

## УПРУГИЕ СВОЙСТВА КРИСТАЛЛОВ БИОСОВМЕСТИМЫХ СПЛАВОВ НА ОСНОВЕ TiNi С ПАМЯТЬЮ ФОРМЫ

Муслов С.А.<sup>1</sup>, Сухочев П.Ю.<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Московский государственный медико-стоматологический университет им. А.И. Евдокимова  
Делегатская ул., 20/1, г. Москва, 127473, РФ; e-mail: muslov@mail.ru

<sup>2</sup> Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова  
Ленинские Горы, 1, г. Москва, 119192, РФ

Поступила в редакцию 02.06.2022. DOI: 10.29039/rusjbpс.2022.0491

**Аннотация.** Представлены собственные и литературные данные по характеристикам упругих свойств кристаллов биосовместимых сплавов на основе никелида титана (нитинола) TiNi с памятью формы, получивших широкое применение в науке, технике и медицине. Оценивали упругие постоянные  $c_{ij}$ , коэффициенты податливости  $s_{ij}$ , коэффициенты Пуассона  $\mu_{\min}$ ,  $\mu_{\max}$ ,  $\langle\mu\rangle$  и упругой анизотропии  $A$ , полученные опытным и расчетным путем. Численные значения исследованных параметров детально проанализированы с точки зрения описательной статистики. Для визуализации различий упругих характеристик применены диаграммы “box and whiskers” и диаграмма с областями. Знание упругих постоянных кристаллической решетки TiNi и сплавов на его основе позволило рассчитать значения макроскопических упругих модулей  $E$  и  $G$ , коэффициента Пуассона  $\mu$  и их ориентационную зависимость. На основании анализа данных сделан вывод о том, что низкий уровень упругих свойств сплавов на основе TiNi (нитинола) может быть использован, например, при разработке бионических протезов для медицины.

**Ключевые слова:** биосовместимые сверхэластичные сплавы с памятью формы, TiNi, упругие постоянные, коэффициент Пуассона, ауксетики.

### ВВЕДЕНИЕ

Биосовместимые сверхэластичные сплавы с памятью формы на основе никелида титана (нитинола) TiNi широко используются в науке, технике и медицине и сфера их применения продолжает расширяться. Своим необычным термомеханическим поведением эти сплавы обязаны фазовым превращениям мартенситного типа, которые протекают в них при изменении температуры или напряжения [1]. Мартенситные превращения являются сдвиговыми, поэтому изучение упругих постоянных кристаллической решетки сплавов весьма информативно и способно пролить свет на механизм и природу этих превращений. Кроме того, знание параметров упругости материалов с памятью важно при конструировании и изготовлении протезов, имплантов в реконструктивной хирургии, стентов, бионических “nitinol muscles” и других изделий для медицины и робототехники. Однако сведения об упругих постоянных TiNi и сплавов на его основе весьма противоречивы. Частично это связано с тем, что накануне точек переходов они малы и дополнительно уменьшаются (“размягчаются”), достигая к моменту перехода аномально низких значений. Кроме того, результаты измерений и расчетов разрознены, зависят от состава, вида термомеханической обработки сплавов, метода их измерения и расчета. Цель данной работы объединить в одном сообщении известные авторам данные об упругих характеристиках кристаллов TiNi и сплавов на его основе и проанализировать их различия.

### МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Коэффициенты податливости  $s_{ij}$  сплавов рассчитывали по известным формулам для кубических кристаллов [2]:

$$s_{11} = \frac{c_{11} + c_{12}}{(c_{11} + 2c_{12})(c_{11} - c_{12})}, s_{12} = \frac{-c_{12}}{(c_{11} + 2c_{12})(c_{11} - c_{12})}, s_{44} = \frac{1}{c_{44}} \quad (1)$$

Коэффициент Пуассона определяется соотношением  $\mu_{\text{х}} = -\varepsilon_{\text{у}} / \varepsilon_{\text{х}}$ , где  $\varepsilon_{\text{х}}$  и  $\varepsilon_{\text{у}}$  – соответственно упругие деформации в направлении нагружения  $x$  и поперечном направлении  $y$ . Для экстремальных значений коэффициентов Пуассона использовали соотношения [3]:

$$\mu_{\min} = \mu([110], [\bar{1}\bar{1}0]) = -\frac{2c_{11}c_{44} - (c_{11} - c_{12})(c_{11} + 2c_{12})}{2c_{11}c_{44} + (c_{11} - c_{12})(c_{11} + 2c_{12})}, \quad (2)$$

$$\mu_{\max} = \mu([110], [001]) = \frac{4c_{12}c_{44}}{2c_{11}c_{44} + (c_{11} - c_{12})(c_{11} + 2c_{12})}. \quad (3)$$

Как видно минимальные значения коэффициента Пуассона достигаются в системе  $([110], [\bar{1}\bar{1}0])$ , максимальные –  $([110], [001])$ . Первый индекс здесь определяет направление продольной деформации в кристаллах, второй – поперечной деформации. Средний коэффициент Пуассона  $\langle\mu\rangle$  кристаллов рассчитывали как определенный интеграл [4]:

$$\langle \mu \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi d\varphi \int_0^\pi \sin \theta \mu_p(\varphi, \theta) d\theta \quad (4)$$

