

УДК 538.9

DOI: 10.33184/bulletin-bsu-2023.4.6

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ КОРРОЗИИ В БИОДЕГРАДИРУЕМЫХ СПЛАВАХ Zn-1%Ag-Cu И Zn-4%Ag-Cu

© В. А. Брызгалов<sup>1,2\*</sup>, А. А. Кистанов<sup>1</sup>, Е. А. Корзникова<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Уфимский университет науки и технологий  
Россия, Республика Башкортостан, 450076 г. Уфа, ул. Заки Валиди, 32.

<sup>2</sup>Институт проблем сверхпластичности металлов РАН  
Россия, Республика Башкортостан, 450001 г. Уфа, ул. Степана Халтурина, 39.

\*Email: bryzgalovv2000@gmail.com

*Коррозионные свойства имеют решающее значение для биodeградируемых сплавов. Наиболее востребованными в данный момент являются сплавы на основе Zn, легированные такими элементами, как Ag и Cu. Так как устойчивость к коррозии обычно оценивают только при помощи расчета потери массы и скорости коррозии, важно оценить процессы, происходящие на поверхности сплава на атомном уровне, в частности адсорбцию и искажение решетки. Для этого был использован подход, основанный на теории функционала плотности (ТФП), который является эффективным инструментом для изучения структуры сплава и процессов, происходящих на его поверхности. Был изучен сплав Zn-n%Ag-Cu (n = 1, n = 4), в частности были описаны аспекты асимметрии при добавлении в сплав атомов Ag, а также была описана адсорбция молекулы O<sub>2</sub> на поверхности сплава. Данная работа представляет собой исследование, проливающее свет на коррозионные характеристики сплавов Zn-Ag-Cu, предоставляющее важные знания о механизмах коррозии цинковых сплавов, что полезно для разработки биоразлагаемых имплантатов с улучшенной структурой и характеристиками.*

**Ключевые слова:** биodeградируемые сплавы, теория функционала плотности, адсорбция, коррозия сплавов, искажение решетки.

### Введение

Коррозионные свойства имеют решающее значение для всех конструкционных материалов, но в особенности эти свойства важны для биodeградируемых сплавов [1]. Крайне важно оценить коррозионные свойства этих материалов, чтобы убедиться, что они соответствуют необходимым стандартам для медицинского применения. В настоящее время в медицинской сфере наблюдается заметный акцент на проблеме повреждения костей и мягких тканей, что привело к увеличению спроса на биосовместимые материалы, которые являются нетоксичными при длительном воздействии на организм человека [1–4]. Цинк зарекомендовал себя как материал, имеющий практически идеальные коррозионные свойства для использования в биodeградируемых сплавах [5]. Вместе с этим, существенным недостатком чистого цинка является его низкий предел прочности (<50 МПа). Для улучшения механических свойств цинка применяют интенсивную пластическую деформацию и легирование [6]. Цинковые сплавы с добавлением серебра и меди имеют хорошие антибактериальные и антимикробные свойства, что делает их перспективными материалами для создания имплантатов мочевых стентов [7–8].

Устойчивость к коррозии обычно оценивают экспериментально при помощи оценки потери массы и расчета скорости коррозии. Однако данные методы не позволяют выявить природу факторов, которые приводят к изменению скорости деградации. Известно, что при коррозии происходят процессы адсорбции, которые изменяют симметрию решетки. Подход, основанный на теории функционала плотности (ТФП), является эффективным инструментом для прогнозирования структуры и характеристик материалов, а также процессов, происходящих на их поверхности, в частности процесса адсорбции, а соответствие данного метода с экспериментальными данными является ключевым фактором его эффективности. Использование ТФП позволяет оценить отклонение от идеального состояния решетки, вычислить энергию адсорбции, а также оценить искажение ее симметричной структуры на атомном уровне. Методы на основе ТФП, а также различные их комбинации [9] используются для изучения и предсказания свойств сплавов [10], изучения 2D материалов [11–14]. Также ТФП моделирование используется для изучения процессов, происходящих на поверхности материалов, включая адсорбцию различных веществ на них и связанные с этим процессы [15]. В [16] было исследовано влияние ионов хлора на коррозионные процессы, происходящие на поверхности стали в бетоне. В [17] проанализировано воздействие малых молекул на поверхность арсенена, а также способы защиты материала от коррозии. Также были исследованы производные хиназолина для защиты мягкой стали от соляной кислоты [15].

