

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 539.3

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2022.02.005

## ПЕРЕМЕШИВАНИЕ АТОМОВ НА ГРАНИЦЕ АЛЮМИНИЯ И ТИТАНА ПОД ДЕЙСТВИЕМ ДЕФОРМАЦИОННОЙ ОБРАБОТКИ: АТОМИСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Полина Викторовна Полякова<sup>1†</sup>, Юлия Айдаровна Баимова<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Уфимский государственный нефтяной технический университет, ул. Космонавтов, 1, 450062, Уфа, Россия

<sup>1,2</sup> Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, ул. Степана Халтурина, 39, 450001, Уфа, Россия

<sup>1</sup> polina.polyakowa@yandex.ru<sup>†</sup>, <https://orcid.org/0000-0002-6534-3405>

<sup>2</sup> julia.a.baimova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-5953-1186>

**Аннотация.** В настоящей работе методом молекулярной динамики исследована взаимная диффузия на границе перемешивания Al/Ti под действием деформационной обработки. Проведены испытания полученного композита на растяжение после комбинированного сжатия до степени деформации 0,16. Схема комбинированного сжатия, используемая в настоящей работе, представляет собой упрощение сценария, экспериментально реализованного ранее для получения композитов Al/Cu и Al/Nb. Показано, что одноосное сжатие в сочетании с деформацией сдвига является эффективным способом получения композитной структуры. Установлено, что под действием комбинированного сжатия атомы Al диффундируют в блок Ti легче, чем атомы Ti диффундируют в блок Al. Испытания на растяжение показали, что разрушение происходит в алюминиевой части композита, а значит граница перемешивания атомов Al и Ti прочнее, чем чистая алюминиевая часть.

**Ключевые слова:** композит, молекулярная динамика, алюминий, титан, сдвиговая деформация, механические свойства.

**Благодарности:** Работа поддержана госзаданием ИПСМ РАН.

---

**Для цитирования:** Полякова П.В., Баимова Ю.А. Перемешивание атомов на границе алюминия и титана под действием деформационной обработки: атомистическое моделирование // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2022. Т. 19, № 2. С. 179–187. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2022.02.005.

---

Original article

## ATOMIC MIXING ON THE ALUMINUM / TITANIUM INTERFACE UNDER COMPRESSION: ATOMISTIC SIMULATION

Polina V. Polyakova<sup>1†</sup>, Julia A. Baimova<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Ufa State Petroleum Technological University, Kosmonavtov Str., 1, Ufa, 450062, Russia

<sup>1,2</sup> Institute for Metals Superplasticity Problems of the Russian Academy of Sciences, Khalturina, 39, Ufa, 450001, Russia

<sup>1</sup> polina.polyakowa@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0002-6534-3405>

<sup>2</sup> julia.a.baimova@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-5953-1186>

**Abstract.** In the present work, molecular dynamics simulation is carried out to investigate the atomic mixing on the Al/Ti interface by severe plastic deformation. The tensile response and fracture mechanisms of the obtained interface are studied. The loading scheme applied in the present work is a simplification of the scenario experimentally realized previously to obtain Al/Cu and Al/Nb composites. It is found that uniaxial compression combined with shear deformation is an effective way to obtain the composite structure. The results indicate that the symmetrical atomic movement took place in the Ti/Al interface during deformation. However, Al atoms diffuse into Ti block

easier than Ti atoms diffuse into Al block. Tensile tests showed that fracture took place in the Al part of the final composite sample, which means that the interlayer region where the mixing of Ti and Al atoms observed is stronger than the pure Al part.

**Keywords:** composite, molecular dynamics, aluminum, titanium, shear strain, mechanical properties.

**Acknowledgements:** The work is supported by the State Assignment of IMSP RAS.

**For citation:** Polyakova, P. V. & Baimova, J. A. (2022). Atomic mixing on the aluminum and titanium interface under compression: atomistic simulation. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 2(19), 179–187. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2022.02.005.

