

Уразалиев М.Г., Ступак М.Е., Попов В.В.

БОЛЬШЕУГЛОВЫЕ ГРАНИЦЫ ЗЕРЕН НАКЛОНА В ОЦК ТИТАНЕ: СТРУКТУРА, ЭНЕРГИЯ, ШИРИНА СПЕЦИАЛЬНЫХ ГРАНИЦ. МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ.

Аннотация. Методами молекулярной статистики и молекулярной динамики выполнены расчеты структуры и энергии симметричных границ наклона в ОЦК титане. Проведено сравнение результатов расчетов структуры границ методами молекулярной статистики и молекулярной динамики. Выполнено сопоставление полученных в результате расчетов значений энергии и ширины границ в ОЦК Ti с имеющимися экспериментальными данными.

Ключевые слова: границы зерен, атомистическое моделирование, молекулярная динамика, молекулярная статика.

Abstract. Calculations of structure and energy of symmetrical tilt boundaries in BCC Ti have been done by the methods of molecular statistics and molecular dynamics. There results of calculations by both methods are compared. The calculated values of energy and width of boundaries in BCC Ti are compared with the available experimental data.

Keywords: grain boundaries, atomistic simulation, molecular statistics, molecular dynamics.

Введение

Свойства поликристаллических материалов во многом зависят от структуры и энергии границ зерен (ГЗ). В литературе мало данных о границах зерен в чистом ОЦК титане. Это связано с трудностями экспериментального исследования. Титан высокой чистоты имеет две аллотропические модификации: α и β . Температура фазового полиморфного превращения составляет 1155 К. Изучение границ зерен в β -Ti осложнено тем, что ОЦК структура не стабильна при комнатной температуре, а стабильна только при высоких температурах.

Поэтому для изучения границ зерен в ОЦК Ti предпочтительнее использовать атомистическое моделирование. В этой области научный прогресс зависит от прогресса в области компьютерных вычислений и разработки новых полуэмпирических потенциалов.

Целью настоящей работы было выполнить атомистическое моделирование структур специальных границ наклона с осью $\langle 110 \rangle$ в поликристаллическом β -Ti и оценить их энергии и ширину.

Методология атомистического моделирования

В настоящей работе были рассчитаны структуры и энергии симметричных границ наклона в поликристаллическом Ti. Расчеты проводились как методом

молекулярной статик (MS) и для температуры 0 К, так и методом молекулярной динамики (MD) для температур, при которых стабильна ОЦК структура (>1155 К).

В работе [1] были разработаны потенциалы погруженного атома, зависящие от температуры, для Ti. Согласно [1] потенциал (Ti1) воспроизводит превращение ГПУ-ОЦК, температуру плавления и подходит для моделирования ОЦК-Ti. Этот потенциал мы использовали при расчетах.

Моделирование структуры и энергии границ зерен проводилось в программе LAMMPS [1]. Для этого использовалась расчетная ячейка с периодическими граничными условиями Борна – фон Кармана по всем трем направлениям, состоящая из двух зерен. В ячейке моделирования имеется две кристаллографически идентичных границы зерна: одна периодическая ГЗ в верхней и нижней границах ячейки моделирования (ГЗ1) и одна ГЗ в середине ячейки (ГЗ2) (рис. 1).

