут быть:

- профессиональные заболевания,
- повышение общей заболеваемости,

- снижение работоспособности,
- снижение производительности труда.

Шум с уровнем звукового давления до 35дБ привычен для человека и не беспокоит его. Повышение этого уровня до 40–80дБ создает значительную нагрузку на нервную систему, вызывая ухудшение самочувствия, а при длительном действии может быть причиной нервов. Воздействие шума уровнем свыше 80дБ может привести к потере слуха – профессиональной глухоте. При действии уровней свыше 140дБ возможен разрыв барабанных перепонки, контузия, а при уровне более 160дБ наступает летальный исход.

Средства индивидуальной защиты органов слуха установлены ГОСТ 12.4.318-2019 по системе стандартов безопасности труда. К средствам защиты относятся противозумные шлемофоны (шлемы), наушники, заглушки, вкладыши. Они эффективно защищают организм от раздражающего действия шума, предупреждая возникновение различных функциональных нарушений и расстройств, если правильно подобраны и систематически используются.

Для определения допустимого уровня шума на рабочих местах используется ГОСТ 12.1.003-2014 ССБТ. «Шум. Общие требования безопасности.» [5], СН 2.2.4/2.1.8.562–96. «Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории застройки» [39]. В таблице 12 приведены допустимые уровни звукового давления на рабочем месте согласно нормам из СН 2.2.4/2.1.8.562–96.

Таблица 12 – Допустимые уровни звукового давления на рабочем месте [39]

Вид деятельности	Частота, Гц							
	Уровень звукового давления, дБА							
Работа, требующая сосредоточенности	31,5	63	125	250	500	1000	2000	4000
	103	91	83	77	73	70	68	66

Следует использовать средства коллективной защиты. Они подразделяются на средства, снижающие шум в источнике его возникновения, и средства, снижающие шум на пути его распространения от источника до защищаемого объекта.

Работающих в шумоопасных зонах, администрация снабжает средствами индивидуальной защиты, которыми являются специальные наушники, вкладыши в ушную раковину, противошумовые каски, защитное действие которых основано на изоляции и поглощения звука.

4.3.3 Отклонение показателей микроклимата.

Микроклиматом называются метеорологические условия внутри производственных помещений. К показателям микроклимата можно отнести факторы: температура воздуха, скорость движения воздуха, влажность и тепловое излучение. Отклонение показателей от нормы может вызвать изменение природных условий, например, аномальную жару или мороз.

Повышенная влажность воздуха затрудняет терморегуляцию организма, т.к. происходит снижения испарения пота, а пониженная влажность вызывает пересыхание слизистых оболочек дыхательных путей.

Недостаточная вентиляция рабочего помещения, повышение влажности воздуха, попадание прямых солнечных лучей, перегрев оборудования могут вызвать у человека ухудшение самочувствия, что напрямую влияет на его работоспособность, производительность и здоровье.

Санитарными нормами, установленными для производственных помещений [37] заданы оптимальные и допустимые диапазоны температуры воздуха, скорости движения молекул и влажности воздуха.

В таблице 13 представлены оптимальные и допустимые параметры рабочей зоны для различных категорий работ. В нашем случае, категория работ - Па, т.е. работы, связанные с постоянной ходьбой, выполняемые стоя или сидя, но не требующие перемещения тяжестей.

Таблица 13 – Оптимальные и допустимые параметры температуры для рабочей зоны [37]

Период года	Температура воздуха, °С	Температура поверхностей, °С	Относительная влажность, %	Скорость движения воздуха, м/с
-------------	-------------------------	------------------------------	----------------------------	--------------------------------

Холодный и переходный	22-24	21-25	40-60	0,1
Теплый	23-25	22-26	40-60	0,1

К мероприятиям по оздоровлению воздушной среды в производственном помещении относятся: правильная организация вентиляции и кондиционирования воздуха, отопление помещений. Вентиляция может осуществляться естественным и механическим путём. В помещение должны подаваться следующие объёмы наружного воздуха: при объёме помещения до 20 м³ на человека – не менее 30 м³ в час на человека; при объёме помещения более 40 м³ на человека и отсутствии выделения вредных веществ допускается естественная вентиляция.

Система отопления должна обеспечивать достаточное, постоянное и равномерное нагревание воздуха. В помещениях с повышенными требованиями к чистоте воздуха должно использоваться водяное отопление. Параметры микроклимата в используемой лаборатории регулируются системой центрального отопления, и имеют следующие значения: влажность – 40%, скорость движения воздуха – 0,1 м/с, температура летом 20–25 °С, зимой 13– 15 °С. В лаборатории осуществляется естественная вентиляция. Воздух поступает и удаляется через щели, окна, двери. Основной недостаток такой вентиляции в том, что приточный воздух поступает в помещение без предварительной очистки и нагревания.

4.3.4 Недостаточная освещенность рабочей зоны

Наиболее благоприятное воздействие на организм человека оказывает естественное ощущение. Однако, не всегда возможно создать данные условия на рабочем месте. В таком случае используется искусственное освещение. Недостаточное освещение рабочего места затрудняет длительную работу, вызывает повышенное утомление и способствует развитию близорукости. Слишком низкие уровни освещенности вызывают апатию, сонливость, а в

некоторых случаях способствуют развитию чувства тревоги. Длительное пребывание в условиях недостаточного освещения сопровождается снижением интенсивности обмена веществ в организме и ослаблением его реактивности.

Нормы естественного и искусственного освещения, а также тип зрительных работ, для которых необходим тот или иной уровень освещения регламентирован документами СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278–03. «Гигиенические требования к естественному, искусственному и совмещённому освещению жилых и общественных зданий» и СП 52.13330.2016 «Естественное и искусственное освещение. Актуализированная редакция СНиП 23-05-95*(с Изменением N 1)» [40]. В соответствии с данными документами принимается разряд точности зрительной работы 4, который прописан в таблице 14. На рабочей поверхности должны отсутствовать резкие тени, которые создают неравномерное распределение поверхностей с различной яркостью в поле зрения, искажает размеры и формы объектов различия, в результате повышается утомляемость и снижается производительность труда.