где  $\mu_p(\varphi, \theta)$  – коэффициент Пуассона как функция от 2-х углов, усредненная по поперечным направлениям.

$$\mu_p(\varphi, \theta) = -\frac{A\Gamma_{12} + B(\Gamma_{44} - 2)}{16[C + D(2\Gamma_{12} + \Gamma_{44})]} \quad (5)$$

$$A = 2(53 + 4 \cos 2\theta + 7 \cos 4\theta + 8 \cos 4\varphi \sin^4 \theta), \quad (5a)$$

$$B = -11 + 4 \cos 2\theta + 7 \cos 4\theta + 8 \cos 4\varphi \sin^4 \theta, \quad (5б)$$

$$C = 9 \cos^4 \theta + 6 \sin^4 \theta + 2 \cos 4\varphi \sin^4 \theta, \quad (5в)$$

$$D = 2(\sin^2 2\theta + \sin^4 \theta \sin^2 2\varphi), \quad (5г)$$

$$\Gamma_{12} = \frac{s_{12}}{s_{11}}, \quad (5д)$$

$$\Gamma_{44} = \frac{s_{44}}{s_{11}}. \quad (5е)$$

Коэффициент упругой анизотропии определяли через отношение двух сдвиговых модулей:

$$A = \frac{c_{44}}{C'} \quad (6)$$

где  $c_{44}$  – мера сопротивления кристалла сдвигу в плоскости куба [100] вдоль любого направления  $\langle 0kl \rangle$ , лежащего в этой плоскости,  $C' = \frac{c_{11} - c_{12}}{2}$  – модуль сдвига в плоскости {110} в направлении  $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ .

Угловые зависимости макроскопических модулей Юнга  $E(\alpha)$  и сдвига  $G(\alpha)$  кристаллов определяли по формулам для кубической системы

$$E(\alpha) = \frac{1}{\frac{c_{11} + c_{12}}{(c_{11} - c_{12})(c_{11} + 2c_{12})} + \left(\frac{1}{c_{44}} - \frac{2}{c_{11} - c_{12}}\right)K(\alpha)}, \quad K(\alpha) = \frac{\sin^2(2\alpha)}{4} \quad (7)$$

и

$$G(\alpha) = \frac{1}{\frac{1}{c_{44}} + \left(\frac{2}{c_{11} - c_{12}} - \frac{1}{c_{44}}\right)M(\alpha)}, \quad M(\alpha) = \sin^2(\alpha) \quad (8)$$

а коэффициенты Пуассона вдоль направления [110]  $\mu_{21} = -\frac{s_{12}}{s_{11}}$ ,  $\mu_{31} = -\frac{s_{13}}{s_{11}}$  – по формулам

$$\mu_{21} = -(2s_{12} + s \cos^2 \theta) / (2s_{11} - s), \quad (9)$$

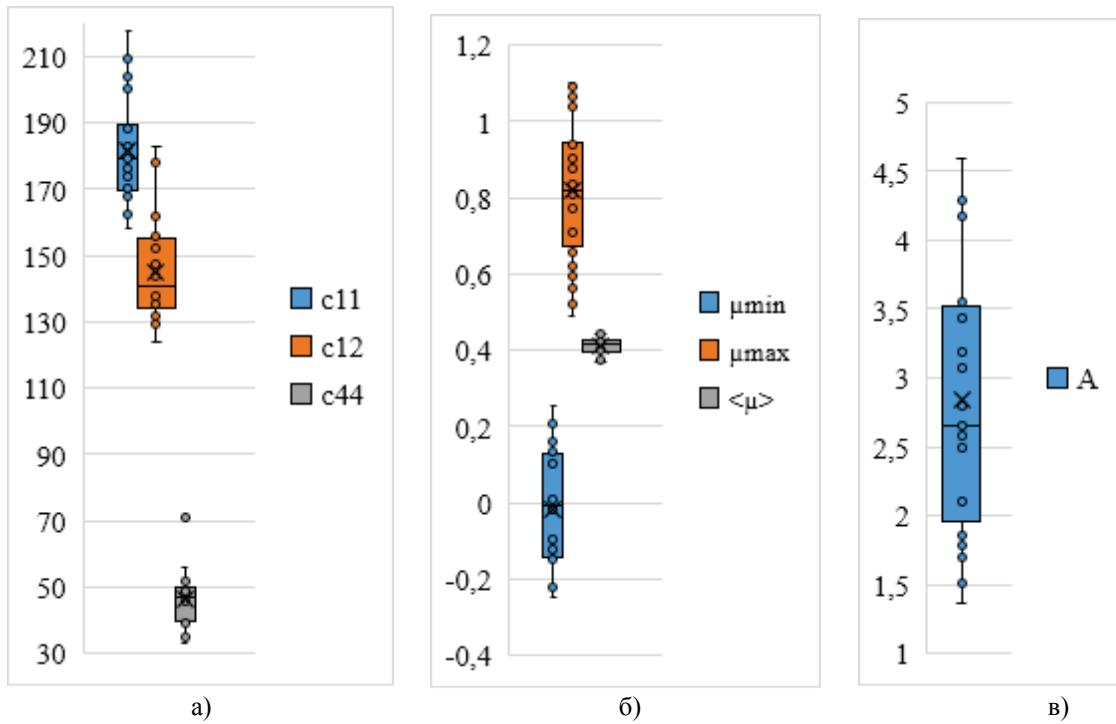
$$\mu_{31} = -(2s_{12} + s \sin^2 \theta) / (2s_{11} - s), \quad (10)$$

где  $\alpha$  и  $\theta$  – углы между произвольным направлением и соответствующими кристаллографическими осями, линейная комбинация коэффициентов податливости  $s = s_{11} + s_{12} - s_{44}/2$ , равная 0 для упругоизотропных кристаллов. [5]. Как известно, коэффициент Пуассона вдоль оси [100] и диагонали [111] куба не зависит от латерального направления и  $\mu_{21} = \mu_{31}$ .

