Первопринципное моделирование физико-механических свойств сплава с эффектом памяти формы системы Ti-Nb

В ходе работы были получены результаты систематических исследований структурных и электронных свойств различных составов сплавов на основе β-Ti с помощью проведения расчётов в рамках теории функционала плотности (ТФП), реализованных в компьютерном коде VASP-4.6 Данные расчёта структурных параметров показали, что постоянная решетки сплавов Ti-Nb увеличивается почти линейно с увеличением содержания Nb. Исследования стабильности системы сплава Ti-Nb были проведены с помощью расчёта энергии формирования. Показано, что значения энергии формирования при 0 K, уменьшаются с увеличением концентрации Nb для бинарных сплавов Ti-Nb, подтверждая, что легирующие атомы Nb являются стабилизаторами β-фазы.