

УДК 538.91

Фазовая стабильность решетки Ti в присутствии примесей Al, V и Mo

С.О. Огнев

Научный руководитель: к.ф.-м.н. Л.А. Святкин
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050
E-mail: soo1@tpu.ru

Phase stability of Ti lattice in the presence of Al, V and Mo impurities

S.O. Ognev

Scientific Supervisor: Ph.D., L.A. Svyatkin
Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050
E-mail: soo1@tpu.ru

Abstract. *The results of an ab initio study of the energetic favorability of two-phase titanium lattices in the presence of Al, V, and Mo substitutional impurities are presented. The study establishes the influence of impurities on the energy predominance of titanium phases. This study offers a novel perspective on the phase transition in titanium, providing a comprehensive understanding of the role of impurities in this process. The present study demonstrated that the contribution of molybdenum to the stabilization of the β -phase is greater than that of vanadium. It has been demonstrated that in non-equilibrium processes, the stabilization of β -phase is possible at locally high concentrations of Al. The influence of Mb impurity on the phase stability of β -phase is greater than that of V impurity.*
Key words: titanium, impurities, phase transition, ab initio.

Введение

Лёгкость и высокая прочность титановых сплавов в широком диапазоне температур обеспечивают их широкое использование в качестве конструкционных материалов в различных отраслях транспортного машиностроения, медицине, энергетике, химической промышленности и др. Эксплуатационные характеристики титановых сплавов напрямую связаны с их структурой и фазовым составом, которые, в свою очередь, зависят от типа и количества легирующих элементов, а также степени их распределения между фазами [1]. Актуальность исследований влияния примесных атомов на фазообразование в титановых сплавах существенно возросла в последние годы вследствие активного внедрения аддитивных технологий. В настоящее время проведено большое количество теоретических исследований, посвященных роли электронной структуры в стабильности фаз в титане, содержащем легирующие примеси [2, 3].

Тем не менее, результаты первопринципных исследований атомной и электронной структуры тройных титановых сплавов, одновременно содержащих α и β -стабилизирующие элементы, в литературе представлены крайне мало. Целью настоящей работы является первопринципное исследование фазовой стабильности титановых сплавов с различным содержанием Al, V, и Mo.

Экспериментальная часть

Расчеты из первых принципов атомной структуры и электронного строения систем Ti-Al, Ti-V, Ti-Mo, Ti-Al-V и Ti-Al-Mo были выполнены в рамках теории функционала электронной плотности с использованием методов псевдопотенциала и проекционных присоединенных волн. Для описания обменных и корреляционных эффектов использовалось приближение обобщенного градиента в форме Пердью, Бурке и Эрнцерхофа. Работы выполнялись в пакете программ ABINIT. Была проведена оптимизация параметров решетки и релаксация положений всех атомов в расчетных ячейках. Релаксация считалась завершённой

при значении сил, действующих на атомы, менее 25 мэВ/Å. На каждой итерации самосогласования собственные значения гамильтониана рассчитывались в сетке k -точек $10 \times 10 \times 10$ всей зоны Бриллюэна. Энергия обрезания при разложении волновой функции по базису плоских волн, составила 300 эВ.

Результаты

В работе была оптимизирована атомная структура систем $\text{Ti}_{1-x}\text{Al}_x$, $\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x$, $\text{Ti}_{1-x}\text{Mo}_x$, $\text{Ti}_{1-2x}\text{Al}_x\text{V}_x$ и $\text{Ti}_{1-2x}\text{Al}_x\text{Mo}_x$, где x – значения концентраций легирующих элементов, принимающих значения 0,125 и 0,25, что соответствует 12,5 и 25 ат. %. Рассмотренные высокие концентрации легирующих элементов позволяют более явно отследить влияние рассмотренных примесей на структурно-фазовую стабильность решетки Ti и их роль в процессах фазовых превращений.