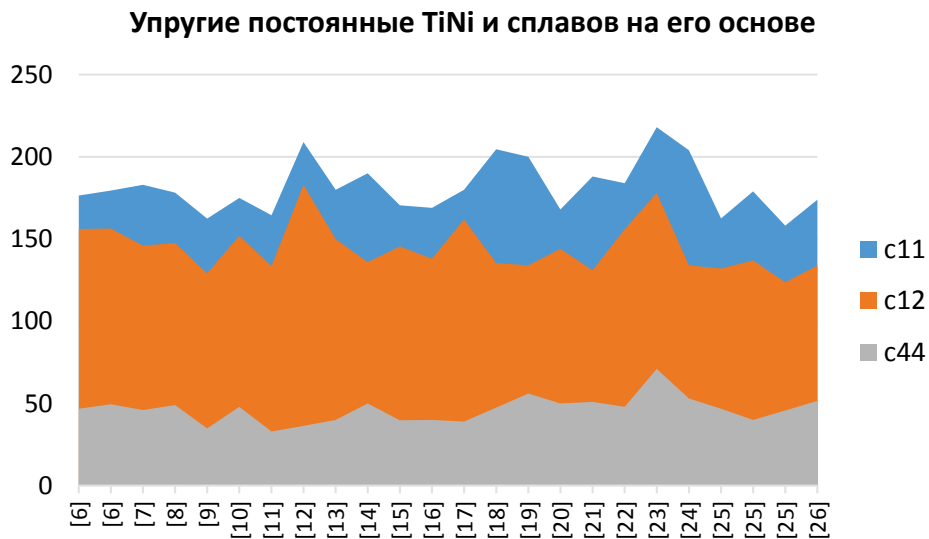
## РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Результаты расчета упругих постоянных, коэффициентов податливости, коэффициентов Пуассона и упругой анизотропии кристаллов сплавов на основе TiNi представлены на рисунках 1, 2 и в таблице 1. Упругие постоянные измерялись как правило высокочастотным и низкочастотным резонансным методами на монокристаллах различной ориентации, рассчитывались – исходя из “первых принципов”.

Согласно представленным опытным и расчетным данным минимальные значения упругих постоянных TiNi и сплавов на его основе составили: 158,18, 123,66 и 33 ГПа у  $c_{11}$ ,  $c_{12}$  и  $c_{44}$ , максимальные – 218, 183 и 71 ГПа, соответственно. Минимальные значения коэффициентов податливости  $s_{11}$ ,  $s_{12}$  и  $s_{44}$  равнялись 0,010, -0,017 и 0,014 ГПа-1, максимальные – 0,037, -0,004 и 0,030 ГПа-1, соответственно. Значения коэффициента Пуассона наблюдались в интервалах: от -0,25 до 0,26 у  $\mu_{\min}$ , 0,49 до 1,10 у  $\mu_{\max}$ , от 0,37 до 0,45 у  $\langle \mu \rangle$  (среднего значения), коэффициента упругой анизотропии – от 1,37 до 4,59. Средние значения составили: 181,58 ГПа ( $c_{11}$ ), 144,76 ГПа ( $c_{12}$ ), 46,37 ГПа ( $c_{44}$ ), 0,021 ГПа-1 ( $s_{11}$ ), -0,010 ГПа-1 ( $s_{12}$ ), 0,022 ГПа-1 ( $s_{44}$ ), -0,16 ( $\mu_{\min}$ ), 0,82 ( $\mu_{\max}$ ), 0,41 ( $\langle \mu \rangle$ )



**Рисунок 1.** Упругие постоянные  $c_{ij}$  (а), коэффициент Пуассона  $\mu$  (б) и коэффициент упругой анизотропии  $A$  (в) кристаллов сплавов на основе TiNi