Изучены аспекты асимметрии кристаллической структуры сплава Zn-n%Ag-1%Cu (n = 1, n = 4), обусловленной атомами серебра, и ее влияние на деградацию поверхности. Сравнение экспериментальных данных по коррозионной стойкости сплавов Zn-n%Ag-1%Cu (n = 1, n = 4) и интерметаллической фазы Zn<sub>3</sub>Ag с

результатами, полученными методом ТФП-моделирования, позволяет получить доступ как к характеристикам коррозии, так и к атомным механизмам, связанным с деформациями решетки.

### Материалы и методика

Исследуемые материалы представляли собой сплав цинка системы Zn-1%Ag-1%Cu и Zn-4%-1%Cu. Химический состав был получен при помощи рентгенофлуоресцентного спектрометра ARL Optim'X (табл. 1) [18].

Таблица 1

| Сплав        | Химический состав сплава, % |       |        |
|--------------|-----------------------------|-------|--------|
|              | Zn                          | Ag    | Cu     |
| Zn-1%Ag-1%Cu | 95.93%                      | 1.05% | 0.758% |
| Zn-4%Ag-1%Cu | 92.68%                      | 4.08% | 1.06%  |

### Детали моделирования

Расчеты проводились с использованием пакета Vienna Ab Initio Simulation Package (VASP) [19]. Использовалось обобщенное градиентное приближение, параметризованное обменно-корреляционным функционалом Пердю-Берка-Эрнцгергофа [20]. Все модели структур были построены с использованием программного обеспечения VESTA. Наиболее стабильное электронное состояние для всех рассмотренных структур было найдено путем оптимизации геометрии. Использовались периодические граничные условия. Было использовано значение энергии обрезки 520 эВ. Допуски сходимости по энергии и силе составляли  $1 \times 10^{-4}$  эВ/атом и 0.001 эВ/Å соответственно. Интеграции зоны Бриллюэна были отобраны с помощью центрированной сетки k-точки  $30 \times 30 \times 20$  для объемного Zn. Для отбора проб зоны Бриллюэна использовалась сетка k-точек, где количество k-точек (NK) выбиралось таким, чтобы  $NK \times L$  равнялось  $\sim 30-40$  Å, где L – постоянная решетки [21]. Оптимизированная структура элементарной ячейки Zn (рис. 1а) принадлежит пространственной группе P63/mmc и имеет параметры решетки  $a = 2.610$  Å,  $b = 2.610$  Å и  $c = 4.869$  Å.

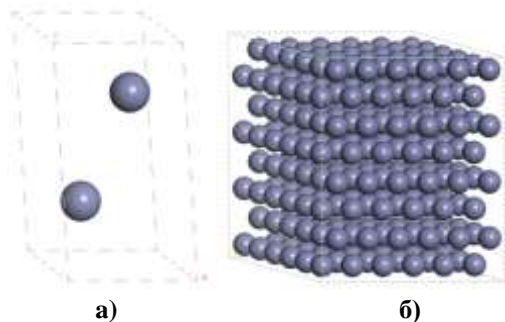


Рис. 1. Модели: а) элементарной ячейки Zn, б) 6x6x4 ячейки Zn.

Структура элементарной ячейки Zn была расширена до ячейки 6x6x4 (рис. 1б) для последующего создания моделей поверхности Zn. Использовались три модели: Zn (100), Zn (110) и Zn (111), как показано на рис. 2 (а-в). Интеграция зоны Бриллюэна для моделей поверхностей была произведена с использованием сетки k-точек с центрированием  $1 \times 1 \times 1$ . Все модели пластин имеют 6 атомных слоев и размер вакуума 20 Å, чтобы избежать взаимодействия с периодическим слоем. Верхние слои атомов могли свободно перемещаться, а два нижних слоя были зафиксированы для имитации объема.