Таблица 14 – Нормирование значения освещенности на рабочих местах производственных помещений при искусственном освещении [40]

Характер зрительной работы	Наименьший размер объекта	Подразряд зрительной работы	Контраст объекта различия	Характер фона	Освещенность, лк	
					Комбинированное	Общее
Средняя точность (4 разряд зрительной работы)	0,5-1,0	а	Малый	Темный	750	400
			Малый	Средний	500	300
		Средний	Темный	500	300	
		в	Малый	Светлый	400	200
			Средний	Средний	400	200

Естественного освещения в лаборатории по условиям зрительной работы, как правило, недостаточно, как правило, недостаточно, поэтому на рабочих местах оказывается задействованным и искусственное освещение. Оно может быть обеспечено с помощью люминесцентных ламп ЛВ (белого цвета) мощностью 20, 40, 80 Вт. Для рабочих мест с искусственным

освещением регламентирована допустимая освещенность, согласно действующим санитарным нормам и правилам СП 52.13330.2016 [42].

4.3.5 Электробезопасность и пожаробезопасность.

Основными причинами воздействия тока на человека являются: случайные проникновения или приближение на опасное расстояние к токоведущим частям; появление напряжения на металлических частях оборудования в результате повреждения изоляции и т.д.

Поражающее действие электрического тока зависит от значения и длительности протекания тока через тело человека, рода и частоты тока, места протекания тока, индивидуальных свойств человека. Опасной величиной тока является ток, равный 0,001 А, а смертельной 0,1 А. Также исход электропоражения зависит от состояния внешней среды. Могут быть следующие виды воздействий:

- термическое (ожог);
- электрическое;
- механическое (электрометаллизация);
- биологическое (паралич мышц, электрический удар).

Устанавливает предельно допустимые уровни (ПДУ) напряжений и токов ГОСТ 12.1.038 – 82. [42]

Помещение, в котором производилась дипломная работа, относится к помещениям третьего класса, так как там отсутствуют условия, создающие повышенную или особую опасность, вследствие этого к оборудованию предъявляются следующие требования:

- экран видеомонитора должен находиться на расстоянии не менее 50 см от пользователя (расстояния от источника);
- защитное заземление — это преднамеренное электрическое соединение с землей или ее эквивалентом металлических нетоковедущих частей, которые могут оказаться под напряжением.

Цель защитного заземления – снизить до безопасной величины напряжение относительно земли на металлических частях оборудования, которые не находятся под напряжением, но могут оказаться под напряжением вследствие нарушения изоляции электроустановок. В результате замыкания на корпус заземленного оборудования снижается напряжение прикосновения и ток, проходящий через тело человека, при его прикосновении к корпусам.

Защитное заземление применяется в трехфазных трех проводных сетях напряжением до 1000В с изолированной нейтралью, а в сетях напряжением 1000В и выше с любым режимом нейтрали.

Наибольшие допустимые значения сопротивления заземления растеканию тока, установленные правилами устройства электроустановок, составляют для установок до 1000 В (4 Ом) – при суммарной мощности генераторов или трансформаторов, питающих данную сеть, не более 100 кВА. Наиболее допустимое значение постоянного тока 0,1 А. Наиболее допустимое значение напряжения 36 В [43].

Поэтому к работе на ПЭВМ допускаются лица, прошедшие обучение безопасным методам труда, вводный инструктаж, первичный инструктаж на рабочем месте. Каждый работник должен знать правила первой медицинской помощи при поражении электрическим током, чтобы быть готовым оказать помощь другим работникам.

Здание, где был разработан дипломный проект, построено из кирпича. Помещение снабжено противопожарной защитой, направленной на предотвращение воздействия на людей опасных факторов пожара. Рабочее помещение относится к 1-й степени огнестойкости по СНиП 21-01-97* [44]. Возникновение пожара при работе с электронной аппаратурой может быть по причинам электрического характера. Причины возникновения пожара электрического характера: короткое замыкание, перегрузки по току, искрение и электрические дуги, статическое электричество и т. п.

Пожарная безопасность обеспечивается наличием огнетушителей:

Огнетушитель углекислотный (ОУ-2). ОУ-2 предназначен для тушения загораний веществ, горение которых не может происходить без доступа воздуха, загораний электроустановок, находящихся под напряжением не более 10 000 В, жидких и газообразных веществ (класс В, С, Е), загораний в архивах, музеях, картинных галереях.

Согласно ФЗ-123 от 2008г. [44] помещения производственного и складского назначения независимо от их функционального назначения подразделяются на следующие категории:

- повышенная взрывопожароопасность (А);
- взрывопожароопасность (Б);
- пожароопасность (В1 - В4);
- умеренная пожароопасность (Г);
- пониженная пожароопасность (Д).

Лаборатория относится к категории Г. Помещения, в которых находятся негорючие вещества и материалы в горячем, раскаленном или расплавленном состоянии, процесс обработки которых сопровождается выделением лучистого тепла, искр и пламени; горючие газы, жидкости и твердые вещества, которые сжигаются или утилизируются в качестве топлива.

Здание должно соответствовать требованиям пожарной безопасности, а именно, наличие охранно-пожарной сигнализации, плана эвакуации, порошковых или углекислотных огнетушителей с поверенным клеймом, табличек с указанием направления к эвакуационному выходу [44].

4.4 Экологическая безопасность.

Вопрос об охране окружающей среды являются актуальным и крайне важным в настоящее время, так как с каждым годом увеличивается количество веществ, загрязняющих окружающую среду. В ходе данной работы были использованы следующие ресурсы: электроэнергия для работы компьютера; бумага.

С точки зрения потребления ресурсов компьютер потребляет сравнительно небольшое количество электроэнергии, что положительным образом сказывается на общей экономии потребления электроэнергии в целом, что нельзя сказать про вакуумные насосы, так как процесс достижения вакуума достаточно долговременный. При написании ВКР вредных выбросов в атмосферу, почву и водные источники не производилось, радиационного заражения не произошло, чрезвычайные ситуации не наблюдались, поэтому не оказывались существенные воздействия на окружающую среду, и никакого ущерба окружающей среде не было нанесено. В связи с тем, что огромная масса информации содержится на бумажных носителях, уничтожение бумаги играет очень важную роль. Среди основных методов уничтожения, которые применяются на сегодняшний день для бумажных документов, следует отметить следующие:

- Сжигание документов
- Шредирование
- Закапывание
- Химическая обработка

Для утилизации титановых проб используют специальные контейнеры для неорганических материалов. Произведенные композиционные материалы не являются токсичными. В связи с этим данные материалы не требуют специальных способов хранения до момента утилизации. Утилизация данных материалов происходит специальными службами.