## Введение

Композиты на основе алюминия (Al) являются хорошо известными материалами с превосходными свойствами, такими как малый вес и высокая коррозионная стойкость, что в результате открывает широкую перспективу их применения в аэрокосмической, авиационной, автомобильной промышленности [1-5]. Прочностные свойства чистого алюминия являются довольно низкими. Однако эти механические свойства могут быть сильно улучшены, если армировать алюминий более прочными фазами. Одним из таких металлов, который может способствовать упрочнению алюминия, является титан (Ti), так как данный металл имеет низкую плотность, высокую удельную прочность и повышенную коррозионную стойкость [6]. Для композитов с алюминиевой матрицей требуются дополнительные армирующие элементы из-за анизотропии вязкого разрушения и малого удлинения до разрушения при температурах ниже 700 °C [7-11].

К настоящему времени изучено несколько методов получения композитов Al/Ti с улучшенными механическими свойствами. Наиболее перспективными являются холодная сварка [12], сварка взрывом [13] и консолидация порошков методом кручения под квазигидростатическим давлением (КГД) [14]. Метод КГД ранее успешно применялся для получения *in-situ* композитов из отдельных металлических пластин Al/Nb, Al/Ti, Al/Cu [15-21]. Обработка методом КГД может значительно увеличить диффузию в структуре при сжатии за счет наличия высокой плотности вакансий, дислокаций и границ зерен. Это приводит к образованию интерметаллидных фаз и упрочнению материала. В соответствии с фазовой диаграммой можно обнаружить несколько интерметаллидных фаз, таких как  $TiAl_3$ , которые можно полу-

чить при более низких температурах, или другие интерметаллидные фазы,  $Ti_3Al$ ,  $TiAl$  и  $TiAl_2$ , которые, как ожидается, образуются при высоких температурах. Как известно, образование интерметаллидных фаз в системе Ti/Al существенно зависит от скорости диффузии атомов Ti и Al. Известно, что Al доминирует в процессе диффузии при температурах ниже точки плавления Al ( $T_{пл}=660,3$  °C) [22, 23]. Однако процесс перемешивания атомов на границе раздела двух металлов при КГД ранее был малоизучен, поскольку этот метод является достаточно новым для изготовления композитов.

В экспериментах подобные особенности структурных и фазовых превращений не всегда возможно рассмотреть в деталях. Однако это можно сделать с помощью методов компьютерного моделирования. Метод молекулярной динамики (МД) – это мощный инструмент для изучения различных структурных превращений на атомистическом уровне, что позволяет отслеживать структурные и фазовые превращения при деформации или отжиге, в частности, проследить за движением атомов в системе. Ранее МД применяли для исследования механических свойств композитов различного состава [24-26] и, изучения атомного смещения и отклика на растяжение композитов Al/Cu и Al/Mg [27-29].

Целью данной работы является изучение процесса взаимной диффузии атомов Al и Ti на границе между разнородными металлами под действием деформационной обработки. В качестве деформационной обработки выбрано одноосное сжатие перпендикулярное границе перемешивания атомов, в комбинации с деформацией сдвига в плоскости границы. Для исследования прочности и механизмов разрушения полученной композитной структуры проводится испытание на растяжение.

### Детали моделирования

Атомная структура Al/Ti представляет собой двухслойный образец, состоящий из слоя Ti (ГПУ-решетка – верхняя часть кристалла) и слоя Al (ГЦК-решетка, нижняя часть кристалла). Параметры решеток:  $a_{Ti} = 2,951 \text{ \AA}$ ,  $c_{Ti} = 4,697 \text{ \AA}$  и  $a_{Al} = 4,05 \text{ \AA}$ . Размеры начальной структуры:  $L_x = L_y = L_z \approx 100 \text{ \AA}$ . Расстояние между двумя кристаллами принимается равным среднему значению параметров решетки обоих металлов  $(a_{Ti} + a_{Al})/2$ , что составляет  $3,5 \text{ \AA}$ . Периодические граничные условия применяются во всех направлениях. Структура изначально подвергается релаксации при 300 К для нахождения структурной конфигурации с минимальной потенциальной энергией.