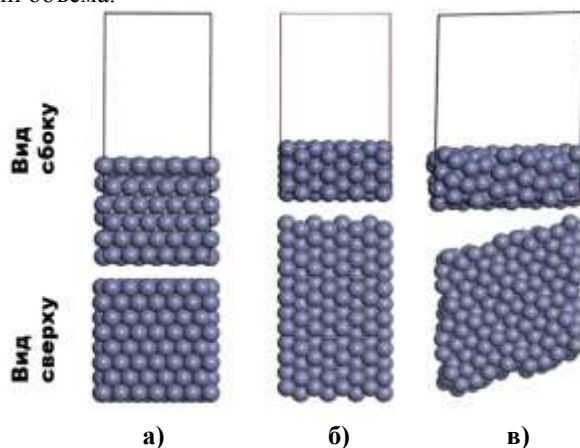


Рис. 2. Различные модели поверхности Zn: а) Zn (100), б) Zn(110), в) Zn(111)

Энергия поверхности ( $E_{\text{пов}}$ ) была вычислена при помощи следующего уравнения:

$$E_{\text{пов}} = \frac{E_{\text{мод}} - \frac{N}{n} E_{\text{эле}}}{2A}, \quad (1)$$

где  $E_{\text{пов}}$  – энергия модели поверхности,  $E_{\text{эле}}$  – энергия элементарной ячейки,  $A$  – площадь поверхности,  $n$  – количество атомов в элементарной ячейке и  $N$  – количество атомов в модели поверхности.

Полученная энергия была занесена в *табл. 2*

Таблица 2

Поверхностная энергия и площадь поверхности для различных плоскостей Zn

| Плоскость | Площадь поверхности, $A, \text{\AA}^2$ | Энергия поверхности, $E_{\text{пов}}, \text{эВ}/\text{\AA}^2$ |
|-----------|--|---|
| (100)     | 219.9                                  | 0.0698  |
| (110)     | 458.74                                 | 0.0826  |
| (111)     | 450.15                                 | 0.0839  |

По данным *табл. 2* можно сделать вывод, что поверхность (100) является наиболее энергетически выгодной для процессов адсорбции, так как она обладает самой низкой  $E_{\text{пов}} = 0.0698 \text{ эВ}/\text{\AA}^2$  среди рассматриваемых поверхностей.

Для того чтобы смоделировать сплавы Zn-1%Ag-1%Cu и Zn-4%Ag-1%Cu, в модель Zn (100) были добавлены атомы Ag. Были добавлены 3 атома Ag и 12 атомов Ag в модель путем замещения атомов Zn для моделирования 1%-го и 4%-го сплава соответственно (рис. 3). Атомы Cu не рассматривались, поскольку по экспериментальным данным на поверхности отсутствует фаза Cu, за исключением (Ag,Cu)Zn<sub>4</sub>, которая наблюдается при большем увеличении на границах зерен с объемной долей менее 1%. Допуски на схождение силы и энергии, а также значение энергии отсечки остаются такими же, как и для чистого Zn. В случае легированного Zn верхние слои атомов могли свободно перемещаться, а два нижних слоя были зафиксированы для имитации объема.

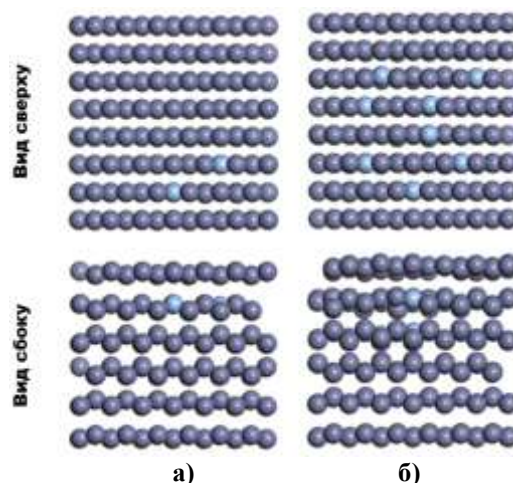


Рис. 3. Модели сплавов Zn-1%Ag-1%Cu (а) и Zn-4%Ag-1%Cu (б).

Процесс коррозии рассматривается как взаимодействие поверхностей сплава на основе Zn с молекулой кислорода ( $O_2$ ) в качестве адсорбата.  $O_2$  не только приводит к быстрой деградации металлов на воздухе, но также присутствует в крови человека и является сильным окислителем, поэтому его присутствие предварительно способствует коррозии имплантатов, расположенных внутри организма [22]. Энергию адсорбции ( $E_{\text{адсорбция}}$ ) молекулы кислорода на поверхности рассчитывали по формуле:

$$E_{\text{адсорбция}} = E_{\text{полн}} - E_{\text{мод}} - E_{\text{адсорбат}}, \quad (2)$$

где  $E_{\text{полн}}$  – полная энергия системы вместе с адсорбатом,  $E_{\text{мод}}$  – энергия модели поверхности без адсорбата и  $E_{\text{адсорбат}}$  – энергия адсорбата.