4.5 Безопасность в чрезвычайных ситуациях.

4.5.1 Анализ вероятных ЧС, которые могут возникнуть на рабочем месте при проведении исследований.

В здании, где была разработана бакалаврская работа, возможны следующие чрезвычайные ситуации: пожар, взрывы, террористические акты и

диверсии, природные чрезвычайные ситуации (мороз), проникновение посторонних лиц на рабочее место.

Но наиболее вероятным ЧС является пожар. Пожар определяют как неконтролируемое горение, которое наносит вред здоровью и жизни человека, а также причиняет материальный ущерб.

Пожар может возникнуть из – за неисправности работы технического оборудования, короткого замыкания, а также неисправности проводки и т.д.

4.5.2 Обоснование мероприятий по предотвращению ЧС и разработка порядка действия в случае возникновения ЧС.

1. Повышение устойчивости системы электроснабжения. Прежде всего, целесообразно заменить воздушные линии электропередачи кабельными (подземными) сетями, использовать резервные сети для потребителей электроэнергии, обеспечить резервные источники питания объекта (мобильные электрогенераторы).

2. Обеспечение стабильности теплоснабжения, системного звонка, углубления теплотрасс.

3. Обеспечение устойчивости системы водоотведения. Повышение устойчивости канализационной системы путем создания резервной сети трубопроводов, через которую загрязненная вода может быть отведена в случае отказа основной сети. Необходимо разработать схему аварийного сброса сточных вод непосредственно в водоемы.

4. Создать маршруты аварийной эвакуации и разработать планы аварийного спасения.

Выводы по главе «Социальная ответственность»

В разделе выпускной квалификационной работы, посвященной социальной ответственности был проведен анализ вредных и опасных факторов для инженера непосредственно на рабочем месте. Был предложен перечень меры, для предотвращения заболевания, а также меры безопасности. Так же проведен анализ безопасности предприятия по отношению к экологии и безопасность в случае чрезвычайных ситуаций. В результате анализа было подтверждено, что все необходимые меры для обеспечения безопасности сотрудников в лаборатории приняты, например, все элементы, порождающие шум изолированы. Так же в лаборатории установлены широкие пластиковые окна, которые обеспечивают необходимый уровень освещения и вентиляции воздуха. Установлена оптимальная система освещения для обеспечения искусственного белого света. В случае ЧС в лаборатории присутствует план эвакуации, огнетушитель. Лаборатория устанавливается на сигнализацию и корпус находится под вахтовой охраной.

Глава 5. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

Введение

Цель данного раздела выпускной квалификационной работы «Численное моделирование физико-механических свойств сплава Ti-Nb медицинского назначения» заключается в финансовом планировании и оценке ресурсоэффективности данного проекта.

Для достижения поставленной цели необходимо решить поставленные задачи:

1. Оценка коммерческого потенциала и перспективности поведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения;
2. Провести анализ конкурентных технических решений;
3. Провести SWOT-анализ для выявления сильных и слабых сторон проекта;
4. Разработка планирования научно-исследовательских работ;
5. Определение бюджета научно-технического исследования;
6. Оценка ресурсной эффективности научно-технического исследования.

Данный раздел является значимым в проектировании данной работы, так как он включает в себя экономическую оценку и сравнительную характеристику успешности разработки. Из данных критериев уже будет ясна выгодность данного метода.

5.1 Потенциальные потребители данного исследования

Для анализа потребителей результатов исследования необходимо рассмотреть целевой рынок и провести его сегментирование.

Целевой рынок – это сегменты рынка, на котором будет продаваться данная научная разработка.

Сегмент рынка – это выделенная часть рынка или же группы потребителей, которые обладают определенными признаками.

Сегментирование – это деление покупателей на однородные группы, каждой из которых требуется определенный товар или услуга.

Объектом данного исследования является сплав β -титана (β -Ti) и ниобия (Nb) с концентрациями Nb 35, 40, 45, 50 ат. %.

Выбор нужной концентрации Nb дает возможность менять свойства сплава для его применения как материала для изготовления импланта в соответствии с индивидуальными требованиями пациента.

В таблице 15 представлены потенциально заинтересованные стороны проекта.

Таблица 15 – Заинтересованные стороны проекта

Заинтересованные стороны проекта	Ожидания заинтересованных сторон
Научные центры	Использование полученных результатов для разработки и улучшения свойств получаемых сплавов Ti-Nb
Организации по производству медицинских изделий	Прикладное применение

5.2 Анализ конкурентных технических решений

Анализ конкурентных разработок рынка, которые проводятся научными группами и центрами, проводится постоянно. Это связано с появлением новых разработок на рынке. Данный анализ необходим в научном исследовании для того, чтобы: во-первых, своевременно вносить корректировки в исследования; во-вторых, поддерживать рентабельность данного проекта. Важным аспектом в этом разделе является непредвзятость

рассмотрения научной разработки, то есть адекватно определить сильные и слабые стороны проекта по сравнению с другими разработками.

С этой целью может быть использована вся информация о конкурентных разработках:

- Технические характеристики разработки;
- Конкурентоспособность;
- Уровень завершенности научного исследования;
- Затраченный бюджет;
- Уровень проникновения на рынок;
- Финансовое положение конкурентов, тенденции его изменения и т.д.

Целесообразно проводить данный анализ с помощью оценочной карты, которая приведена в таблице 16.