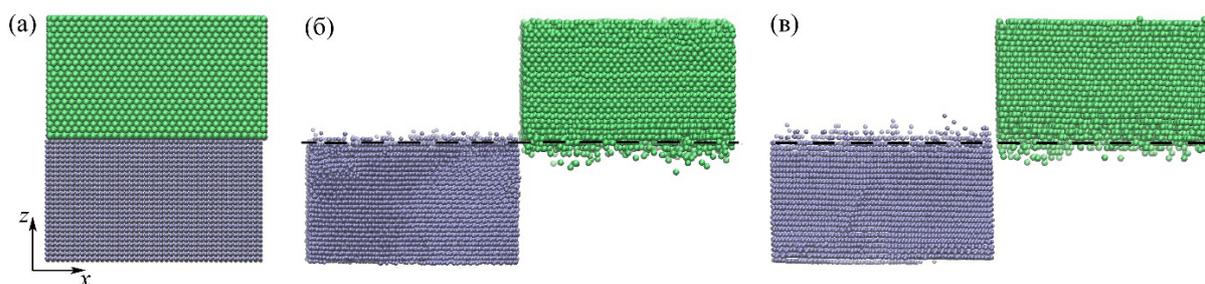
Исследование проводится с использованием свободно распространяемого программного пакета LAMMPS. В системе поддерживается постоянная температура 300 К при помощи термостата Носе-Хувера. Используется алгоритм Верле с шагом интегрирования 2 фс. Визуализация данных моделирования и структурный анализ выполняются с использованием инструментов VMD [30] и OVITO [31]. В качестве межатомного потенциала для системы Ti/Al выбран потенциал EAM [32], который демонстрирует результаты, хорошо согласующиеся как с экспериментальным, так и с численными данными о различных свойствах в системе Ti/Al [32-34]. В работе [35] было изучено деформационное поведение Ti/Al с использованием различных потенциалов при одноосном растяжении в широком диапазоне температур. Показано, что этот потенциал может быть успешно использован для изучения механических свойств. Данный потенциал также подходит для описания механизмов деформации [34, 36] и разрушения [37] системы Ti/Al.

Для изучения процесса формирования композитной структуры Ti/Al применяется одноосное сжатие, перпендикулярное границе перемешивания атомом, вдоль оси  $z$  ( $\varepsilon_{zz}$ ), в сочетании с деформацией сдвига в плоскости  $xy$  ( $\varepsilon_{xy}$ ). Подобная деформационная обработка отчасти воспроизводит экспериментальное получение композитов методом КГД [15-21]. Скорости деформации составляют:  $\dot{\varepsilon}_{zz} = 6,2 \times 10^{-8} \text{ пс}^{-1}$  и  $\dot{\varepsilon}_{xy} = 6,2 \times 10^{-7} \text{ пс}^{-1}$ .

Для изучения процесса формирования композитной структуры Ti/Al применяется одноосное сжатие, перпендикулярное границе перемешивания атомом, вдоль оси  $z$  ( $\varepsilon_{zz}$ ), в сочетании с деформацией сдвига в плоскости  $xy$  ( $\varepsilon_{xy}$ ). Подобная деформационная обработка отчасти воспроизводит экспериментальное получение композитов методом КГД [15-21]. Скорости деформации составляют:  $\dot{\varepsilon}_{zz} = 6,2 \times 10^{-8} \text{ пс}^{-1}$  и  $\dot{\varepsilon}_{xy} = 6,2 \times 10^{-7} \text{ пс}^{-1}$ .

### Результаты и обсуждение

На рис.1 представлены структуры в процессе сжатия, где (а) начальная структура, (б) при деформации сжатия 0,04 и (в) при деформации сжатия 0,16 (блок Ti на рисунке сдвинут вправо на  $100 \text{ \AA}$  для лучшей визуализации перемешивания атомов). Активное перемешивание атомов Al и Ti происходит уже на начальных стадиях деформирования (до  $\varepsilon_{zz} = 0,04$ ).



