

## ЭНЕРГЕТИЧЕСКИ ВЫГОДНЫЕ КОНФИГУРАЦИИ СИММЕТРИЧНЫХ ГРАНИЦ ЗЕРЕН НАКЛОНА В ГПУ-ТИТАНЕ

Уразалиев М. Г.<sup>1</sup>, Ступак М. Е.<sup>1</sup>, Попов В. В.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>) Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения,  
г. Екатеринбург, Россия

E-mail: [misha.urazaliev@yandex.ru](mailto:misha.urazaliev@yandex.ru)

## ENERGETICALLY FAVORABLE CONFIGURATIONS OF SYMMETRIC TILT GRAIN BOUNDARIES IN TITANIUM(HCP)

Urazaliev M. G.<sup>1</sup>, Stupak M. E.<sup>1</sup>, Popov V. V.<sup>1</sup>

<sup>1</sup>) M.N. Mikheev Institute of Metal Physics of the Ural Branch of the Russian Academy of  
Sciences

Molecular static and molecular dynamic simulations symmetric tilt grain boundaries in hcp titanium were used to evaluate energetically favorable configurations. Grain boundary width is investigated by visualization atomistic simulation data.

Свойства поликристаллического титана напрямую зависят от структуры границ зерен (ГЗ). Данное исследование посвящено исследованию структуры и энергии ширины большеугловых специальных границ зерен наклона в альфа-титане имеющим гексагональную плотную упаковку (ГПУ). Для получения структуры границ зерен в ГПУ металлах определяющим является энергетический подход, так как большинство специальных границ в ГПУ-металлах может не иметь так называемые узлы строгого совпадения, если рассматривать только геометрию структуры ГЗ.

Значения энергий и структуры ГЗ были получены методами молекулярной статики [1] и молекулярной динамики (МД). Структуры ГЗ получены из теории решетки узлов совпадения [2]. Для моделирования ГЗ был использован пакет LAMMPS. В расчетной ячейке создавалось два блока частиц, развернутых под специальным углом соответствующим ГЗ.

Стабильные структуры большеугловых границ зерен в титане получены на основе межатомного потенциала погруженного атома [3]. Выбор потенциала сильно влияет на полученные стабильные структуры ГЗ при МД-расчете. Анализ влияния точечных дефектов на структуру границ зерен ГПУ титана был выполнен на основе расчета энергии образования точечных дефектов в некоторых из полученных структур ГЗ.

Рассчитаны энергии образования точечных дефектов (вакансий и внедрений) в границах зерен и проанализированы зависимости энергий образования дефектов от расстояния от плоскости границы зерна.

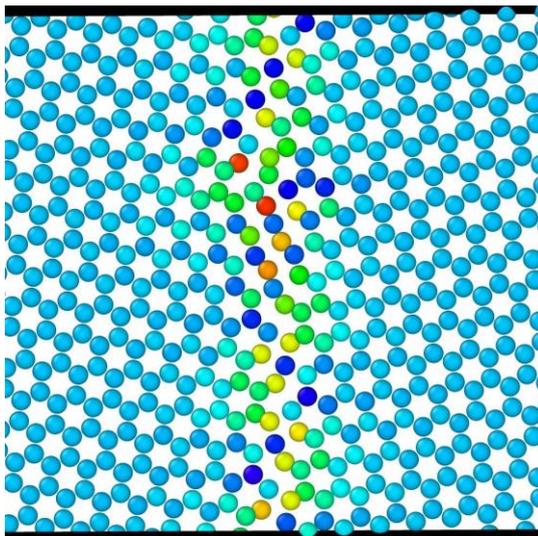


Рис. 1. Границы зерен оси наклона ГПУ титана оси наклона [0001]: цветовое обозначение для значения энергии. Получено методом молекулярной статики.

1. Tschopp, M. A., & McDowell, D.L. (2007). Structures and energies of Sigma3 asymmetric tilt grain boundaries in Cu and Al. *Philosophical Magazine*, 87, 3147-3173
2. Farkas, D. Grain-boundary structures in hexagonal materials: Coincident and near coincident grain boundaries. *Metall Mater Trans A* 25, 1337–1346 (1994)
3. M. I. Mendelev, T. L. Underwood, and G. J. Ackland, *J. Chem. Phys.* 145, 154102 (2016).