Расчетные ячейки представлены на рис. 1. α -фаза титана характеризуется ГПУ решеткой, β -фаза – ОЦК решеткой. Для каждой фазы системы с двумя примесными атомами в расчетной ячейке были подобраны по две конфигурации расположения примесей – в первых (α^1 , β^1) и вторых (α^2 , β^2) координационных сферах относительно друг друга. В работе проводился расчет разности энергий ΔE разных фаз одной и той же системы по формуле

$$\Delta E = E_\alpha - E_\beta,$$

где E_α , E_β – полные энергии α - и β -фаз соответственно. Результаты расчетов энергий и параметров решеток представлены в таблице 1.

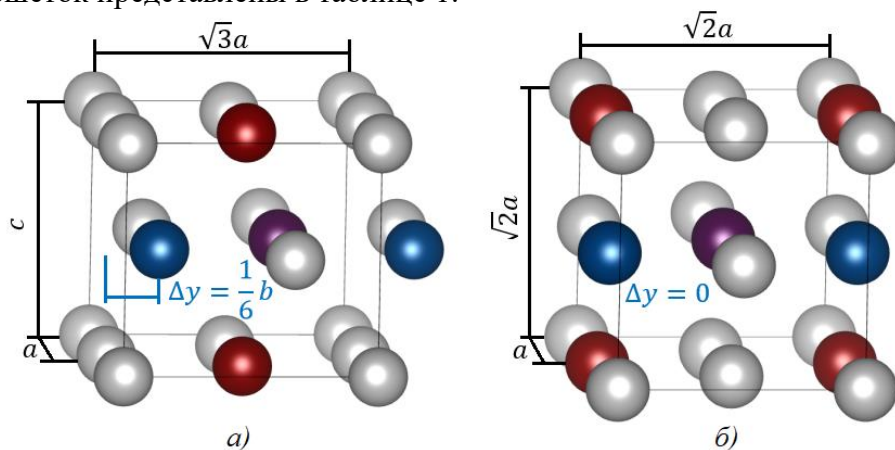


Рис. 1. Расчетные ячейки α (а) и β (б) фаз систем $\text{Ti}_{1-x}\text{Al}_x$, $\text{Ti}_{1-x}\text{V}_x$, $\text{Ti}_{1-x}\text{Mo}_x$, $\text{Ti}_{1-2x}\text{Al}_x\text{V}_x$ и $\text{Ti}_{1-2x}\text{Al}_x\text{Mo}_x$. Фиолетовым цветом показаны атомы титана, замещаемые на атом Al, V или Mo во всех рассмотренных случаях, синим – замещаемые в конфигурации 1, красным – в конфигурации 2. a и c – параметры решетки. Δy – смещение атомных слоев относительно друг друга

Было установлено, что в отсутствии примесей энергетически наиболее выгодна α -фаза титана. Примесь ванадия при концентрациях порядка 12,5 ат. % несколько повышает энергетическую стабильность β -фазы, при концентрациях ванадия в системе порядка 25 ат. % β -фаза титана становится энергетически выгодной по сравнению с α -фазой. Похожая ситуация наблюдается в случае примеси молибдена порядка 12,5 ат. %. Таким образом, влияние примеси молибдена на фазовую стабильность β -фазы больше, чем у примеси ванадия.

При рассмотренных концентрациях Al энергетически наиболее выгодной является α -фаза. Однако, при концентрации Al 25 ат. % конфигурация β^2 энергетически чуть более выгодна по сравнению с α^2 и менее выгодна по сравнению с α^1 . Таким образом, при неравновесных процессах возможна стабилизация β -фазы при локально высокой концентрации Al.