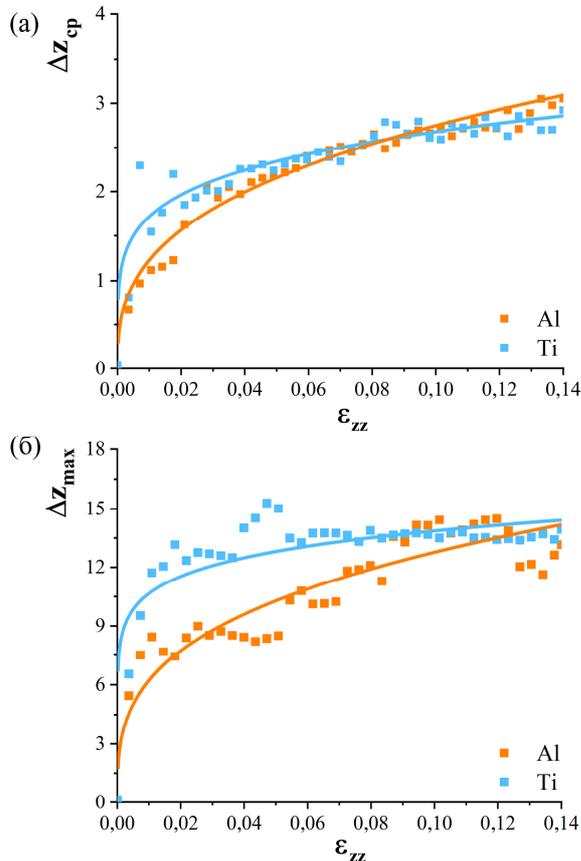
**Рис.1.** (а) Начальная структура Ti/Al. (б, в) Взаимная диффузия атомов Ti и Al при 300 К при  $\varepsilon_{zz}=0,04$  (б) и  $\varepsilon_{zz}=0,16$  (в). Зелеными показаны атомы Ti, синим – атомы Al. Черная пунктирная линия соответствует начальному положению границы раздела Ti/Al.

**Fig.1.** (a) Initial structure. (b,c) Snapshots of the mutual diffusion of Ti and Al atoms at 300 K at  $\varepsilon_{zz}=0.04$  (b) and  $\varepsilon_{zz}=0.16$  (c). The green and blue atoms represent Ti and Al, respectively. The black dashed lines represent the initial positions of Ti/Al interface

Процесс миграции атомов можно описать средним и максимальным расстояниями атомного смещения по сравнению с начальным положением границы (рис.2а,б). Видно (рис.2а), что при сжатии до деформации  $\varepsilon_{zz} = 0,09$  атомы Ti ведут себя ак-

тивнее, чем атомы Al, однако после  $\varepsilon_{zz} = 0,09$  атомы Ti практически больше не продвигаются вглубь блока Al. В результате при  $\varepsilon_{zz}=0,16$  количество атомов Al, диффундирующих в блок Ti, больше, чем количество атомов Ti, диффунди-

рующих в блок Al. Это можно объяснить различием их атомных радиусов ( $r_{Al} = 1,43 \text{ \AA}$ ,  $r_{Ti} = 1,47 \text{ \AA}$ ), масс ( $m_{Al} = 26,98 \text{ г/моль}$ ,  $m_{Ti} = 47,867 \text{ г/моль}$ ) и температуры плавления ( $T_{Al} = 660 \text{ }^\circ\text{C}$ ,  $T_{Ti} = 1668 \text{ }^\circ\text{C}$ ).