## Результаты

Рассмотрены различные геометрические положения молекул кислорода на чистом цинке Zn(100), Zn-1%Ag(100) и Zn-4%Ag(100). Самые низкоэнергетические конфигурации  $O_2$  на Zn(100) ( $E_{\text{адс}} = -5.778 \text{ эВ}$ ), Zn-1%Ag(100) ( $E_{\text{адс}} = -3.457 \text{ эВ}$ ) и Zn-4%Ag(100) ( $E_{\text{адс}} = -3.113 \text{ эВ}$ ) показаны на рис. 4 (а–в) соответственно. В каждом случае молекула кислорода располагается над поверхностью параллельно. Во всех случаях наблюдается растяжение связей  $O_2$  (*табл. 3*), что может свидетельствовать о сильном взаимодействии молекулы с поверхностью, но стоит отметить, что диссоциации молекулы не происходит. Расстояние от  $O_2$  до поверхности варьируется от 1.93 Å до 2.0 Å. Примечательно, что среди рассмотренных структур чистый Zn(100) обладает

наименьшей энергией адсорбции  $O_2$ , а увеличение содержания серебра в структуре приводит к увеличению энергии адсорбции. Также стоит отметить, что в случае адсорбции  $O_2$  на поверхности  $Zn-4\%Ag(100)$  длина связи  $O_2$  значительно увеличилась по сравнению с таковой в случае адсорбции  $O_2$  на поверхности  $Zn-1\%Ag(100)$  или  $Zn(100)$ . Данное явление может быть связано с тем, что при добавлении  $Ag$  в систему решетка сильно искривляется, и следовательно искажается электростатическая симметрия. Полученные данные были занесены в *табл. 3*.

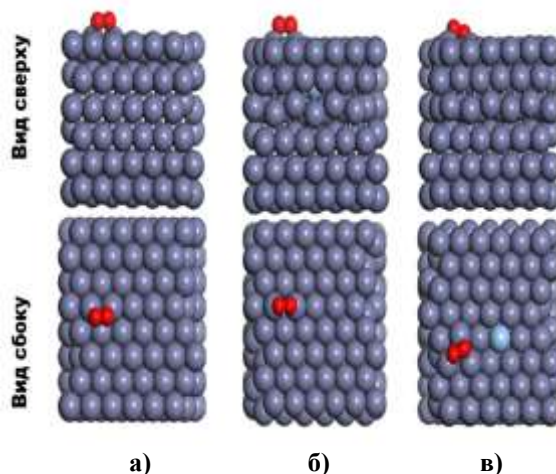


Рис. 4. Адсорбция молекулы  $O_2$  на поверхности: а) чистого  $Zn(100)$ , б)  $Zn-1\%Ag(100)$ , в)  $Zn-4\%Ag(100)$ .

Таблица 3

Энергия адсорбции для различных структур

| Структура сплава | $E_{\text{адсорбция}}$ , eV | Длина связи молекулы кислорода, Å | Расстояние от молекулы до поверхности, Å |
|------------------|-----------------------------|-----------------------------------|--|
| Чистый Zn        | -5.778                      | 1.387                             | 2.001                                    |
| Zn-1% Ag         | -3.457                      | 1.389                             | 1.985                                    |
| Zn-4% Ag         | -3.113                      | 1.485                             | 1.930                                    |

Из приведенных выше данных можно предположить, что добавки  $Ag$  в решетку  $Zn$  не ускоряют коррозионные процессы, а наоборот – несколько улучшают коррозионные свойства сплавов  $Zn$ .

