

钛中 α/ω 界面的第一性原理计算

朱律齐^{1,2}, 万维锋^{1,2}, 江 勇^{1,2,3}, 刘会群^{1,2}, 易丹青^{1,2}

(1. 中南大学, 湖南 长沙 410083)

(2. 有色金属材料教育部重点实验室, 湖南 长沙 410083)

(3. 粉末冶金国家重点实验室, 湖南 长沙 410083)

摘 要: 基于实验观测到的界面位向关系, 针对钛中 α/ω 界面开展了第一性原理密度泛函计算研究。根据 α 、 ω 两相不同的表面终端和界面原子配位类型, 构建和计算了 24 种可能的 $\alpha\{1\bar{1}00\}/\omega\{1\bar{1}00\}$ 界面原子模型。结果显示, 有 5 种界面结构在能量上具有相近优势, 在钛中可能同时出现, 其平均界面能为 0.100 J/m^2 (计入错配应变), 或 0.029 J/m^2 (不计入错配应变)。

关键词: 钛; α/ω 界面; 界面能; 共格应变; 第一性原理

中图分类号: TG146.23

文献标识码: A

文章编号: 1002-185X(2018)10-3058-05

钛及钛合金具有高比强度、高抗腐蚀性能和良好的生物相容性, 在航空航天、化工工业以及生物医学等领域应用广泛。钛具有同素异型转变特性, 低温下为 α 相, 具有 hcp 晶格结构 (空间群 $P6_3/mmc$), 高于 β 转变温度时转变为 β 相, 具有 bcc 晶格结构 (空间群 $Im\bar{3}m$)。纯钛中的平衡态 ω 相一般在大于 9 GPa 的高压下形成^[1], 具有六方结构 (空间群为 $P6/mmm$), 而在钛合金中, 从高温 β 相区快速冷却以及随后的等温时效过程中, 也可能形成亚稳的 ω 相^[2-4]。

钛合金的力学性能强烈依赖于 ω 、 α 等析出相的形态、尺寸、体积分数和分布。例如: ω 相的析出量达到一定比例, 会导致合金的宏观脆性, 而细小 α 相的弥散析出, 有助于合金获得较好的综合力学性能^[2]。明确 β 、 α 、 ω 3 相之间的相变机制十分重要, 是实现钛合金析出相科学调控的理论基础。纯粹依赖实验观察和表征的相变研究已有很多, 但尚未形成定论, 其中很多结论甚至相互矛盾。比如, 文献中关于 β 基体中的 α 相变机制, 目前归纳起来就有 3 种主要推断: (1) Azimzaden 和 Rack^[2]在对 Ti-6.8Mo-4.5Fe-1.5Al 合金的研究中提出, α 相在距离 β/ω 相界若干原子层外的 β 基体内形核, 且形核与 Al 元素富集相关, 这符合 Al 元素是 α 相稳定元素的通常认识; (2) Nag 和 Banerjee 等^[5]在对 Ti-5553 合金的研究中提出, $\omega \rightarrow \alpha$ 的相变与 Al 元素富集高度相关, 但形核在 β/ω 界面上发生。(3) Prima 等^[6]提出 α 相在 ω 相内部形核, 通过消耗 ω 相而长大。

相变机制存在这些争论, 可能与所研究的钛合金的

不同成分和热处理制度有关, 但归根到底, 与缺乏 β 、 α 、 ω 3 相间的界面能数据有直接关系。从热力学上看, 3 相间的相变驱动力由体积替换能、新界面的界面能、和新相析出引发的应变能决定。本文针对 α/ω 界面及实验观测到的界面位向关系, 以纯钛作为钛合金的基础体系, 采用第一性原理方法直接计算预测 α/ω 界面的精细原子结构及其界面能, 为随后的钛及钛合金的相场计算和相变机制研究提供可靠的数据和分析基础。