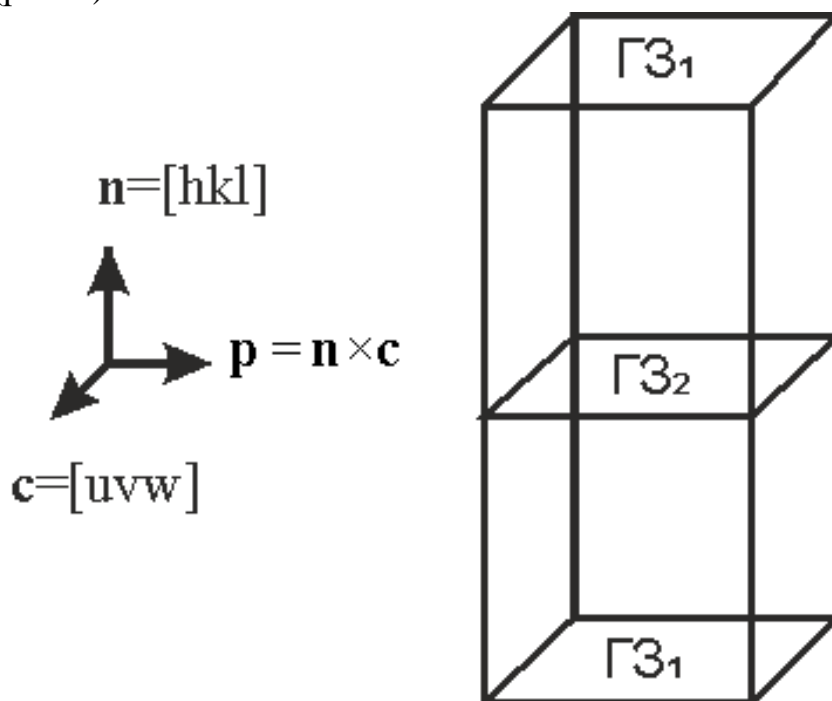


Рисунок 1 – Схема трехмерной периодической бикристаллической расчетной ячейки с обозначением ориентации кристалла. \mathbf{c} – ось наклона, \mathbf{n} – нормаль к плоскости границы

Компоненты направляющих векторов блоков определялись следующим образом. Один из векторов – это нормаль к плоскости границы зерна, \mathbf{n} . Два других вектора лежат в плоскости границы, один из которых – это вектор оси наклона, \mathbf{c} , а другой получается векторным произведением векторов нормали и оси наклона. Затем находили компоненты векторов второго блока.

На этапе построения границ зерен атомы достраивались до границы зерна, и соседние зерна могли содержать атомы, которые расположены очень

близко друг к другу. Удаление атомов, расположенных слишком близко друг относительно друга проводилось с помощью определения критического расстояния между ними.

После удаления атомов в соответствии с критерием выполнялось редактирование геометрии блоков друг относительно друга. Тем самым задавались разные начальные конфигурации.

После этого запускалась процедура минимизации энергии в случае молекулярно-статического моделирования или пошаговая процедура в случае молекулярно-динамического моделирования. В случае МД моделирования использовался термостат Нозе-Гувера разработанный в работах [2-3].

Энергия границы зерна, E_{GB} , определялась как избыточная энергия микроструктуры, локализованной в межзеренной области:

$$E_{GB} = (E_p - N \times E_{coh}) \times \frac{1}{2S} \quad (1)$$

где E_p – полная потенциальная энергия релаксированного бикристалла, N – число частиц, находящихся расчетной области, E_{coh} – энергия когезии (энергия связи, приходящаяся на один атом бездефектной решетки монокристалла), S – площадь границы зерна. Множитель 2 в знаменателе учитывает наличие двух границ.

Структура и энергия ГЗ для каждой границы рассчитывалась для различных начальных конфигураций. Для дальнейшего анализа использовалась структура, соответствующая минимуму энергии.

В работе также была оценена ширина границы зерна, поскольку она является важнейшим параметром зернограницной диффузии. В качестве визуализатора использовалась программа OVITO [4]. В программе OVITO было измерено максимальное расстояние между атомами по обе стороны границы, для которых межатомное расстояние, по крайней мере, в одном направлении существенно отличалось от межатомного расстояния в регулярной решетке. Это расстояние принималось за ширину ГЗ.

Результаты и обсуждение

Для поиска структур соответствующим реальным границам зерен необходимо из большого числа начальных конфигураций выбрать структуры с минимальной энергией. Увеличение числа начальных конфигураций, повышает вероятность найти структуру с наименьшей энергией. В таблице 1 приведены данные полученные из молекулярно-статического расчета.

Таблица 7 – Параметры структуры, энергия и ширина ГЗ

\square	Плоскость границы	\square°	EGB, Дж/м ²	\square , нм
33	(118)	20.5	0.06	1.1
19	(116)	26.5	0.06	0.8
9	(114)	38.9	0,35	0.6
11	(113)	50.5	0,25	1.3
3	(112)	70.5	0,47	0.8
43	(335)	80.6	0.05	1.6
17	(223)	86.6	0,13	1.3
17	(334)	93.4	0,11	1.2
3	(111)	109.5	0,38	1.3

Структуры, полученные из МД моделирования, отличаются от структур полученных молекулярной статикой, за исключением $\Sigma 3$ (112). Это иллюстрирует рис. 2, на котором показано сравнение структур границ $\Sigma 3$ (112) и $\Sigma 27$ (552), полученных молекулярной статикой и молекулярной динамикой.