### Обсуждение результатов

Чтобы исследовать факторы, влияющие на скорость коррозии материала, необходимо изучить изменение симметрии решетки, возникающее в результате введения атомов  $Ag$  в систему. Добавление атомов  $Ag$  в решетку  $Zn$  путем замещения приводит к нарушению ее симметрии, вызывая искажение решетки и возникновение внутренних напряжений, что можно заметить на примере сплава  $Zn$ , содержащего 1%  $Ag$  (*рис. 5а*). Можно заметить, что длина связи  $Zn-Ag$  увеличивается из-за атома  $Ag$ . Данное растяжение приводит к последующему сжатию связей  $Zn-Zn$  (см. связи  $Zn116-Zn174$ ,  $Zn128-Zn198$ ,  $Zn95-Zn93$  на *рис. 5а*), расположенных вблизи атомов  $Ag$ . Одновременно расширяются связи атомов  $Zn$  ( $Zn116-Zn128$ ,  $Zn127$ ,  $Zn128$  и др.), расположенных в вершинах шестиугольника, окружающего центральный атом  $Ag$ . В частности, длина связи  $Zn45-Zn104$  существенно увеличивается (+0.17738 Å), что можно объяснить расположением этой связи в вершинах двух шестиугольников с атомом серебра в центре. Для сплава цинка, содержащего 4%  $Ag$ , характер возникновения искажений решетки аналогичен, но, так как в решетке расположено большое количество атомов  $Ag$ , область напряжений и, как следствие, искажений решетки значительно выше (*рис. 5б*). Эти искажения возникают из-за перекрытия электронных облаков атомов  $Ag$  и  $Zn$  и из-за разницы их электроотрицательности ( $1.65 \text{ эВ}^{-0.5}$  для  $Zn$ ,  $1.93 \text{ эВ}^{-0.5}$  для  $Ag$ ). Для более глубокого рассмотрения искажений решетки в  $Ag$ -содержащем сплаве  $Zn$  был построен график функции радиального распределения (*рис. 5в*). Как можно заметить, плотность радиального распределения  $Zn-4\%Ag$  самая низкая, что указывает на сильное искажение решетки. Внутренние напряжения, связанные с асимметрией электростатического поля, создаваемого ионами металлов и обобщенными электронами, создают области локализации в решетке, которые способствуют более легкой адсорбции атомов из-за снижения электростатического барьера. Усиленное изменение симметрии решетки в этом случае может быть причиной ускорения скорости деградации материала.

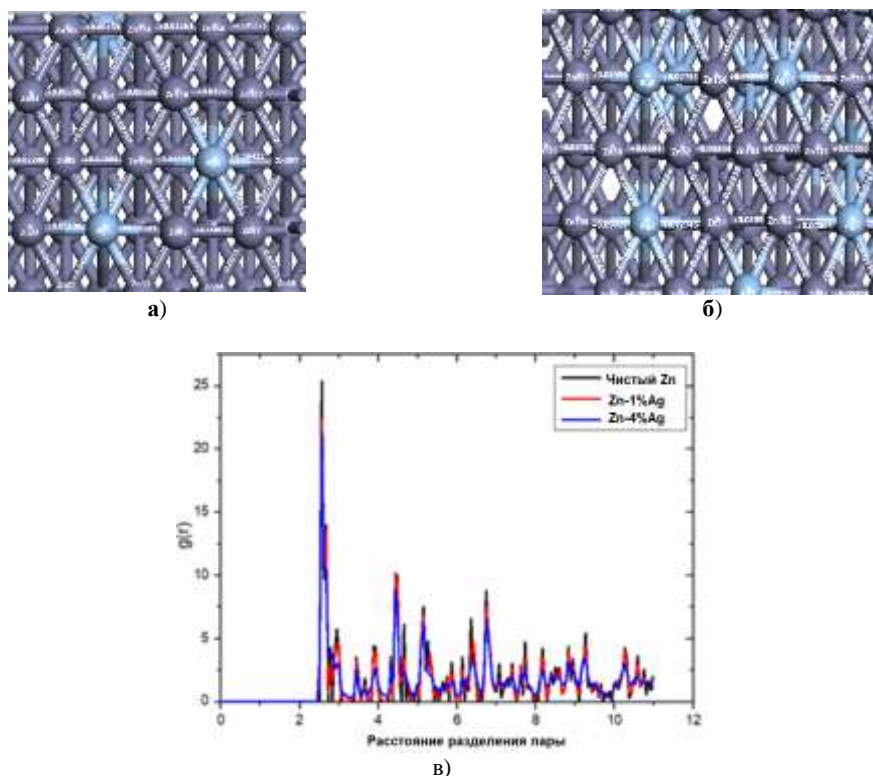


Рис. 5. Искажения в решетке Zn-1% Ag (а) и Zn-4% Ag (б), представленные как разности длин связей с решеткой без атомов Ag (все разности длин представлены в Å), верхний слой модели поверхности был удален для наглядности; в) функция радиального распределения для решеток чистого Zn, Zn-1%Ag и Zn-4%Ag.