1 表征和计算方法

本研究用于确定 α/ω 界面位向关系的实验样品, 取自于自行研制的一种 β 型 Ti-19Nb-1.5Mo-4Zr-8Sn (质量分数, %)合金。该合金采用真空自耗电弧熔炼, 经热锻、热轧、冷轧成型。为确保在基体中获得 α 和 ω 两相共存, 对冷轧态合金在 1173 K 氩气保护下进行 1 h 固溶, 淬火方式为水冷。再经 673 K 下 120 h 时效处理。然后切取厚度为 1.5 mm 的薄片, 机械减薄至 0.08 mm 后冲出直径为 3 mm 的小圆片样品, 再采用双喷减薄仪进行电化学减薄, 其中双喷电解液成分为: 高氯酸:正丁醇:甲醇=5:35:60 (质量比)。对合金微观结构的观察采用 Tecnai G² F20 和 Titan 80-300 透射电子显微镜, 工作电压分别为 200 和 300 kV。

本文中所有结构弛豫和能量计算, 均采用基于密度泛函理论的计算程序包 VASP (vienna ab initio simulation package)。VASP 采用周期性边界条件和平面波基组^[7]。赝势构建中将 Ti-3s、3p、和 4s 轨道作为半芯态处理,

收稿日期: 2017-10-14

基金项目: 国家重点基础研究发展计划 (“973” 计划) (2014CB644001-2)

作者简介: 朱律齐, 男, 1994 年生, 硕士, 中南大学材料科学与工程学院, 湖南 长沙 410083, 电话: 0731-88830263, E-mail: zhulvqi@csu.edu.cn

电子和离子实的相互作用采用 PAW (projector augmented wave)^[8]方法描述。交换关联泛函分别考察了采用局域密度近似 LDA (local density approximation)、广义梯度近似 GGA (generalized gradient approximation) 及 PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) 方法^[9]。布里渊区积分采用 M-P 的 k 点采样网格。经能量收敛测试, 平面波截断能确定为 500 eV, 电子迭代自洽计算的收敛判据为 10^{-6} eV/atom, 离子弛豫自洽计算采用 Davidson+RMM-DIIS 组合算法, 收敛判据为 Hellman-Feynman 原子间力小于 0.1 eV/nm。

2 结果与讨论

2.1 α -Ti 与 ω -Ti 体性质计算

采用不同赝势与交换关联泛函, 计算得到的晶格体结构和体性质会略有不同。

表 1 和 2 为 hcp 结构 α -Ti 与六方结构 ω -Ti 的体相计算结果。经与文献中的实验值和计算值充分对照, 采用赝势和交换关联泛函组合 PAW-PBE_sv 的计算值最为可靠。故后续所有的表面和界面计算均采用 PAW-PBE_sv。

2.2 α/ω 界面位向关系及组成表面的终端结构和表面能

2.2.1 α/ω 界面位向关系确定

高分辨透射电镜 (HRTEM) 表征发现^[16], 该合金在时效过程中, α 相既可以在 β 基体内形核, 也可以在 β/ω

表 1 α -Ti 体相计算结果

Table 1 Calculation results of bulk phase α -Ti			
Method	c/a	$V_0/\times 10^{-3} \text{ nm}^3 \text{ atom}^{-1}$	B_0/GPa
PAW-GGA	1.583	17.05	117.230
PAW-PBE	1.583	17.11	133.961
PAW-LDA	1.575	17.05	116.477
PAW-PBE_pv	1.586	17.11	111.646
PAW-PBE_sv	1.586	17.38	111.352
Exp.	1.583 ^[10]	17.70 \pm 0.05 ^[10]	117.0 \pm 9.0 ^[10]
	1.585 ^[11]	17.74 ^[11]	102.0 ^[11]
	1.587 ^[12]	17.64 ^[12]	114.0 \pm 3.0 ^[12]
Cal.	1.583 ^[13]	17.38 ^[13]	110.2 ^[13]
	1.584 ^[14]	17.37 ^[15]	111.8 ^[15]