**Рисунок 2.** Упругие постоянные  $c_{ij}$  кристаллов сплавов на основе TiNi

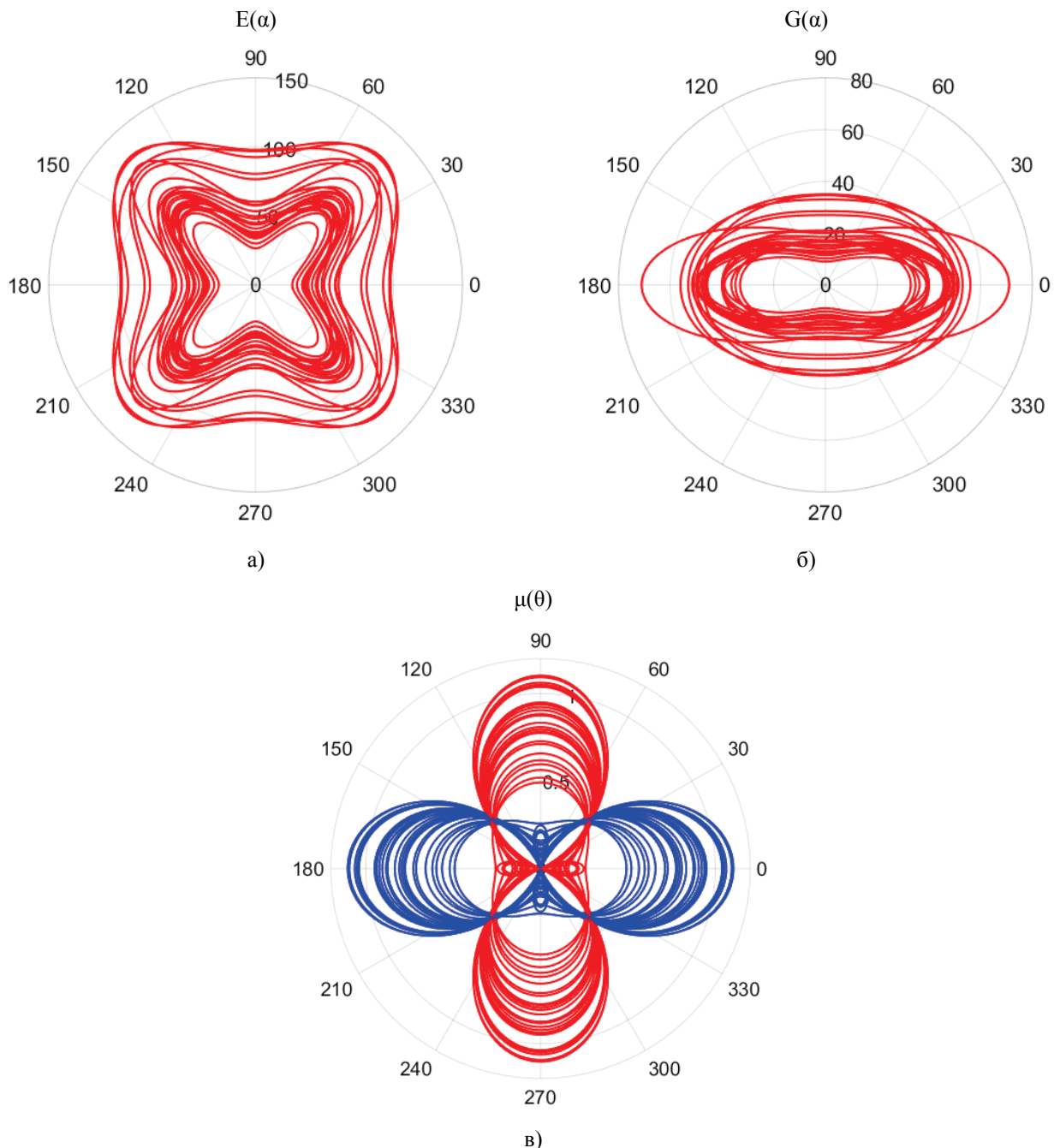
и 2,84 ( $A$ ). Коэффициент вариации ( $CV$ ) – 0,08 ( $c_{11}$ ), 0,10 ( $c_{12}$ ), 0,17 ( $c_{44}$ ), 9,82 ( $\mu_{min}$ ), 0,22 ( $\mu_{max}$ ), 0,05 ( $\langle\mu\rangle$ ) и 0,34 ( $A$ ). Как видно наименьший разброс данных наблюдался у расчетных значений среднего коэффициента Пуассона  $\langle\mu\rangle$  0,05 (5 %). Средний коэффициент вариации при измерениях и расчетах упругих постоянных оказался равным 0,12 (12 %), а  $CV(A)$  составил 0,34. Одно из значений ( $c_{44} = 71$  ГПа [23]) было квалифицировано при обработке данных как точка выброса (рис. 1а).

Дисперсия опытных данных оказалась выше, чем расчетных: стандартное отклонение ( $SD$ ) данных, полученных путем измерений равна 19,31 ГПа, путем теоретических расчетов – 11,99 ГПа.

**Таблица 1.** Упругие постоянные, коэффициенты подалливости, коэффициенты Пуассона и упругой анизотропии в кристаллах сплавов в TiNi и сплавах на его основе