На основании ТФП результатов, представленных в данной работе, можно сделать вывод, что введение атомов Ag в решетку Zn приводит к сильному искажению решетки. Вместе с этим стоит отметить, что при добавлении серебра в решетку, молекула кислорода хуже реагирует с поверхностью сплава. Данный эффект можно объяснить химическими свойствами серебра, которое из-за своей высокой «благородности» плохо реагирует с адсорбентами. Экспериментальные исследования показывают, что при добавлении серебра в систему у сплава, наоборот, ухудшаются коррозионные свойства [18; 23]. Предполагается, что дефекты, такие как границы зерен, возникающие в результате создания сплава Zn-Ag-Cu, являются основной причиной усиления коррозии.

### Заключение

В ходе исследования биodeградируемого сплава Zn-Ag-Cu при помощи метода, основанного на теории функционала плотности были получены следующие выводы:

- Включение атомов серебра в решетку сильно ее искажает и повышает коррозионную стойкость благодаря химической особенности серебра, которая включает в себя его низкую восприимчивость к адсорбентам.
- Увеличение содержания серебра до 4% не вызывает существенного изменения процесса деградации цинкового сплава, что указывает на то, что неравновесные границы зерен играют доминирующую роль в процессе из-за их повышенной способности изменять симметрию решетки.

*Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ФГБОУ ВО «УУНУТ» (соглашение №075-03-2023-119/1) молодежная научно-исследовательская лаборатория НОЦ «Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях»; гранта НШ-4320.2022.1.2; гранта РФФ №21-12-00275.*

### ЛИТЕРАТУРА

1. Zheng Y., Xu X., Xu Z. et al. Metallic biomaterials. New directions and technologies. Hoboken, NJ, USA: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA. 2017.
2. Valiev R. Z., Khafizova E. D. Nanometals for next-generation medical implants // Materials. Technologies. Design. 2021. Vol. 3. No. 5. P. 6–10.
3. Yang H., Jia B., Zhang Z. et al. Alloying design of biodegradable zinc as promising bone implants for load-bearing applications // Nat. Commun. 2020. Vol. 11. P. 401.
4. Wang N., Ma Y., Shi H. et al. Mg-, Zn-, and Fe-based alloys with antibacterial properties as orthopedic implant materials // Front. Bioeng. Biotechnol. 2022. Vol. 10. P. 888084.