表 2 ω -Ti 体相计算结果

Table 2 Calculation results of bulk phase ω -Ti			
Method	c/a	$V_0/\times 10^{-3} \text{ nm}^3 \text{ atom}^{-1}$	B_0/GPa
PAW-GGA	0.620	50.35	116.5
PAW-PBE	0.619	16.85	116.0
PAW-LDA	0.621	17.25	127.7
PAW-PBE_pv	0.6179	17.13	111.89
PAW-PBE_sv	0.6175	17.38	110.8
Exp.	0.609 ^[10]	17.40 \pm 0.08 ^[10]	138.0 \pm 10.0 ^[10]
	0.614 ^[11]	17.37 ^[11]	142.0 ^[11]
	0.613 ^[12]	17.29 ^[12]	107.0 \pm 3.0 ^[12]
Cal.	0.618 ^[13]	17.14 ^[13]	110.51 ^[13]

界面上形核。在 β 基体中形核的 α 相在长大初期, 其成分与 β 基体基本相同, 合金元素没有发生明显的偏聚。而 α 相在 ω/β 相界面上形核这一过程则是通过成排的原子位移切变实现的。这一阶段 α 相的生长方式既可以朝着远离 ω 相的方向向 β 基体生长, 最大程度地形成 α/β 界面, 也可以紧贴着 ω 相生长, 在 β 基体内同时形成 α/ω 和 α/β 界面 (如图 1 所示)。分析图 1 中 HRTEM 照片可以确定, α/ω 界面的基本位向关系为 $(11\bar{2}0)\alpha//(\text{0001})\omega$ 和 $(1\bar{1}00)\alpha//(\text{0}\bar{1}10)\omega$, 这与文献中报道的结果^[17-19]相符。从图 1 中还可以直接观察到, 主要的 α/ω 接触界面为 $\alpha\{1\bar{1}00\}/\omega\{1\bar{1}00\}$ 。

2.2.2 $\alpha\{1\bar{1}00\}$ 与 $\omega\{1\bar{1}00\}$ 的不同表面终端

$\alpha\{1\bar{1}00\}$ 和 $\omega\{1\bar{1}00\}$ 表面的终端面所截取的原子层不同, 所形成的 α/ω 界面原子结构也将不同。如图 2 和 3 所示, $\alpha\{1\bar{1}00\}$ 表面对应有 2 种不同的表面终端, 分别标记为 α 和 α' , 而 $\omega\{1\bar{1}00\}$ 表面对应有 3 种不同的表面终端, 分别标记为 ω 、 ω' 和 ω'' 。可以看到, 图 2 和 3 中表面超胞的每层原子数为 1, 对应着周期性边界条件下超胞可取的最小横截面积。

2.2.3 $\alpha\{1\bar{1}00\}$ 和 $\omega\{1\bar{1}00\}$ 的表面能

无论何种表面终端形式, 通过缺陷热力学总可以把表面能 (σ) 的计算公式表达为^[20]:

$$\sigma = (E_{\text{surf}} - N\mu_0) / 2A \quad (1)$$

可以看到, 式 (1) 中表面超胞的总能 E_{surf} 是对应原子 (或原子层) 数量 N 的一次函数, 其中斜率为单个原子的能量 (即化学势 μ_0), 在 E 轴上的截距为表面能 σ 乘以 $2A$, 这里的 A 为表面超胞的横截面积。通过拟合 E 关于 N 的直线方程, 可以有效地消除表面超胞计算中不同原

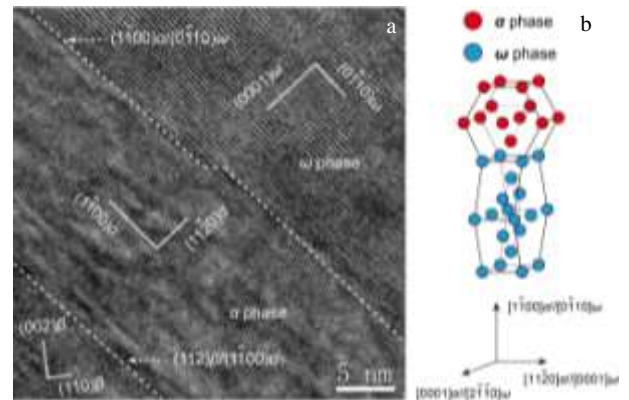


图 1 α/ω 界面高分辨透射电镜像和实测 α/ω 界面位向关系对应的原子模型

Fig.1 HRTEM image of α/ω interface (a) and atomic model corresponding to the experimentally characterized interface orientation relation (b)