$c_{11}$	$c_{12}$	$c_{44}$	$s_{11}$	$s_{12}$	$s_{44}$	$\mu_{\min}$	$\mu_{\max}$	$\langle\mu\rangle$	$s$	$A$	Метод	Сплав	Ссылка
ГПа			ГПа <sup>-1</sup>						ГПа <sup>-1</sup>				
176.5	156.1	46.8	0.033	-0.015	0.021	-0.25*	1.10	0.435	0.038	4.58	Расчет	NiTi	[6]
179.5	156.4	49.5	0.029	-0.013	0.020	-0.22	1.06	0.429	0.033	4.28	Расчет	NiTi	[6]
183	146	46	0.018	-0.008	0.021	0.02	0.78	0.41	0.016	2.48	Расчет	NiTi	[7]
178.2	147.6	49	0.022	-0.010	0.020	-0.09	0.91	0.415	0.022	3.20	Расчет	B2-NiTi	[8]
162.4	129.2	34.8	0.020	-0.009	0.028	0.11	0.71	0.416	0.016	2.09	Эксп.	NiTi	[9]
175	152	48	0.029	-0.013	0.020	-0.21	1.05	0.429	0.033	4.17	?	TiNi	[10]
164.5	133.5	33	0.022	-0.009	0.030	0.10	0.73	0.422	0.017	2.12	Эксп.	TiNi	[11]
209	183	36.4	0.026	-0.012	0.027	-0.01	0.88	0.443	0.025	2.8	Эксп.	Ti <sub>50</sub> Ni <sub>30</sub> Cu <sub>20</sub>	[12]
180	150	40	0.022	-0.010	0.025	0.00	0.83	0.424	0.021	2.66	Эксп.	Ti-Ni based alloys	[13]
190	136	50	0.013	-0.005	0.02	0.14	0.62	0.385	0.009	1.85	Расчет	NiTi	[14]
170.5	145.5	39.8	0.027	-0.012	0.025	-0.08	0.92	0.428	0.027	3.18	Расчет	NiTi	[15]
169	138	40	0.022	-0.01	0.025	0.01	0.81	0.417	0.020	2.58	Расчет	NiTi	[16]
180	162	39	0.037	-0.017	0.025	-0.21	1.09	0.445	0.043	4.33	Расчет	NiTi	[17]
204.64	135.36	47.52	0.010	-0.004	0.021	0.26	0.49	0.379	0.004	1.37	Расчет	Ni-Ti	[18]
200	134	56	0.010	-0.004	0.017	0.16	0.56	0.37	0.006	1.70	Расчет	TiNi	[19]
168	144	50	0.028	-0.013	0.02	-0.21	1.04	0.422	0.032	4.17	Расчет	TiNi	[20]
188	131	51	0.012	-0.005	0.019	0.14	0.60	0.378	0.008	1.79	Расчет	NiTi	[21]
184	156	48	0.024	-0.011	0.020	-0.12	0.95	0.421	0.025	3.43	Расчет	NiTi	[22]
218	178	71	0.017	-0.007	0.014	-0.15	0.94	0.41	0.018	3.55	Расчет	NiTi	[23]
204	134	53	0.010	-0.004	0.018	0.21	0.52	0.376	0.005	1.51	Расчет	(TiZr)Ni	[24]
162.57	132.04	46.83	0.022618	-0.01014	0.021	-0.08	0.88	0.409	0.022	3.07	Расчет	NiTi	[25]
158.18	123.66	45.69	0.020135	-0.00883	0.021	-0.02	0.79	0.399	0.011	2.65	Расчет	NiTi(Cu)	[25]
173.95	133.9	51.54	0.017396	-0.00757	0.019	-0.01	0.77	0.395	0.018	2.57	Расчет	NiTi(Fe)	[25]
179	137	40	0.016609	-0.0072	0.025	0.14	0.66	0.406	0.015	1.90	Расчет	NiTi	[26]

Красным шрифтом выделены значения  $\mu_{\min} < 0$ .



**Рисунок 3.** Сечения характеристических поверхностей упругих модулей  $E$  (а),  $G$  (б) и коэффициентов Пуассона  $\mu_1(\theta)$  (красные линии) и  $\mu_{31}(\theta)$  (синие линии)

Как видно из таблицы 1 и рисунка 1б часть минимальных значения коэффициента Пуассона сплавов меньше нуля  $\mu_{\min} < 0$ . Известно, что такие материалы (с отрицательным коэффициентом Пуассона) называются ауксетиками. Более подробный анализ показал, что по ряду данных кристаллы TiNi и сплавов на его основе относятся к так называемым частичным ауксетикам, то есть  $\mu$  может принимать положительные или отрицательные значения в зависимости от ориентации  $x, y$  [27]. В этом случае знаки неравенств  $s_{12} < 0, s = s_{11} + s_{12} - s_{44}/2 > 0$  или  $s_{12} > 0, s = s_{11} + s_{12} - s_{44}/2 < 0$  противоположны. Для всех исследованных в данной работе сплавов  $s_{12} < 0$ , а  $s > 0$ . Напомним, что полными ауксетиками являются кристаллы, которые обладают отрицательными значениями коэффициента Пуассона при любой ориентации.

Знание упругих постоянных кристаллической решетки TiNi и сплавов на его основе позволяет рассчитать значения макроскопических упругих модулей – модуля Юнга  $E$  и сдвига  $G$  и их ориентационную зависимость. Результаты расчета представлены на рис. 3. Также на нем отображена угловая зависимость коэффициента Пуассона. Как отмечалось, экстремумы коэффициента Пуассона в кубических кристаллах могут проявляться при деформации вдоль направлений [100], [110] и [111], а ориентационная зависимость имеет место только для случая [110] [5].