Позиция разработки и конкурентов оценивается по каждому показателю экспертным путем по пятибалльной шкале, где 1 – наиболее слабая позиция, а 5 – наиболее сильная. Веса показателей, определяемые экспертным путем, в сумме должны составить 1. Анализ конкурентных технических решений определяется по формуле:

$$K = \sum B_i \cdot B_i, \quad (3.1.1)$$

где K – конкурентоспособность научной разработки или конкурента;

B_i – вес показателя (в долях единицы);

B_i – балл i -го показателя.

Основным конкурентом сплава β -Ti и Nb являются сплавы Ti-6Al-4V и Ti-35Zr-7Nb-5Ta. Так как они обладают приблизительно одинаковыми механическими характеристиками.

Критерии для сравнения и оценки ресурсоэффективности и ресурсосбережения, приведенные в таблице 16, подбирались исходя из выбранных объектов сравнения с учетом их технических и экономических особенностей разработки, создания и эксплуатации.

Для оценки конкурентных решений были выбраны следующие критерии:

1. Биосовместимость;
2. Механические свойства;
3. Биологическая безопасность;
4. Скорость расчета;

Таблица 16 – Оценочная карта для сравнения разработок

Факторные признаки (P _j)	Вес критерия, a _j	Баллы			Конкурентоспособность		
		b _П	b _{К1}	b _{К2}	К _П	К _{К1}	К _{К2}
Технические критерии оценки							
1. Биосовместимость	0,25	5	4	5	1,25	1	1,25
2. Механические свойства	0,25	5	3	5	1,25	0,75	1,25
3. Биологическая безопасность	0,25	5	4	5	1,25	1	1,25
4. Скорость расчета	0,25	5	3	2	1,25	0,75	0,5
Итого	1	20	14	17	6	3,5	4,25

На основе представленного выше анализа можно сделать вывод о том, что сплав Ti-Nb является более конкурентоспособным в отличии от сплавов Ti-6Al-4V и Ti-35Zr-7Nb-5Ta, так как они имеют ряд недостатков, таких как: низкая биологическая безопасность относительно Ti-Nb, более времязатратный теоретический расчет и т.д.

5.3 SWOT – анализ

SWOT – Strengths (сильные стороны), Weaknesses (слабые стороны), Opportunities (возможности) и Threats (угрозы) – представляет собой комплексный анализ научно-исследовательского проекта.

Сильные стороны – это факторы, которые характеризуют конкурентоспособную сторону научно-исследовательского проекта. Указывают на отличительное преимущество проекта или ресурсы, являющиеся особенными с точки зрения конкуренции.

Слабые стороны – это недостаток, упущение или ограниченность научно-исследовательского проекта, которые препятствуют достижению его целей.

Возможности включают в себя предпочтительную ситуацию в настоящем или будущем, возникающую в условиях окружающей среды проекта, например, тенденцию, изменение или предполагаемую потребность, которая поддерживает спрос на результаты проекта и позволяет руководству проекта улучшить свою конкурентную позицию.

Угроза – это любая нежелательная ситуация, тенденция или изменение в условиях окружающей среды проекта, которая имеет разрушительный или угрожающий характер для его конкурентоспособности в настоящем или будущем.

Таблица 17 – матрица SWOT-анализа

	<p>Сильные стороны проекта: С1. Высокая скорость исследования С2. Высокая точность исследования за счет простой структуры сплава С3. Простота расчетов относительно 3-х и более компонентных сплавов</p>	<p>Слабые стороны проекта: Сл1. Моделирование проводится при идеальных условиях, а значит при создании реального имплантата могут различаться механические характеристики Сл2. Длительный период клинических испытаний Сл3. Необходимость в наличии высоких вычислительных мощностей</p>
--	--	--

<p>Возможности: В1. Возможность прогнозировать механические свойства В2. Возможность индивидуального моделирования сплава под каждого пациента В3. Дальнейшее усовершенствование разработки</p>	<p>1. Высокоскоростное и экономичное исследование позволит повысить спрос у изготовителей имплантатов 2. Дальнейшее усовершенствование разработки не займет много ресурсов ввиду простоты сплава</p>	<p>1. Возможность использовать вычислительные ресурсы ВУЗов партнеров при отсутствии таковых в ТПУ 2. Персонально смоделированный сплав будет проходить клинические испытания меньшее количество времени чем обычный</p>
<p>Угрозы: У1. Отсутствие спроса на персональное моделирование имплантата У2. Риск отсутствия спроса на такие имплантаты ввиду уже имеющегося большого ассортимента готовых имплантатов под различные ситуации У3. Отсутствие вычислительного оборудования</p>	<p>1. Повышение спроса из-за более высокого качества имплантатов и их индивидуального моделирования под каждого пациента</p>	<p>1. Использование оборудования зарубежных партнеров для проведения вычислений</p>

В результате выполнения SWOT-анализа можно сделать вывод о том, что на данный момент преимущества разработанной пористой структуры значительно преобладают над её недостатками. Имеющиеся несовершенства возможно устранить, воспользовавшись перечисленными выше возможностями.

5.4 Планирование научно-исследовательских работ

5.4.1 Определение трудоемкости выполнения работ

Трудовые затраты в большинстве случаев образуют основную часть стоимости разработки, поэтому важным моментом является определение трудоемкости работ каждого из участников научного исследования.

Для определения ожидаемого (среднего) значения трудоемкости $t_{\text{ожи}}$ используем следующую формулу:

Для определения ожидаемого (среднего) значения трудоемкости $t_{\text{ожи}}$ используем следующую формулу:

$$t_{\text{ожи}} = \frac{3t_{\text{min } i} + 2t_{\text{max } i}}{5}$$

где $t_{\text{ожи}}$ – ожидаемая трудоемкость выполнения i -ой работы чел.-дн.;

$t_{\text{min } i}$ – минимально возможная трудоемкость выполнения заданной i -ой работы, чел.-дн.;

$t_{\text{max } i}$ – максимально возможная трудоемкость выполнения заданной i -ой работы, чел.-дн.