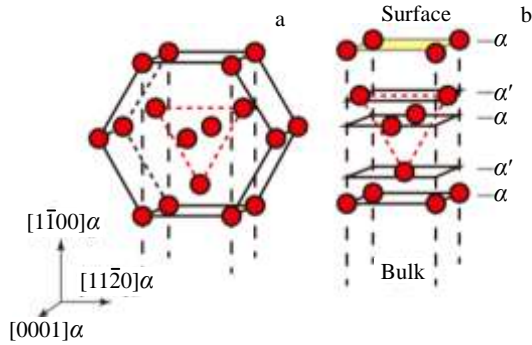


图 2 α -Ti 的晶胞原子示意图和 $\alpha\{1\bar{1}00\}$ 表面的不同终端
Fig.2 Schematic of α -Ti unit cell (a) and different terminations of $\alpha\{1\bar{1}00\}$ (b)

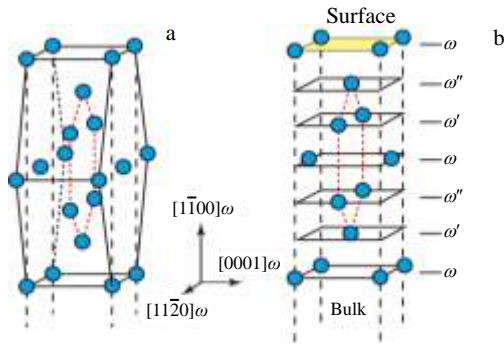


图 3 ω -Ti 的晶胞原子示意图和 $\omega\{1\bar{1}00\}$ 表面的不同终端
Fig.3 Schematic of ω -Ti unit cell (a) and different terminations of $\omega\{1\bar{1}00\}$ (b)

子层数所造成的不同程度的累积误差，获得可靠的表面能 σ 和化学势 μ_0 的计算预测值。

图 4 和图 5 分别为 $\alpha\{1\bar{1}00\}$ 和 $\omega\{1\bar{1}00\}$ 表面的 $E-N$ 计算拟合结果。通过计算直线的截距，获得 $\alpha\{1\bar{1}00\}$ 和 $\omega\{1\bar{1}00\}$ 表面能的计算结果如表 3 所示。可以看到，不同表面终端对应的表面能不同。表面能计算结果与文献

中的计算结果符合较好。

2.3 α/ω 界面原子模型与界面能

由于 $\alpha\{1\bar{1}00\}$ 表面终端有 α 和 α' 2 种，而 $\omega\{1\bar{1}00\}$ 表面终端有 ω 、 ω' 和 ω'' 3 种，因此所形成的 $\alpha\{1\bar{1}00\}/\omega\{1\bar{1}00\}$ 界面，可以存在 6 种不同的共格界面结构，分别为： $\alpha\{1\bar{1}00\}_\alpha/\omega\{1\bar{1}00\}_\omega$ 、 $\alpha\{1\bar{1}00\}_\alpha/\omega\{1\bar{1}00\}_{\omega'}$ 、 $\alpha\{1\bar{1}00\}_\alpha/\omega\{1\bar{1}00\}_{\omega''}$ 、 $\alpha\{1\bar{1}00\}_{\alpha'}/\omega\{1\bar{1}00\}_\omega$ 、 $\alpha\{1\bar{1}00\}_{\alpha'}/\omega\{1\bar{1}00\}_{\omega'}$ 和 $\alpha\{1\bar{1}00\}_{\alpha'}/\omega\{1\bar{1}00\}_{\omega''}$ 。其中 $\alpha\{1\bar{1}00\}_\alpha/\omega\{1\bar{1}00\}_\omega$ 界面超胞如图 6 所示，由等层数的 α 相与 ω 相构建而成，外加一个至少 1.2 nm 的真空层，由此构成共格界面所需克服的应变能较小，为 $\varepsilon(\alpha)=-1.81\%$ ， $\varepsilon(\omega)=+1.88\%$ （沿 $[11\bar{2}0]\alpha/[0001]\omega$ 方向），和 $\varepsilon(\alpha)=-0.79\%$ ， $\varepsilon(\omega)=+0.80\%$ （沿 $[0001]\alpha/[11\bar{2}0]\omega$ 方向）。