Видно, что зависимости  $E(\alpha)$  и  $G(\alpha)$  исследованных сплавов представляют собой близкие к конгруэнтным замкнутые линии с центром в начале координат. За счет разницы в величине упругих постоянных ( $CV = 0,12$ ) и

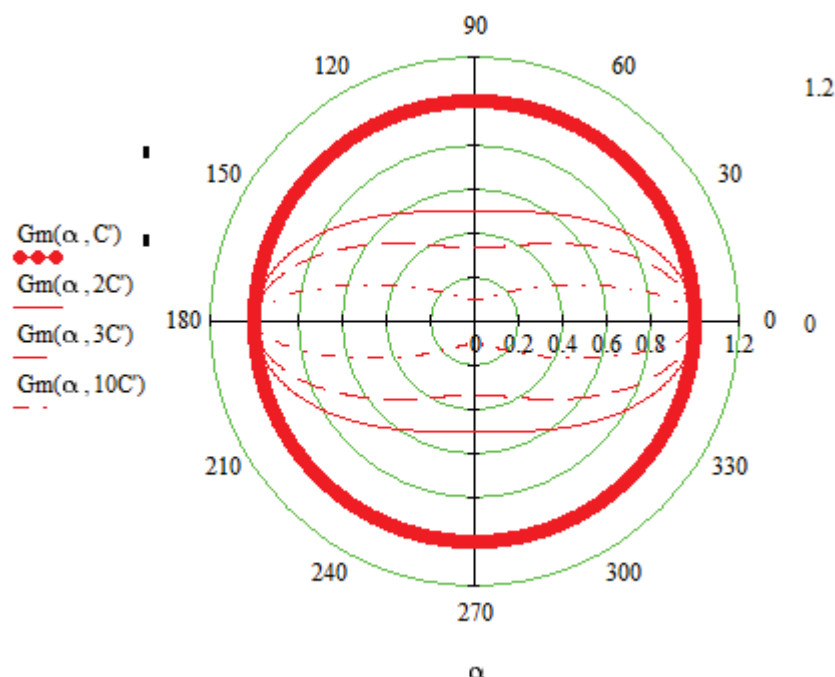


Рисунок 4. Эволюция нормированной функции  $Gm(\alpha)$  при росте упругой анизотропии кубической решетки

коэффициента анизотропии ( $CV = 0,34$ ) форма кривых несколько отличается друг от друга. Поверхность, радиус-векторы которой прямо пропорциональны модулю Юнга, имеет форму куба со скругленными углами и углублениями в центре граней, что характерно для кубических кристаллов при  $s > 0$  [2]. Наибольшее значение модуля Юнга соответствует направлениям  $\langle 111 \rangle$ , наименьшее – направлениям  $\langle 100 \rangle$  (рис. 1а). В этом направлении модуль Юнга нитиноловых сплавов ближе по величине к биологическим (костным) тканям организма человека, чем к металлам. В сечении (110) наименьшему значению модуля сдвига соответствует направление в кристалле вдоль диагонали грани куба  $\langle \bar{1}10 \rangle$  ( $C'$ ), наибольшему – ребро куба  $\langle 001 \rangle$  ( $c_{44}$ ) (рис. 3б).

Форму сечений характеристической поверхности модуля сдвига можно исследовать детальнее, если представить формулу (8) в виде

$$G(\alpha) = \left[ \frac{1}{c_{44}} + \left( \frac{1}{C'} - \frac{1}{c_{44}} \right) \cdot \sin^2(\alpha) \right]^{-1} = \left[ \frac{1}{c_{44}} + \left( \frac{c_{44} - C'}{C' \cdot c_{44}} \right) \cdot \sin^2(\alpha) \right]^{-1} = \frac{c_{44}}{1 + \left( \frac{c_{44} - C'}{C'} \right) \cdot \sin^2(\alpha)} = \frac{c_{44}}{1 + \left( \frac{c_{44}}{C'} - 1 \right) \cdot \sin^2(\alpha)}. \quad (9)$$

Как отмечалось выше сдвиговые модули играют основную роль в потере устойчивости кристаллической решетки к фазовым структурным превращениям. Для удобства визуализации введем новую функцию  $Gm(\alpha)$  на основе  $G(\alpha)$ , но без влияния на масштаб параметра  $c_{44}$ :

$$Gm(\alpha) = \frac{G(\alpha)}{c_{44}} = \frac{1}{1 + \left( \frac{c_{44}}{C'} - 1 \right) \cdot \sin^2(\alpha)} = \frac{1}{1 + (A - 1) \cdot \sin^2(\alpha)}. \quad (10)$$

Её график представлен на рисунке 4.

Из рисунка следует, что в полярной системе координат с плавным ростом параметра  $c_{44}$  и, соответственно анизотропии  $A$ , график функции (10), характеризующей модуль сдвига, изменяет форму от окружности (при  $c_{44} = C'$ ,  $A = 1$ ) до вытянутой узкой фигуры со впадинами по центру с ординатой  $C'$  и полушириной 1.

## ВЫВОДЫ

1. Средние значения характеристик упругих свойств TiNi и сплавов на его основе составили 181,58 ГПа ( $c_{11}$ ), 144,76 ГПа ( $c_{12}$ ), 46,37 ГПа ( $c_{44}$ ), 0,021 ГПа<sup>-1</sup> ( $s_{11}$ ), -0,010 ГПа<sup>-1</sup> ( $s_{12}$ ), 0,022 ГПа<sup>-1</sup> ( $s_{44}$ ), -0,16 ( $\mu_{\min}$ ), 0,82 ( $\mu_{\max}$ ), 0,41 ( $\langle \mu \rangle$ ) и 2,84 ( $A$ ), соответственно.