Проведем ожидаемый расчет трудоёмкости для научного руководителя:

$$t_{\text{ожи}} = \frac{3 \cdot 20 + 2 \cdot 35}{5} = 26 \text{ чел. – дн}$$

Для инженера:

$$t_{\text{ожи}} = \frac{3 \cdot 80 + 2 \cdot 120}{5} = 96 \text{ чел. – дн}$$

После проведения расчётов ожидаемой трудоёмкости работ, необходимо определить продолжительность каждой работы в рабочих днях T_{pi} , учитывая параллельность выполнения работ несколькими исполнителями, по следующей формуле:

$$T_{pi} = \frac{t_{\text{ожи}}}{\text{Ч}_i},$$

где T_{pi} – продолжительность одной работы, раб.дн; $t_{\text{ожи}}$ – ожидаемая трудоемкость выполнения одной работы, чел.-дн; Ч_i – численность

исполнителей, выполняющих одновременно одну и ту же работы на данном этапе, чел.

Длительность работ в календарных днях:

$$T_{Ki} = T_{pi} \cdot K_{\text{кал}},$$

где T_{Ki} – продолжительность выполнения i -й работы в календарных днях, T_{pi} – продолжительность выполнения i -й работы в рабочих днях, $K_{\text{кал}}$ – коэффициент календарности.

Коэффициент календарности вычисляется по следующей формуле:

$$K_{\text{кал}} = \frac{T_{\text{кал}}}{T_{\text{кал}} - T_{\text{вых}} - T_{\text{пр}}},$$

где $T_{\text{кал}}$ – количество календарных дней в году, $T_{\text{вых}}$ – количество выходных дней в году, $T_{\text{пр}}$ – количество праздничных дней в году.

Тогда коэффициент календарности соответственно равен:

$$K_{\text{кал}} = \frac{365}{365 - 52 - 14} = 1,22$$

Таблица 18 – Временные показатели проведения научного исследования

Название работы	Трудоемкость работ			Исполнители	Длительность работ в рабочих днях, T_{pi}	Длительность работ в календарных днях, T_{Ki}
	t_{min} , чел-дни	t_{max} , чел-дни	$t_{\text{ож}}$, чел-дни			
Выбор темы научного исследования	1	7	3	НР И	1 1	1 1
Составление плана работ	4	12	7	НР И	3 3	3 3
Литературный обзор	14	30	20	И	20	24
Моделирование	40	60	48	НР И	24 24	29 29
Расчеты равновесной геометрии	10	17	12	И	12	14

Расчет энергии формирования и когезии	7	15	10	И	10	12
Определение стабильной конфигурации	3	7	4	И	4	4
Расчет упругих постоянных	14	30	20	И	20	24
Расчет электронных свойств	7	14	9	И	9	10
Анализ полученных результатов	7	13	9	И	9	10
Составление ВКР	4	12	7	И НР	4 4	4 4
Итого					116	135

5.4.2 Разработка графика проведения научного исследования

Календарный план-график проведения НИОКР по теме представлен в таблице 19.

Таблица 19 – Календарный план-график проведения научного исследования

№ работ	Вид работ	Исполнители	Т _к , кал.д н.	Продолжительность выполнения работ													
				Февраль			Март			Апрель			Май				
				1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3		
1	Выбор темы научного исследования	НР И	1														

2	Составлен ие плана работ	НР И	3															
3	Литератур ный обзор	И	24															
4	Моделиро вание	НР И	29															
5	Расчеты равновесн ой геометрии	И	14															
6	Расчет энергии формиров ания и когезии	И	12															
7	Опреде ление стабильно й конфигур ации	И	4															
8	Расчет упругих постоянн ых	И	24															
9	Расчет электронн ых свойств	И	10															
10	Анализ полученн ых результат ов	И	10															

$$Z_{\text{ЗП}} = Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}},$$

где $Z_{\text{осн}}$ – основная заработная плата; $Z_{\text{доп}}$ – дополнительная заработная плата (12-20% от $Z_{\text{осн}}$).

$$Z_{\text{осн}} = Z_{\text{дн}} \cdot T_{\text{р}},$$

где $T_{\text{р}}$ – продолжительность работ, выполняемых научно-техническим работником; $Z_{\text{дн}}$ – среднедневная плата работника:

$$Z_{\text{дн}} = \frac{Z_{\text{м}} \cdot M}{F_{\text{д}}},$$

где $Z_{\text{м}}$ – месячный должностной оклад работника; M – количество месяцев работы без отпуска в течение года (при пятидневной неделе $M=11,2$); $F_{\text{д}}$ – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб.дн (таблица 21).

Таблица 21 – Баланс расчетного времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Инженер
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней		
- выходные дни	104	104
- праздничные дни	14	14
Потери рабочего времени		
- отпуск	29	29
- невыходы по болезни		
Действительный годовой фонд рабочего времени	218	218

Месячный должностной оклад работника:

$$Z_{\text{м}} = Z_{\text{тс}} \cdot (1 + k_{\text{пр}} + k_{\text{д}}) \cdot k_{\text{р}},$$

где $Z_{\text{тс}}$ – заработная плата по тарифной ставке, руб; $k_{\text{пр}}$ – премиальный коэффициент (равный 0,3); $k_{\text{д}}$ – коэффициент доплат и надбавок составляет примерно 0,2 – 0,5 (в НИИ и на промышленных предприятиях – за расширение сфер обслуживания, за профессиональное мастерство, за вредные условия: 15-20 % от $Z_{\text{тс}}$); $k_{\text{р}}$ – районный коэффициент, равный 1,3 (для Томска).

Расчет основной заработной платы приведен в Таблице 22.

Таблица 22 – Расчёт основной заработной платы

	З _б , руб.	k _{пр}	k _д	k _р	З _м , руб	З _{дн} , руб.	T _р , раб. дн.	З _{осн} , руб.
Руководитель (старший научный сотрудник)	26035	1,16	0	1,3	39260,78	2017	37	64544
Инженер	19200	0	0	1,3	24960	1282	116	148712
Итого:								213256

5.5.3 Дополнительная заработная плата исполнителей темы

Дополнительная заработная плата включает оплату за непроработанное время (очередной и учебный отпуск, выполнение государственных обязанностей, выплата вознаграждений за выслугу лет и т.п.).

$$Z_{\text{доп}} = K_{\text{доп}} \cdot Z_{\text{осн}}$$

где $Z_{\text{доп}}$ – дополнительная заработная плата, $Z_{\text{осн}}$ – основная заработная плата, $K_{\text{доп}}$ – коэффициент дополнительной заработной платы (на стадии проектирования принимаем равным 0,12).