界面超胞的总能除了两相的体积能外，还包含：
(a) 错配应变能，即 α 和 ω 相为形成共格界面所需要克服晶格错配的弹性应变能；
(b) 界面化学能，即 α 和 ω 相通过化学成键而形成稳定界面结构所释放的化学能；
(c) 自由表面能，即因建模需要而引入的 2 个额外自由表面的表面能。所有 6 种 $\alpha\{1\bar{1}00\}/\omega\{1\bar{1}00\}$ 界面结构的构建和计算，均采用类似图 6 中的界面超胞和 $15 \times 9 \times 1$ 的 k 网格划分。

通过缺陷热力学，同样可以把界面能 (γ) 表示为：

$$\gamma = \frac{2E_{\text{intf}} - E_\alpha - E_\omega}{2A} \quad (2)$$

其中， A 为界面超胞的横截面积。 E_{intf} 、 E_α 和 E_ω 分别对应于界面超胞、 $\alpha\{1\bar{1}00\}$ 表面超胞和 $\omega\{1\bar{1}00\}$ 表面超胞的总能。这里对 2 个表面超胞的计算，仅需将界面超胞中的 $\alpha\{1\bar{1}00\}$ 替换为等层数的 $\omega\{1\bar{1}00\}$ （或反之），得到与原界面超胞有完全相同的真空层厚度和应变的 $\omega\{1\bar{1}00\}$ 或 $\alpha\{1\bar{1}00\}$ 表面超胞，计算中确保 3 个超胞的形状和大小完全一致，计算参数完全相同，能够最大限度地减少计算误差。这样的计算，界面超胞和表面超胞之间的应

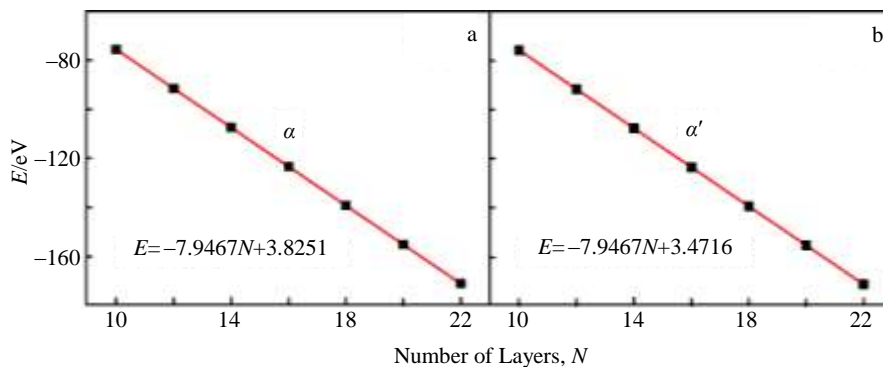


图 4 $\alpha\{1\bar{1}00\}$ 表面的 $E-N$ 计算拟合结果

Fig.4 $E-N$ fitting results: (a) $\sigma\{1\bar{1}00\}_\alpha$ and (b) $\sigma\{1\bar{1}00\}_\alpha'$