2. Коэффициент вариации данных равен 0,08 ( $c_{11}$ ), 0,10 ( $c_{12}$ ), 0,17 ( $c_{44}$ ), 9,82 ( $\mu_{\min}$ ), 0,22 ( $\mu_{\max}$ ), 0,05 ( $\langle \mu \rangle$ ) и 0,34 ( $A$ ), соответственно. Средний коэффициент вариации данных измерений и расчетов упругих постоянных составил 0,12 (12 %).

3. Дисперсия опытных данных выше, чем расчетных: стандартное отклонение данных, полученных путем измерений равно 19,31 ГПа, теоретических результатов – 11,99 ГПа, что почти в два раза меньше.
4. Установлено, что кристаллы TiNi и сплавов на его основе могут относиться к частичным ауксетикам.
5. Зависимости  $E(\alpha)$  и  $G(\alpha)$  исследованных сплавов представляют собой замкнутые линии с центром в начале координат, несколько отличающиеся друг от друга по форме за счет разницы в величине упругих постоянных и коэффициента анизотропии по разным данным.
6. Низкий уровень упругих свойств сплавов на основе TiNi (нитинола) может быть использован при разработке бионических протезов для медицины.

#### Список литературы / References

1. Муслев С.А. *Предмартенситные состояния в монокристаллах сплавов TiNi-TiFe и TiNi-TiCu: (01.04.07)*. Дисс. ... канд. физ.-мат. наук. Том. гос. ун-т им. В.В. Куйбышева, 1987, 166 с. [Muslov S.A. *Pre-martensitic states in single crystals of TiNi-TiFe and TiNi-TiCu alloys: (01.04.07)*. Diss. ... Candidate of Physical and Mathematical Sciences. Tomsk State University named after V.V. Kuibyshev, 1987, 166 p. (In Russ.)]
2. Nye J.F. *Physical Properties of Crystals: Their Representation by Tensors and Matrices*. Clarendon Press, 1985, 329 p.
3. Муслев С.А., Лотков А.И., Арутюнов С.Д. Экстремумы упругих свойств кубических кристаллов. *Известия ВУЗов. Серия Физика*, 2019, т. 62, № 8 (740), с. 102-111. [Muslov S.A., Lotkov A.I., Arutyunov S.D. Extremes of elastic properties of cubic crystals. *Izvestiya VUZov. Seriya Fizika*, 2019, vol. 62, no. 8 (740), pp. 102-111. (In Russ.)]
4. Wojciechowski K.W. Poisson's ratio of anisotropic system. *Computational methods in science and technology*, 2005, vol. 11, no. 1, pp. 73-79.
5. Муслев С.А., Лотков А.И., Тимкин В.Н. Коэффициент Пуассона TiNi. *Перспективные материалы*, 2021, № 12, с. 5-20. [Muslov S.A., Lotkov A.I., Timkin V.N. The Poisson's Ratio is TiNi. *Perspektivnyye materialy*, 2021, no. 12, pp. 5-20. (In Russ.)]
6. Wang X.F. et al. Extreme Poisson's ratios and their electronic origin in B2 CsCl-type AB intermetallic compounds. *Physical review B*, 2012, vol. 85, 134108.
7. Hatcher N., Kontsevoi O.Y., Freeman A.J. Martensitic transformation path of NiTi. *Phys. Rev. B*, 2009, vol. 80, 144203.
8. Bihlmayer G., Eibler R., Neckel A. Elastic properties of B2-NiTi and B2-PdTi. *Phys. Rev. B*, 1994, vol. 50, 13113.
9. Mercier O., Melton K.N., Gremaud G., Hagi J. Single-crystal elastic constants of the equiatomic NiTi alloy near the martensitic transformation. *J. Appl. Phys.*, 1980, vol. 51, 1833.
10. Gaillac R., Coudert F.-X. *Elastic tensor analysis*. Электронный ресурс. URL: <http://progs.coudert.name/elate/mp?query=mp-571>.
11. Кузнецов А.В., Муслев С.А., Лотков А.И., Хачин В.Н., Гришков В.Н., Пушкин В. Г. Упругие постоянные TiNi вблизи мартенситных превращений. *Известия вузов. Серия Физика*, 1987, № 7, с. 98-99. [Kuznetsov A.V., Muslov S.A., Lotkov A.I., Khachin V.N., Grishkov V.N., Pushin V.G. TiNi elastic constants near martensitic transformations. *Izvestiya VUZov. Seriya Fizika*, 1987, no. 7, pp. 98-99. (In Russ.)]
12. Ren X., Taniwaki K., Otsuka K., Suzuki T., Tanaka K., Chumlyakov Yu.I. Elastic constants of Ti<sub>50</sub>Ni<sub>30</sub>Cu<sub>20</sub> alloy prior to martensitic transformation. *Philosophical Magazine A*, 1999, vol. 79, no. 1, pp. 31-41.
13. Ren X., Miura N., Zhang J. Otsuka K., Tanaka K., Koiwa M., Suzuki T., Chumlyakov Yu.I. A comparative study of elastic constants of Ti-Ni-based alloys prior to martensitic transformation. *Mat. Sci. Eng. A*, 2001, vol. 312, pp. 196-206.
14. Sestak P. et al. *The elastic constants of austenitic and martensitic phases of NiTi shape memory alloy*. Pp. 120-124.
15. Zengetal Z.-Y. First-principles determination of the structure, elastic constant, phase diagram and thermodynamics of NiTi alloy. *Physica B*, 2010, vol. 405, pp. 3665-3672.
16. Wagner M.F.-X., Windl W. Lattice stability, elastic constants and macroscopic moduli of NiTi martensites from first principles. *Acta Mater*, 2008, vol. 56, pp. 6232-6245.
17. Huang X., Bungaro C., Godlevsky V., Rabe K.M. Lattice instabilities of cubic NiTi from first principles. *Phys.Rev. B*, 2001, vol. 65, 014108.
18. Lai W.S., Liu B.X. Lattice stability of some Ni-Ti alloy phases versus their chemical composition and disordering. *J. Phys.: Condens. Matter*, 2000, vol. 12, no. L53.
19. Lu J.-M., Hu Q.-M., Yang R. Composition-dependent elastic properties and electronic structures of off-stoichiometric TiNi from first-principles calculations. *Acta Mater*, 2008, vol. 56, no. 4913.
20. Ye Y.Y., Chan C.T., Ho K.M. Structural and electronic properties of the martensitic alloys TiNi, TiPd, and TiPt. *Phys.Rev. B*, 1997, vol. 56, no. 3678.
21. Fang Yu et al. First-Principles Calculations of Structural, Mechanical, and Electronic Properties of the B2-Phase NiTi Shape-Memory Alloy Under High Pressure. *Computation*, 2019, vol. 7, no. 57.
22. Haskins J.B., Lawson J.W. Finite temperature properties of NiTi from first principles simulations: Structure, mechanics, and thermodynamics. *J. Appl. Phys.*, 2017, vol. 121, 205103.