Для руководителя:

$$Z_{\text{доп}} = 64544 \cdot 0,12 = 7745,3$$

Для инженера:

$$Z_{\text{доп}} = 148712 \cdot 0,12 = 17845,4$$

5.5.4 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)

В данной статье расходов отражаются обязательные отчисления по установленным законодательством Российской Федерации нормам органам государственного социального страхования (ФСС), пенсионного фонда (ПФ) и медицинского страхования (ФФОМС) от затрат на оплату труда работников.

Величина отчислений во внебюджетные фонды определяется исходя из следующей формулы:

$$Z_{\text{внеб}} = K_{\text{внеб}} \cdot (Z_{\text{осн}} + Z_{\text{доп}}),$$

где $K_{\text{внеб}}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды (пенсионный фонд, фонд обязательного медицинского страхования и пр.)

Отчисления во внебюджетные фонды представлены в табличной форме (Таблица 23).

Таблица 23 – Отчисления во внебюджетные фонды

Исполнитель	Основная заработная плата, руб.	Дополнительная заработная плата, руб.
Руководитель	64544	7745,3
Инженер	148712	17845,4
Коэффициент отчислений во внебюджетные фонды	0,3	
Итого:	70756,7	

5.5.5 Прочие прямые затраты

Здесь должны быть рассчитаны затраты на электроэнергию, потребляемую оборудованием. Стоимость одного кВт энергии в г. Томске составляет 5,9 руб./кВт*ч. Зная, что потребление электроэнергии у стационарного ПК и ноутбука составляет 39 Вт/ч и коэффициент использования мощности для ноутбука равен 0,65 имеем $39 \cdot 0,65 \cdot 928 = 23524,8$ Вт, $6,185 \cdot 5,9 = 138$ руб. для ноутбука. Суммарно – 138 руб. на электроэнергию.

5.5.6 Накладные расходы

Накладные расходы учитывают прочие затраты организации, не попавшие в предыдущие статьи расходов: печать и ксерокопирование материалов исследования, оплата услуг связи, электроэнергии, почтовые и телеграфные расходы, размножение материалов и т.д. Их величина определяется по следующей формуле:

$$Z_{\text{накл}} = \left(\text{сумма статей} \frac{1}{7} \right) \cdot K_{\text{нр}},$$

где $K_{нр}$ – коэффициент, учитывающий накладные расходы (величина коэффициента принимается равной 0,16).

$$Z_{накл} = (13900 + 213256 + 7745,3 + 17845,4 + 70756,7) \cdot 0,16 = 51760,5$$

5.5.7 Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта

Рассчитанная величина затрат научно-исследовательской работы (темы) является основой для формирования бюджета затрат проекта, который при формировании договора с заказчиком защищается научной организацией в качестве нижнего предела затрат на разработку научно-технической продукции.

Определение бюджета затрат на научно-исследовательский проект по каждому варианту исполнения приведен в Таблице 24.

Таблица 24 – Расчет бюджета затрат НИИ

Наименование статьи	Сумма, руб.
1. Затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных работ)	13900
2. Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	213256
3. Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы	25590,7
4. Отчисления во внебюджетные фонды	70756,7
5. Прочие прямые затраты	138
6. Накладные расходы	51760,5
Бюджет затрат НИИ	389177,9

5.6 Оценка эффективности проекта

Под экономической эффективностью научно-исследовательских и опытно-конструкторских работ понимается отношение эффекта, достигаемого

при реализации их результатов, к полным затратам на выполнение НИР и ОКР и подготовку к внедрению разработки в сферу производства.

Вероятностный характер результатов исследований, многообразие и недостаточная определенность возможных сфер их применения, значительный период времени, отделяющий появление новой идеи от материального воплощения в конкретное изделие, усложняют оценку экономической эффективности НИР и ОКР. Поэтому расчеты носят прогнозный характер и включают: технико-экономический анализ ожидаемых результатов НИР и ОКР, выбор базы для сравнения и приведения вариантов к сопоставимому виду (по времени, качеству, производительности, масштабам выпуска и т.д.); расчет предпроизводственных затрат и капитальных затрат на производственную реализацию в производстве исследований и выполненных на их основе разработок, расчет текущих затрат в сфере производства и эксплуатации, расчет и анализ показателей сравнительной экономической эффективности.

Основными расчетными показателями экономической эффективности НИР и ОКР служат: условно-годовая экономия $\mathcal{E}_{y.g.}$, годовой экономический эффект \mathcal{E}_g , расчетный коэффициент сравнительной экономической эффективности E_p и обратная его величина — срок окупаемости $T_{ок}$.

За базовую модель принимаем Ti-6Al-4V (таблица 25).

Таблица 25 – Смета затрат на Ti-6Al-4V.

Наименование статьи	Сумма, руб.
1. Материальные затраты	28638
2. Затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	359804
3. Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	50466

4.	Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы	215254
5.	Отчисления во внебюджетные фонды	31461
6.	Затраты на научные и производственные командировки	10524
7.	Накладные расходы	84174
8.	Прочие прямые затраты	1925
9.	Бюджет затрат НИИ	782246

Условно-годовая экономия от снижения текущих затрат рассчитывается как разность себестоимостей годового выпуска изделий по базовому S_1 и разработанному S_2 (модель) вариантам:

$$\mathcal{E}_{y.g} = S_2 - S_1 = 782246 - 389177,9 = 393068,1$$

Годовой экономический эффект представляет собой абсолютную величину суммарной экономии всех производственных ресурсов (живого труда, материалов, капитальных вложений), которую получает экономика в результате производства и использования новой техники. Рассчитывается годовой экономический эффект как разность приведенных затрат $R_{пр}$ по базовому и новому вариантам техники:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_r &= (S_2 + E_H K_2) \cdot N_2 - (S_1 + E_H K_1) \cdot N_2 \\ &= (782246 + 0,15 \cdot 359804) - (389177,9 + 0,15 \cdot 13900) \\ &= 444953,7 \end{aligned}$$