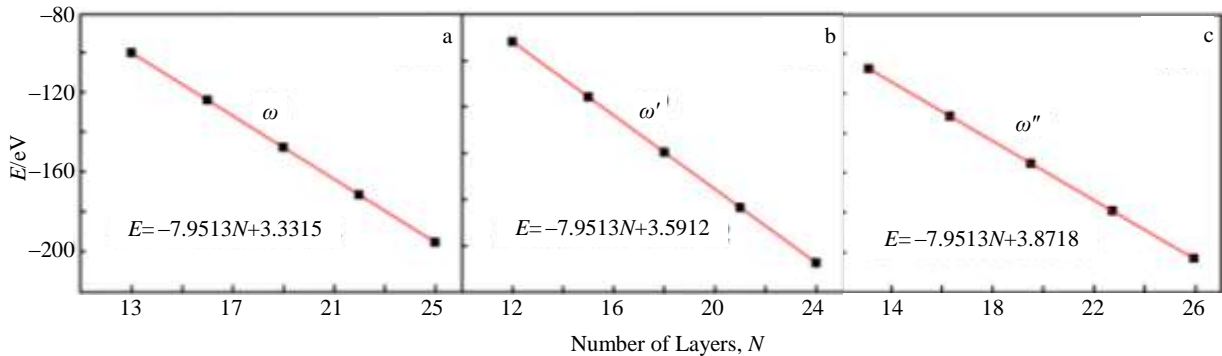


图 5 $\omega\{1\bar{1}00\}$ 表面的 $E-N$ 拟合结果

Fig.5 $E-N$ fitting results: (a) $\sigma\{1\bar{1}00\}_\omega$, (b) $\sigma\{1\bar{1}00\}_\omega'$, and (c) $\sigma\{1\bar{1}00\}_\omega''$

表 3 $\alpha\{1\bar{1}00\}$ 和 $\omega\{1\bar{1}00\}$ 的表面能计算结果
Table 3 Calculation results of surface energy for $\alpha\{1\bar{1}00\}$ and $\omega\{1\bar{1}00\}$

Termination	$\sigma\{1\bar{1}00\}/\text{J m}^{-2}$	
	Present work	Ref.
α	2.241	2.27 ^[21]
α'	2.034	2.04 ^[21]
ω	2.058	-
ω'	2.218	-
ω''	2.391	-

图 7 $\alpha\{1\bar{1}00\}/\omega\{1\bar{1}00\}$ 界面的 4 种高对称性配位类型 (仅描绘最临近界面的原子层)

Fig.7 Four high-symmetrical coordination types of $\alpha\{1\bar{1}00\}/\omega\{1\bar{1}00\}$ (only the interfacial atoms are schematically depicted) bridge、short-bridge 和 on-top 型。

由式 (2) 计算得到的不同终端和界面配位方式的 $\alpha\{1\bar{1}00\}/\omega\{1\bar{1}00\}$ 界面能, 见表 4 和表 5。其中, γ_0 为不包含错配应变能的界面能计算值, γ_ϵ 为包含错配应变能的界面能计算值。可以看到, α/ω _hollow、 α/ω'' _hollow、 α'/ω _bridge、 α'/ω' _bridge 和 α'/ω'' _hollow 配位类型的 $\alpha\{1\bar{1}00\}/\omega\{1\bar{1}00\}$ 界面在界面能值上十分接近 (在表 4 和 5 中用下划线标识), 均远远低于其他配位类型的界面能。可以推断, 这 5 种界面结构在实际情况下可能共存。将这 5 种界面的界面能取算术平均值作为钛中 $\alpha\{1\bar{1}00\}/\omega\{1\bar{1}00\}$ 界面的近似界面能, 得到的结果为: $\gamma_0=0.029 \text{ J/m}^2$ 和 $\gamma_\epsilon=0.100 \text{ J/m}^2$ 。