В работе также была изучена фазовая стабильность титана в присутствии примесей обоих типов стабилизаторов в решетке. Для систем Ti-Al-V и Ti-Al-Mo энергетически

наиболее выгодными среди рассмотренных случаев являются конфигурации α^2 и β^2 соответственно, когда атомы примесей находятся в разных плоскостях, смещающихся относительно друг друга в процессе фазовых превращений (рис. 1). В случае наличия в системе по 12,5 ат. % примесей алюминия и ванадия разность полных энергий α - и β -фаз Ti сопоставима по величине с соответствующей разностью энергий в системе Ti-V. То есть при совместном присутствии Al и V в решетке титана определяющий вклад в фазовую стабильность системы вносит примесь ванадия. В случае наличия примесей алюминия и молибдена с концентрацией по 12,5 ат. % каждая за счет малой разности полных энергий α - и β -фаз в неравновесных условиях наравне с β -фазой может наблюдаться и α -фаза.

Таблица 1

Параметры решетки a и c α -фазы и a β -фазы, разница между полными энергиями в рассматриваемых системах при различных значениях концентраций примесей

Система	Параметры решетки, Å				ΔE , eV			
	α^1	α^2	β^1	β^2	$\alpha^1 - \beta^1$	$\alpha^2 - \beta^2$	$\alpha^1 - \beta^2$	$\alpha^2 - \beta^1$
Ti ₈	2,917	4,643	3,236		-0,804			
Ti ₆ V ₂	2,863 4,558	2,865 4,561	3,188	a : 3,179	0,105	0,197	0,190	0,112
Ti ₇ V	2,890	4,601	3,206		-0,320			
Ti ₆ AlV	2,876 4,578	2,875 4,577	3,194	a : 3,194	-0,370	-0,348	-0,321	-0,396
Ti ₆ Al ₂	2,895 4,608	2,894 4,606	3,218	a : 3,219	-0,701	0,049	-0,186	-0,466
Ti ₇ Al	2,903	4,621	3,224		-0,679			
Ti ₆ AlMo	2,888 4,596	2,886 4,594	3,202	a : 3,202	-0,013	0,067	0,245	-0,191
Ti ₆ Mo ₂	2,884 4,590	2,877 4,580	3,199	a : 3,206	0,458	0,330	0,461	0,327
Ti ₇ Mo	2,902	4,620	3,217		0,182			

Заключение

В рамках работы было проведено исследование систем Ti_{1-x}Al_x, Ti_{1-x}V_x, Ti_{1-x}Mo_x, Ti_{1-2x}Al_xV_x и Ti_{1-2x}Al_xMo_x, что позволило выявить степень влияние примесей Al, V и Mo на фазовую стабильность титана. Показано, что α -фаза титана энергетически наиболее выгодна при всех рассмотренных концентрациях алюминия и 12,5 ат. % ванадия, β -фаза – при 25 ат. % ванадия и при всех рассмотренных концентрациях молибдена. Влияние алюминия на стабилизацию α -фазы недостаточно, чтобы нивелировать влияние молибдена: в присутствии обеих примесей в решетке будут наблюдаться области с α - и β -фазами, а их количество будет сильно зависеть от напряжений и температуры. Установлено, что в присутствии алюминия возможна стабилизация β -фазы при неравновесных условиях. Выявлено, что 25 ат. % ванадия оказывает такое же влияние на энергетическую стабильность решетки титана, как и 12,5 ат. % молибдена.

Список литературы

1. Filip R., Kubiak K., Ziaja W., Sieniawski J. The effect of microstructure on the mechanical properties of two-phase titanium alloys // J. of Materials Processing Technology. – 2003. – № 133. – P. 84–89.
2. Zhou W., Sahara R., Tsuchiya K. First-principles study of the phase stability and elastic properties of Ti–X alloys (X = Mo, Nb, Al, Sn, Zr, Fe Co, and O) // J. Alloys Compd. – 2017. – № 727. – P. 579–595.
3. Ch.E. Lekka, J.J. Gutiérrez-Moreno, M. Calin. Electronic origin and structural instabilities of Ti-based alloys suitable for orthopaedic implants // J. of Physics and Chemistry of Solids. – 2017. – № 102. – P. 49–61.