23. Cheng D.Y., Zhao S.J., Wang S.Q., Ye H.Q. First-principles study of the elastic properties and electronic structure of NiTi, CoTi and FeTi. *Philos. Mag. A*, 2001, vol. 81, pp. 1625-1632.
24. Hu Q.M., Yang R., Lu J.M., Wang L., Johansson B., Vitos L. Effect of Zr on the properties of (TiZr)Ni alloys from first-principles calculations. *Phys. Rev. B*, 2007, vol. 76, 224201.
25. Yin J.Y. et al. Micromechanism of Cu and Fe alloying process on the martensitic phase transformation of NiTi-based alloys. *Journal of Structural Chemistry*, 2015, vol. 56, no. 6, pp. 1051-1057.
26. Tan C.L., Tian X.H., Cai W. *Phys. B* (Amsterdam, Neth.), 2009, vol. 404, pp. 3662-3665.
27. Епишин А.И., Лисовенко Д.С. Экстремальные значения коэффициента Пуассона кубических кристаллов. *Журнал технической физики*, 2016, т. 86, вып. 10, с. 74-82. [Epishin A.I., Lisovenko D.S. Extreme values of the Poisson's ratio of cubic crystals. *Journal of Technical Physics*, 2016, vol. 86, iss. 10, pp. 74-82. (In Russ.)]

## ELASTIC PROPERTIES OF CRYSTALS OF BIOCOMPATIBLE TINI-BASED ALLOYS WITH SHAPE MEMORY

Muslov S.A.<sup>1</sup>, Sukhochev P.Yu.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Moscow State Medical University named after A.I. Evdokimov  
*Delegatskaya str., 20/1, Moscow, 127473, Russia; e-mail: muslov@mail.ru*

<sup>2</sup>Lomonosov Moscow State University  
*Leninskie Gory microdistrict, 1, Moscow, 119192, Russia*  
Received 02.06.2022. DOI: 10.29039/rusjbpс.2022.0491

**Abstract.** The authors present their own and literature data on the characteristics of elastic properties of crystals of biocompatible alloys based on titanium nickelide (nitinol) TiNi with shape memory, which have been widely used in science, technology and medicine. Elastic constants  $c_{ij}$ , malleability coefficients  $s_{ij}$ , Poisson coefficients  $\mu_{\min}$ ,  $\mu_{\max}$ ,  $\langle\mu\rangle$  and elastic anisotropy  $A$ , obtained experimentally and computationally, were evaluated. The numerical values of the studied parameters are analyzed in detail from the point of view of descriptive statistics. To visualize the differences in elastic characteristics, “box and whiskers” diagrams and a diagram with areas are used. Knowledge of the elastic constants of the TiNi crystal lattice and alloys based on it made it possible to calculate the values of macroscopic elastic modules  $E$  and  $G$ , the Poisson's ratio  $\mu$  and their orientation dependence. Based on the data analysis, it is concluded that the low level of elastic properties of TiNi (nitinol) based alloys can be used, for example, in the development of bionic prostheses for medicine.

**Key words:** *biocompatible superelastic shape memory alloys, TiNi, elastic constants, Poisson's ratio, auxetics.*