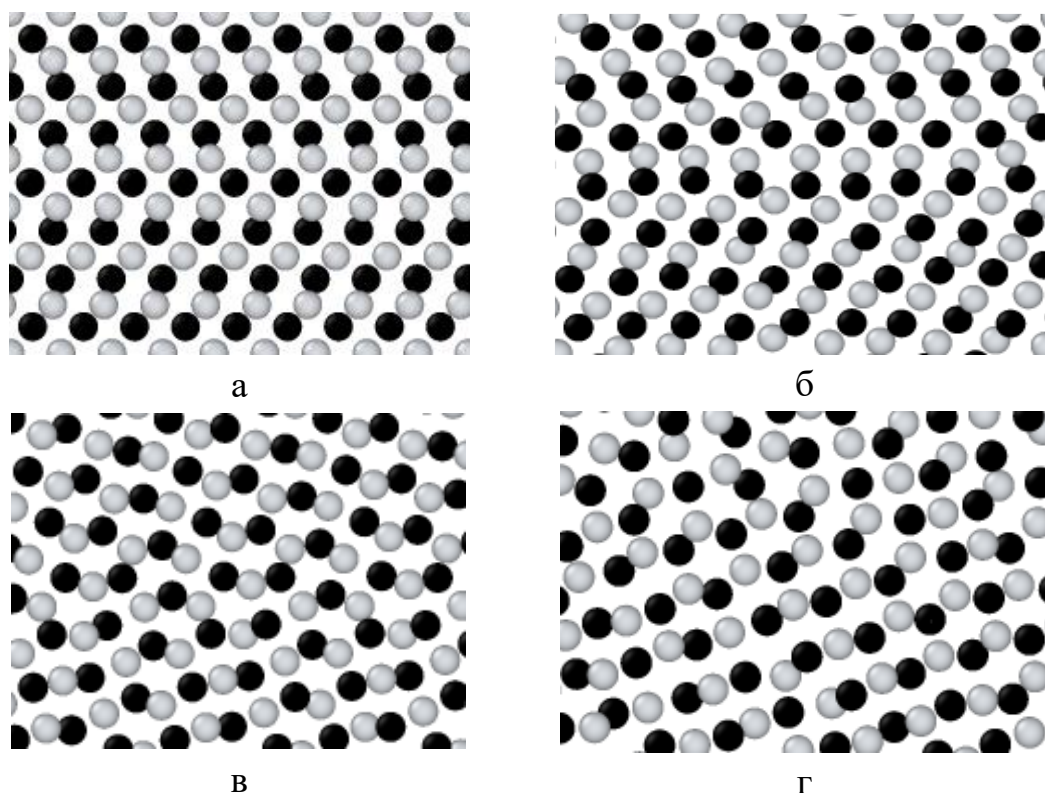


Рисунок 2 – Сравнение структур границ $\Sigma 3$ (112)[1-10] (а,б) и $\Sigma 27$ (552)[1-10] (в,г), рассчитанных с помощью молекулярных статики (а,в) и динамики (б,г).

Значительное число начальных конфигураций ГЗ деградировали при МД моделировании. Некоторые наиболее устойчивые конфигурации, полученные молекулярной статикой, представлены на рис. 3.