Показатель, обратный E_H , называется нормативным сроком окупаемости дополнительных капитальных вложений: $T_{ок.н} = 1/E_H = 6,66$. Он используется для оценки относительной эффективности НИР и ОКР. Нормативный срок окупаемости показывает, в течение какого максимально допустимого времени дополнительные капитальные затраты должны окупиться за счет экономии от снижения себестоимости. Новая техника является эффективной, если

расчетный срок окупаемости меньше нормативного или, в крайнем случае, равен ему:

$$T_{\text{ок}} \leq T_{\text{ок.н}}$$

Расчетный срок окупаемости для рассматриваемого варианта техники:

$$T_{\text{ок}} = \frac{\Delta K}{(S_1 - S_2)N_2} = \frac{359804 - 13900}{(782246 - 389177,9)} = 0,88$$

Новая техника является эффективной, так как расчетный срок окупаемости меньше нормативного ($0,88 < 6,66$).

Выводы по главе «Финансовый менеджмент ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

В ходе выполнения раздела «Финансовый менеджмент» был выполнен анализ конкурентоспособности. Проведён SWOT-анализ проекта, в ходе которого были выявлены потенциальные внутренние и внешние сильные и слабые стороны, возможности и угрозы. Из анализа выяснили, что потенциальных сильных сторон у проекта больше, чем слабостей, что свидетельствует о перспективности исследования. Сильными сторонами текущего проекта являются высокая скорость исследования, его высокая точность и простота расчетов относительно более сложных сплавов. К слабым сторонам можно отнести длительный период клинических испытаний и необходимость в наличии высоких вычислительных мощностей.

При планировании научно-исследовательской работы был произведен подсчет бюджета исследования. В процессе формирования бюджета были использованы группировки по затратам на спецоборудование (13900 руб.), затратам по основной заработной плате исполнителей тем (213256 руб.), затратам по дополнительной заработной плате (25590,7 руб.), отчислениям во внебюджетные фонды (70756,7 руб.) и накладным расходам (65536,5 руб.). Всего бюджет составил 475139,9 руб..

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В текущей работе была исследована зависимость механических свойств сплава Ti-Nb от концентрации Nb. Для этого было реализовано построение атомных конфигураций изучаемых структур Ti-xNb бета-типа и проведены расчёты структурных параметров. В ходе расчетов было установлено, что структурный параметр решетки увеличивается вместе с ростом концентрации Nb. Для определения стабильности сконструированных структур были рассчитаны энергии формирования и когезии в зависимости от концентрации Nb. Из полученных графиков видно, что с увеличением концентрации Nb структура становится более стабильной. Также с помощью проведения расчетов в программном пакете VASP были рассчитаны механические свойства сплава Ti-Nb такие, как модуль Юнга, сдвига, объемный модуль, коэффициент Пуассона и давление Коши. Из анализа рассчитанных механических свойств видно, что с увеличением концентрации Nb в сплаве, происходит снижение модулей сдвига и Юнга, а также увеличение давления Коши, что говорит об увеличении пластичности исследуемого материала. Также из исследования анизотропных свойств сплава Ti-Nb на примере расчета модуля Юнга для плоскостей (100), (110) и (111) определено, что с увеличением концентрации Nb сплав становится более изотропным. В программном пакете VESTA была визуализирована структура Ti-50Nb состоящая из 54-атомов. На ее основе был проведен анализ электронных свойств, а также межатомных связей. В ходе данного анализа было установлено, что замещение атомов Ti атомами Nb привело к образованию ковалентных связей между атомами Ti-Nb и Nb-Nb, но все же в большей степени материал имеет металлическую природу, а также увеличение количества ковалентных связей уменьшает сопротивление материала упругим деформациям, что и приводит к уменьшению модулей Юнга и сдвига, а также к увеличению значений давления Коши.

Исходя из всего вышесказанного можно сделать вывод о том, что увеличение концентрации Nb влечет за собой увеличение пластичности сплава

Ti-Nb и варьируя данный параметр, можно задавать механические свойства сплава. Также, было установлено, что концентрация Nb в 50% в сплаве Ti-Nb обладает лучшими физико-механическими свойствами среди исследованных концентраций (модуль Юнга составил 79,19 ГПа, модуль сдвига – 28,38 ГПа, давление Коши – 135,46 ГПа) и рекомендуется для дальнейших экспериментальных работ.

Список литературы

1. Экранирование стресса [Электронный ресурс].-URL: https://en.wikipedia.org/wiki/Stress_shielding
2. Hao Y. L. et al. Aging response of the Young's modulus and mechanical properties of Ti-29Nb-13Ta-4.6 Zr for biomedical applications //Metallurgical and Materials Transactions A. – 2003. – Т. 34. – №. 4. – С. 1007-1012.
3. Abdel-Hady M., Hinoshita K., Morinaga M. General approach to phase stability and elastic properties of β -type Ti-alloys using electronic parameters //Scripta Materialia. – 2006. – Т. 55. – №. 5. – С. 477-480.
4. Karre R., Niranjana M. K., Dey S. R. First principles theoretical investigations of low Young's modulus beta Ti-Nb and Ti-Nb-Zr alloys compositions for biomedical applications //Materials Science and Engineering: C. – 2015. – Т. 50. – С. 52-58. MLA
5. Geetha M. et al. Ti based biomaterials, the ultimate choice for orthopaedic implants—a review //Progress in materials science. – 2009. – Т. 54. – №. 3. – С. 397-425.
6. Седова Д. А., Хупшеев А. В., Гриб С. В. Перспективы развития низкомолекулярных биосовместимых металлических материалов //XVII международная научно-техническая Уральская школа-семинар металловедов-молодых ученых. Ч. 1.—Екатеринбург, 2016. – 2016. – Т. 1. – №. 17. – С. 342-346
7. Ерошенко А. Ю. и др. ВЛИЯНИЕ ДЛИТЕЛЬНОСТИ ТЕРМИЧЕСКОГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА МИКРОСТРУКТУРУ И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА УЛЬТРАМЕЛКОЗЕРНИСТЫХ БИОИНЕРТНЫХ СПЛАВОВ Zr– 1 мас.% Nb и Ti– 45 мас.% Nb //ИЗВЕСТИЯ ВЫСШИХ УЧЕБНЫХ ЗАВЕДЕНИЙ. – 2020. – Т. 63. – №. 11.
8. Введение в физику твердого тела: Учебное пособие по физике / Киттель Чарльз – М.: Книга по Требованию, 2012. – 789 с.
9. Структуры титановых сплавов [Электронный ресурс].-URL: <https://super-splav.ru/titanium-properties/struktura-titanovyh-splavov>
10. Проблемы и перспективы применения титановых сплавов в медицине М.Ю. Коллеров, В.С. Спектор, А.М. Мамонов, С.В. Скворцова, Д.Е. Гусев, Г.В. Гуртовая [Электронный ресурс].-URL: http://www.implants.ru/files/Science/articles_technology/38.pdf
11. Фазовые превращения в титановых сплавах [Электронный ресурс].-URL: <http://www.ticom-m.ru/O-titane-i-titanovyh-splavah/Fazovye-prevrascheniya-v-titanovyh-splavah>
12. Perdew J. P. et al. Density functional theory and its application to materials //Van Doren, V. – 2001. – С. 1-20.
13. Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple //Physical review letters. – 1996. – Т. 77. – №. 18. – С. 3865.