5. Levy G. K., Goldman J., Aghion E. The prospects of Zinc as a structural material for biodegradable implants – A Review Paper // *Metals*. 2017. Vol. 7. P. 402.
6. Xiao C., Wang L., Ren Y. et al. Indirectly extruded biodegradable Zn-0.05wt%Mg alloy with improved strength and ductility: In vitro and in vivo studies // *J. Mater. Sci. Technol.* 2018. Vol. 34. No. 9. P. 1618–1627.
7. Tang Z., Niu J., Huang H. et al. Potential biodegradable Zn-Cu binary alloys developed for cardiovascular implant applications // *J. Mech. Behav. Biomed. Mater.* 2017. Vol. 72. P. 182–191.
8. Sikora-Jasinska M., Mostaed E., Mostaed, A. et al. Fabrication, mechanical properties and in vitro degradation behavior of newly developed Zn Ag alloys for degradable implant applications // *Mater. Sci. Eng.* 2017. Vol. 77. P. 1170–1181.
9. Balan A. P., Radhakrishnan S., Kumar R. et al. Non-van der Waals two-dimensional material from natural titanium mineral ore ilmenite // *Chem. Mater.* 2018 Vol. 30. P. 5923–5931.
10. Xu L., Yan M., Yuan M. et al. Unravelling the effect of F phase on hydrogen-assisted intergranular cracking in nickel-based Alloy 725: Experimental and DFT study // *Corrosion science*. 2023. Vol. 225. P. 111569.
11. Ismail A. Size-controllable crown ether-embedded 2D nanosheets for the host-guest ion segregation and recovery: Insights from DFT simulations // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. 2022. Vol. 171. P. 110983.
12. Seetha L., Ajit K., Nandakumar K. et al. Pd-functionalized 2D TMDC MoTe<sub>2</sub> monolayer as an efficient glucose Sensor: A First-principles DFT study // *Applied Surface Science*. 2023. Vol. 631. P. 157525.
13. Yuli M., Junyu L. 2D SnO/MoO<sub>3</sub> van der Waals heterojunction with tunable electronic behavior for multifunctional applications: DFT calculations // *Applied Surface Science*. 2023. Vol. 611. P. 155719.
14. Korznikova E. A., Bryzgalov V. A., Kistanov A. A. First-Principles Prediction of Structure and Properties of the Cu<sub>2</sub>TeO<sub>6</sub> Monolayer. // *Applied Sciences*. 2023. Vol. 13. P. 815.
15. Errahmany N., Rbaa, M., Abousalem A. S. et al. Insight of development of two cured epoxy polymer composite coatings as highly protective efficiency for carbon steel in sodium chloride solution: DFT, RDF, FFV and MD approaches // *J. Mol. Liq.* 2020. Vol. 312. P. 113413.
16. Ming X., Cai Y., Zongjin L. Atomic scale insight into the mechanisms of chloride induced steel corrosion in concrete // *Constr Build Mater.* 2022. Vol. 351. P. 128811.
17. Kistanov A. A., Khadiullin S. K., Dmitriev S. V., Korznikova E. A. Environmental stability of bismuthene: Oxidation mechanism and structural stability of 2D pnictogens // *Chem. Phys. Chem.* 2019. Vol. 20. P. 575.
18. Khafizova, E., Fakhretudinova E., Islamgaliev R. et al. Effect of Plastic Deformation on the Structure and Mechanical Properties of the Zn-4Ag-1Cu Zinc Alloy // *Materials*. 2023. Vol. 16. P. 4646.
19. Kresse G., Furthmüller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set // *Phys. Rev. B*. 1996. Vol. 54. P. 11169.
20. Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple // *Phys. Rev. Lett.* 1996. Vol. 77. P. 3865.
21. sWu S., Tan B. T., Senevirathna H. L., Wu P. Polarization of CO<sub>2</sub> for improved CO<sub>2</sub> adsorption by MgO and Mg(OH)<sub>2</sub> // *Appl. Surf. Sci.* 2021. Vol. 562. P. 150187.
22. Eliaz N. Corrosion of metallic biomaterials: A Review // *Materials*. 2019. Vol. 12. P. 407.
23. Ximei X., Bing W., Enyang L. et al. Investigation of zinc-silver alloys as biodegradable metals for orthopedic applications // *Journal of Materials Research and Technology*. 2023. Vol. 26. P. 6287–6303.

*Поступила в редакцию 07.12.2023 г.*

DOI: 10.33184/bulletin-bsu-2023.4.6

**USING DENSITY FUNCTIONAL THEORY TO MODEL CORROSION PROCESSES  
IN BIODEGRADABLE ALLOYS Zn-1%Ag-Cu AND Zn-4%Ag-Cu**© V. A. Bryzgalov<sup>1,2\*</sup>, A. A. Kistanov<sup>1</sup>, E. A. Korznikova<sup>1</sup><sup>1</sup>*Ufa University of Science and Technology  
32 Zaki Validi St., 450076 Ufa, Republic of Bashkortostan, Russia.*<sup>2</sup>*Institute for Metals Superplasticity Problems of the Russian Academy of Sciences  
39 Stepan Khalturin St. 450001 Ufa, Republic of Bashkortostan, Russia.**\*Email: bryzgalovv2000@gmail.com*

Corrosion properties are critical for bioresorbable alloys. The most popular at the moment are Zn-based alloys alloyed with such elements as Ag or Cu. Since corrosion resistance is usually assessed only by calculating mass loss and corrosion rate, it is important to evaluate the processes occurring at the alloy surface at the atomic level, in particular adsorption and lattice distortion. For this purpose, an approach based on density functional theory (DFT) was used, which is an effective tool for studying the structure of the alloy and the processes occurring on its surface. The alloy Zn-n%Ag-Cu (n = 1, n = 4) was studied, in particular, aspects of asymmetry when adding Ag atoms to the alloy were described, as well as the adsorption of the O<sub>2</sub> molecule on the surface of the alloy. This work is a study that sheds light on the corrosion behavior of Zn-Ag-Cu alloys, providing important knowledge about the corrosion mechanisms of zinc alloys, which is useful for the development of biodegradable implants with improved structure and performance.

**Keywords:** biodegradable alloys, density functional theory, adsorption, corrosion of alloys, lattice distortion.

*Received 07.12.2023.*