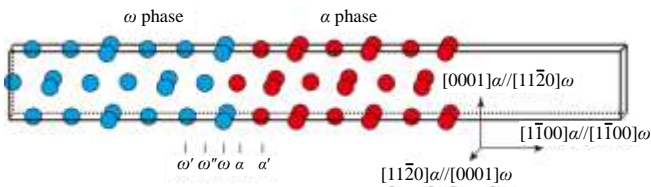


图 6 $\alpha\{1\bar{1}00\}_\alpha/\omega\{1\bar{1}00\}_\omega$ 界面超胞模型

Fig.6 Supercell model of $\alpha\{1\bar{1}00\}_\alpha/\omega\{1\bar{1}00\}_\omega$ interface

变能完全相等, 通过式 (2) 计算得到的界面能将不包含错配应变能。反之, 如果采用式 (1) 和 2.2.2 节中计算的表面超胞总能直接代入, 由于表面超胞构建时不含应变, 故通过式 (2) 计算得到的界面能中将包含错配应变能。

进一步地, 除了表面终端的不同, 对于所构建的 $\alpha\{1\bar{1}00\}/\omega\{1\bar{1}00\}$ 界面, 界面两侧的原子还可能存在 4 种典型的高对称性配位类型, 即图 7 所示的 hollow、

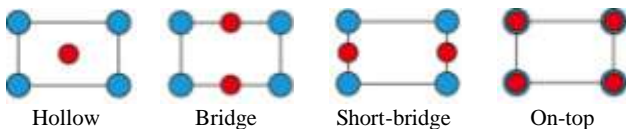


表 4 不含错配应变能的 $\alpha\{1\bar{1}00\}/\omega\{1\bar{1}00\}$ 界面能

Table 4 $\alpha\{1\bar{1}00\}/\omega\{1\bar{1}00\}$ interface energy without misfit strain energy

Termination	$\gamma_0/\text{J m}^{-2}$			
	Hollow	Bridge	Short-bridge	On-top
α/ω	<u>0.022</u>	0.775	2.616	2.541
α/ω'	0.094	0.704	2.773	3.162
α/ω''	<u>0.035</u>	1.145	3.248	3.325
α'/ω	0.099	<u>0.037</u>	1.342	1.384
α'/ω'	0.269	<u>0.031</u>	1.349	2.927
α'/ω''	<u>0.019</u>	0.714	2.085	1.307

表 5 含错配应变的 $\alpha\{1\bar{1}00\}/\omega\{1\bar{1}00\}$ 界面的界面能

Table 5 $\alpha\{1\bar{1}00\}/\omega\{1\bar{1}00\}$ interface energy with misfit strain

Termination	energy			
	$\gamma/J\ m^{-2}$			
	Hollow	Bridge	Short-bridge	On-top
α/ω	<u>0.098</u>	0.851	2.692	2.617
α/ω'	0.192	0.802	2.871	3.260
α/ω''	<u>0.106</u>	1.216	3.318	3.395
α'/ω	0.165	<u>0.104</u>	1.409	1.450
α'/ω'	0.357	<u>0.118</u>	1.436	3.014
α'/ω''	<u>0.080</u>	0.774	2.146	1.367

3 结 论

1) 实测一种 β 型钛合金中的 α/ω 界面位向关系为 $\{11\bar{2}0\}\alpha//\{0001\}\omega$ 和 $\{1\bar{1}00\}\alpha//\{0\bar{1}10\}\omega$, 其中主要的 α/ω 接触界面为 $\alpha\{1\bar{1}00\}/\omega\{1\bar{1}00\}$ 。

2) 采用第一性原理密度泛函方法, 预测了钛中 $\alpha\{1\bar{1}00\}/\omega\{1\bar{1}00\}$ 界面的精细原子结构和相应界面能。根据表面终端和界面原子配位类型的不同, $\alpha\{1\bar{1}00\}/\omega\{1\bar{1}00\}$ 界面有 5 种界面结构在能量上相近, 在实际钛中可能同时出现。

3) 钛中 $\alpha\{1\bar{1}00\}/\omega\{1\bar{1}00\}$ 界面的平均界面能为 $0.100\ J/m^2$ (计入错配应变) 或 $0.029\ J/m^2$ (不计入错配应变)。