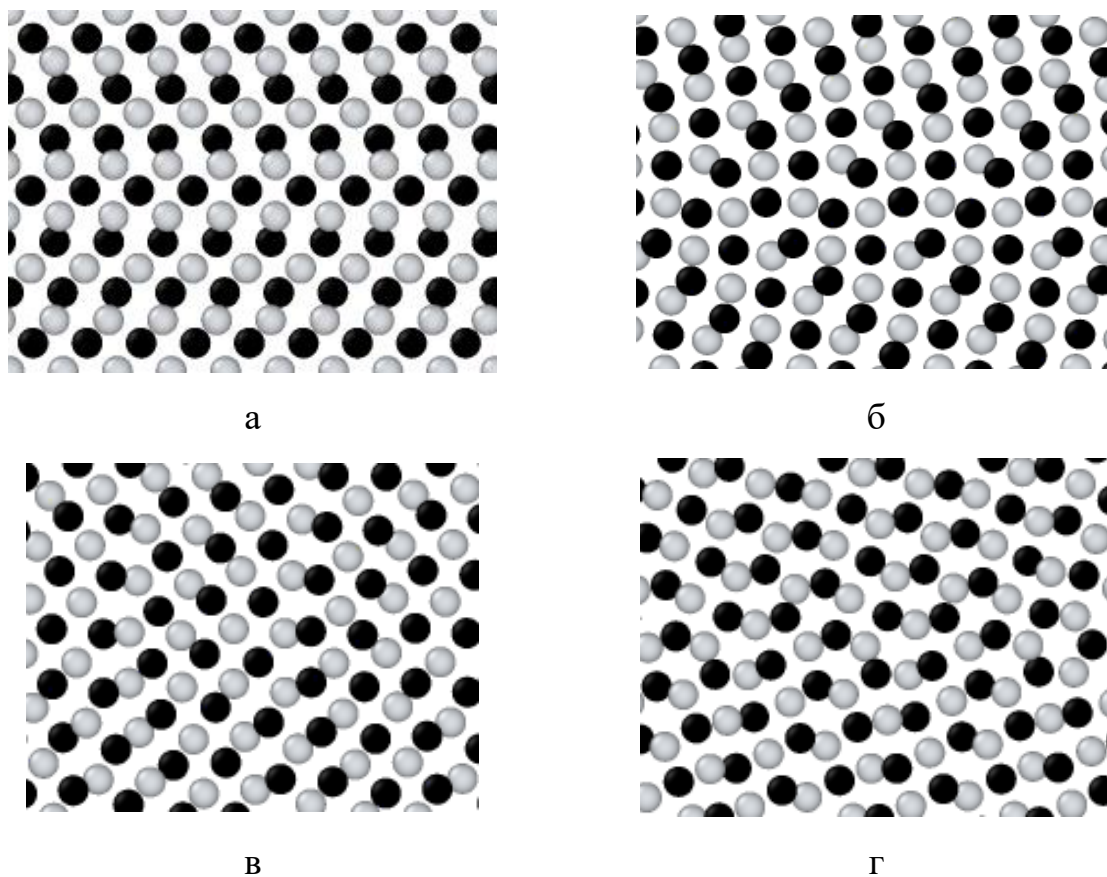


Рисунок 3 – Структуры границ $\Sigma 3$ (112) (а); $\Sigma 19$ (116)[1-10] (б); $\Sigma 17$ (223) (в); $\Sigma 17$ (334) (г), рассчитанные с помощью молекулярной статистики.

Сравнение результатов настоящего исследования с данными работы [8], в которой было проведено экспериментальное определение энергии границ зерен общего типа в ОЦК Ti при высоких температурах, показывает, что рассчитанные методом молекулярной статистики энергии специальных границ заметно ниже, чем было получено экспериментально для границ общего типа, хотя они одного порядка. Имеющееся расхождение, по-видимому, объясняется двумя причинами. Во-первых, энергия специальных границ всегда меньше, чем границ общего типа. Во-вторых, экспериментальное исследование было проведено для высоких температур, а расчет проводился для 0 К. С учетом этого согласие результатов расчета и эксперимента можно признать удовлетворительным.

В таблице 1 приведена оцененная ширина ГЗ, рассмотренных в настоящей работе. Для рассмотренных ГЗ расчетная ширина составляет 0.6-1.6

нм. Это близко, хотя и несколько больше значений, полученных в диффузионных и структурных исследованиях [6-7].

Заключение

Методами молекулярной статики проведен расчет структуры и энергии симметричных границ наклона $\langle 110 \rangle$ в поликристаллическом титане. Получены значения энергии и ширины границ для различных разориентировок наиболее устойчивых границ зерен. Показано, что рассчитанные значения энергии и ширины границ не противоречат эксперименту.

Благодарность

Авторы выражают признательность Ю.Н. Горностыреву и Л.Е. Карькиной за консультации и помощь в обсуждении результатов.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России (тема «Функция» номер госрегистрации АААА-А19-119012990095-0).

Библиографический список

1. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics / S. Plimpton // Journal of Computational Physics. – 1995. – Vol. 117, Is. 1. – P. 1–19.
2. Hoover W. G. Canonical dynamics: Equilibrium phase-space distributions / W. G. Hoover // Physical Review A. – 1985. – Vol. 31, Is. 3. – P. 1695–1697.
3. Nosé S. A unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods / S. Nosé // Journal of Chemical Physics. – 1984. – Vol. 81, Is. 1. – P. 511–519.
4. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the open visualization tool / A. Stukowski // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. – 2010. – Vol. 18, Is. 1. – P. 015012.
5. Mendeleev M. I. Development of an interatomic potential for the simulation of defects, plasticity, and phase transformations in titanium / M. I. Mendeleev, T. L. Underwood, G. J. Ackland // Journal of Computational Physics. – 2016. – Vol. 145, Is. 15. – P. 154102.
6. Grain boundary width, energy and self-diffusion in nickel: effect of material purity / D. Prokoshkina, V. A. Esin, G. Wilde, S. V. Divinski // Acta Materialia. – 2013. – Vol. 61, Is. 14. – P. 5188–5197.
7. Rösner H. Strain mapping along al-pb interfaces / H. Rösner, C. T. Koch, G. Wilde // Acta Materialia. – 2010. – Vol. 58, Is. 1. – P. 162–172.
8. Measurement of the grain boundary energy of commercially-pure grade 2 titanium at high temperature / C. C. Camilo, E. C. Souza, P. L. Di Lorenzo, J. M. D. A. Rollo // Revista Brasileira de Engenharia Biomedica. – 2011. – Vol. 27, Is. 3. – P. 175–181.