14. Heyd J., Scuseria G. E., Ernzerhof M. Hybrid functionals based on a screened Coulomb potential //The Journal of chemical physics. – 2003. – T. 118. – №. 18. – C. 8207-8215.
15. Moroni E. G. et al. Ultrasoft pseudopotentials applied to magnetic Fe, Co, and Ni: From atoms to solids //Physical Review B. – 1997. – T. 56. – №. 24. – C. 15629.
16. Groß A. Reactions at surfaces studied by ab initio dynamics calculations //Surface science reports. – 1998. – T. 32. – №. 8. – C. 291-340
17. Mittendorfer F., Hafner J. Hydrogenation of benzene on Ni (111) a DFT study //The Journal of Physical Chemistry B. – 2002. – T. 106. – №. 51. – C. 13299-13305.
18. Paier J. et al. Screened hybrid density functionals applied to solids //The Journal of chemical physics. – 2006. – T. 124. – №. 15. – C. 154709.
19. Gerber I. C., Angyán J. G. Hybrid functional with separated range //Chemical physics letters. – 2005. – T. 415. – №. 1-3. – C. 100-105.
20. Paier J. et al. The Perdew–Burke–Ernzerhof exchange-correlation functional applied to the G2-1 test set using a plane-wave basis set //The Journal of chemical physics. – 2005. – T. 122. – №. 23. – C. 234102.
21. Vanderbilt D. Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism //Physical review B. – 1990. – T. 41. – №. 11. – C. 7892.
22. Paier J., Marsman M., Kresse G. Why does the B3LYP hybrid functional fail for metals? //The Journal of chemical physics. – 2007. – T. 127. – №. 2. – C. 024103.
23. Car R., Parrinello M. Unified approach for molecular dynamics and density-functional theory //Physical review letters. – 1985. – T. 55. – №. 22. – C. 2471.
24. Arias T. A., Payne M. C., Joannopoulos J. D. Ab initio molecular-dynamics techniques extended to large-length-scale systems //Physical Review B. – 1992. – T. 45. – №. 4. – C. 1538.
25. Kresse, G.; Joubert, D. From Ultrasoft Pseudopotentials to the Projector Augmented-Wave Method. Phys. Rev. B: Condens. Matter Mater. Phys. 1999, 59, 1758–1775.
26. Perdew, J. P.; Burke, K.; Ernzerhof, M. Generalized Gradient Approximation Made Simple. Phys. Rev. Lett. 1996, 77, 3865–3868.
27. Monkhorst, H. J. & Pack, J. D. Special points for Brillouin-zone integrations. Phys. Rev. B 13, 5188 (1976).
28. K. Momma, F. Izumi VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data Journal of Applied Crystallography, 44 (2011), pp. 1272-1276.
29. W.G., Jacobs, F.M. Z. Kristallogr., —Crystal structure of beta-titanium". Burgers, , Kristallgeom., Kristallphys., Kristallchem. 94, 299 (1936).
30. A.van de Walle, P. Tiwary, M. de Jong, D.L. Olmsted, M. Asta, A. Dick, D. Shin, Y. Wang, L.-Q. Chen, Z.-K. Liu, Efficient stochastic generation of special quasirandom structures, Calphad Journal 42, pp. 13-18 (2013).

31. Wan X. et al. Structure stability and elastic properties of β type Ti-X (X= Nb, Mo) alloys from first-principles calculations //Rare Metal Materials and Engineering. – 2014. – Т. 43. – №. 3. – С. 553-558.
32. Tantardini C., Oganov A. R. Thermochemical electronegativities of the elements //Nature communications. – 2021. – Т. 12. – №. 1. – С. 1-9.
33. M.R. Leach, Tetrahedra of Structure, Bonding & Material Type. The Chemogenesis Web Book, 1999-2018
34. Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. От. 01.03.2022)
35. ГОСТ 12.2.032-78 «ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования.»
36. ГОСТ 12.0.003-2015 «Опасные и вредные производственные факторы и их классификация.»
37. СанПиН 2.2.4.548–96 «Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений.»
38. ГОСТ 12.1.003-2014 «ССБТ. Шум. Общие требования безопасности.»
39. СН 2.2.4/2.1.8.562–96. «Шум на рабочих местах, в помещениях жилых, общественных зданий и на территории застройки»
40. СП 52.13330.2016 «Естественное и искусственное освещение. Актуализированная редакция СНиП 23-05-95*»
41. ГОСТ 12.1.019-2017 «Система стандартов безопасности труда. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты.»
42. ГОСТ Р 54149-2010 «Нормы качества электрической энергии в системах электроснабжения общего назначения.»
43. Федеральный закон от 22.07.2008 N 123-ФЗ (ред. от 30.04.2021) "Технический регламент о требованиях пожарной безопасности"
44. СНиП 21-01-97* «Пожарная безопасность зданий и сооружений.»