参考文献 References

[1] Henning R G, Trinkle D R. *Nature Materials*[J], 2005, 4(2): 129
 [2] Azimzadeh S, Rack H J. *Metallurgical and Materials Transactions A*[J], 1998, 29(10): 2455
 [3] Zhang Tingjie(张廷杰). *Rare Metal Materials and Engineering* (稀有金属材料与工程)[J], 1989(5): 77
 [4] Zhang Shuzhi(张树志), Zhang Changjiang(张长江), Hou Zhao-ping(侯赵平) et al. *Rare Metal Materials and Engineering* (稀有金属材料与工程)[J], 2016, 45(7): 1903

[5] Nag S, Banaerjee R, Srinivasan R et al. *Acta Materialia*[J], 2009, 57(7): 2136
 [6] Prima F, Vermaut P, Texier G et al. *Scripta Materialia*[J], 2006, 54: 645
 [7] Kresse G, Furthmüller J. *Physical Review B*[J], 1996, 54: 11 169
 [8] Kresse G, Joubert D. *Physical Review B*[J], 1999, 59(3): 1758
 [9] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M. *Physical Review Letters*[J], 1996, 77(18): 3865
 [10] Errandonea D, Meng Y, Somayazulu M et al. *Physica B*[J], 2005, 355(1-4): 116
 [11] Vohra Y K, Spencer P T. *Physical Review Letters*[J], 2001, 86(14): 3068
 [12] Zhang J, Zhao Y, Hixson R S et al. *Physical Review B*[J], 2008, 78(5): 54 119
 [13] Hu C E, Zeng Z Y. *Journal of Applied Physics*[J], 2010, 107(9): 2986
 [14] Hao Y J, Zhang L, Chen X R et al. *Solid State Communications* [J], 2008, 146(3-4): 105
 [15] Hao Y J, Zhu J, Zhang L et al. *Solid State Sciences*[J], 2010, 12(8): 1473
 [16] Wan Weifeng(万维锋). *Thesis for Master*(硕士论文)[D]. Changsha: Central South University, 2016.
 [17] Ohmori Y, Ogo T, Nakai K et al. *Materials Science and Engineering A*[J], 2001, 312: 182
 [18] Furuhashi T, Maki T, Makino T. *Journal of Materials Processing Technology*[J], 2001, 117(3): 318
 [19] Li T, Kent D, Sha G et al. *Scripta Materialia*[J], 2015, 104: 75
 [20] Jiang Y, Adams J B. *Journal of Chemical Physics*[J], 2005, 123(6): 201
 [21] Olsson P A T, Mrovec M, Kroon M. *Acta Materialia*[J], 2016, 118: 362

First-principles Calculation of α/ω Interface in Titanium

Zhu Lvqi^{1,2}, Wan Weifeng^{1,2}, Jiang Yong^{1,2,3}, Liu Huiqun^{1,2}, Yi Danqing^{1,2}

(1. Central South University, Changsha 410083, China)

(2. Key Laboratory of Non-ferrous Materials, Ministry of Education, Changsha 410083, China)

(3. State Key Laboratory for Powder Metallurgy, Changsha 410083, China)

Abstract: Based on the experimentally characterized orientation relationship, the first-principles density function theory calculation was performed to study the α/ω interface in titanium. According to different surface termination and interface coordination types, a total of 24 possible atomistic interface models of $\alpha\{1\bar{1}00\}/\omega\{1\bar{1}00\}$ were constructed and calculated. The results show that five interface structures are favored in energy and can co-exist in titanium, and the average interface energy with and without the misfit strain energy is predicted as 0.100 and $0.029\ J/m^2$, respectively.

Key words: titanium; α/ω interface; interface energy; coherent strain; first-principles

Corresponding author: Jiang Yong, Ph. D., Professor, School of Materials Science and Engineering, Central South University, Changsha 410083, P. R. China, Tel: 0086-731-88830263, E-mail: yjiang@csu.edu.cn