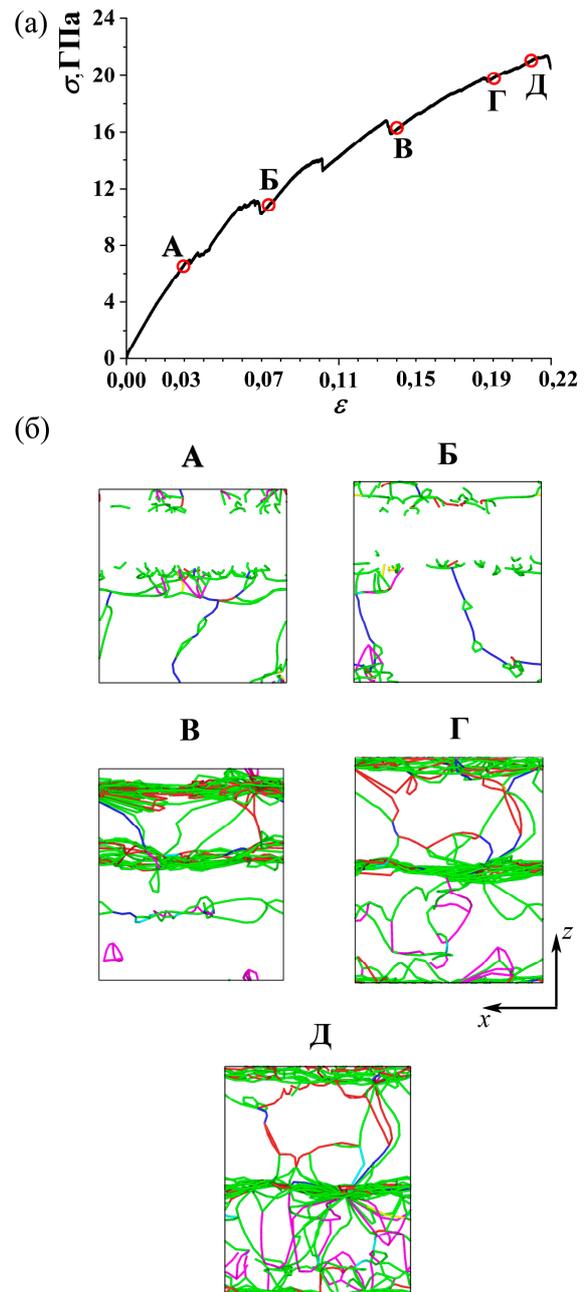


**Рис.2.** Изменение положений атомов  $\Delta z$  в зависимости от степени сжатия: (а) среднее значение, (б) максимальное

**Fig.2.** Changes of the atomic positions  $\Delta z$  as the function of compression strain

Для исследования механических свойств полученной композитной структуры проводится одноосное растяжение нормально границе перемешивания атомов после комбинированного сжатия до  $\varepsilon_{zz} = 0,16$ . На рис.3а представлена кривая напряжение-деформация. Процесс начинается с упругой деформации (примерно до  $\varepsilon_{zz} = 0,03$ ). Разрушение происходит в алюминиевой части композита при растягивающем напряжении  $\sigma_{zz} = 22 \text{ ГПа}$  и степени деформации  $\varepsilon = 0,215$ . Во время пластической деформации на кривой напряжение-деформация наблюдаются несколько скачков напряжения, которые можно объяснить высвобождением энергии, накопленной во время деформации, за счет активности дефектов.

Анализ дислокационной структуры осуществляется с помощью программы OVITO [31]. Дислокации окрашены в соответствии с векторами Бюргерса: зеленым цветом показаны неполные или частичные дислокации (дислокации Шокли), синим – полные (единичные) дислокации, розовым – дислокации Ломер-Коттрелла, голубым – дислокации Франка.



**Рис.3.** (а) Кривая напряжение-деформация при растяжении нормально границе перемешивания атомов Ti/Al. (б) Дислокационный анализ структуры

**Fig.3.** (a) Stress-strain curve during tension normal to the interface. (b) Dislocation analysis of the structure

В процессе упругой деформации наблюдается изменение дислокационной структуры. Как видно, с увеличением деформации растяжения количество дислокаций значительно увеличивается. Большинство дислокаций сосредоточено на границе перемешивания двух металлов. В Al части композита заметно больше дислокаций, чем в Ti, что связано с разными механизмами деформации ГЦК- и ГПУ-металлов.

Также проводится анализ общих соседей (анализ типа кристаллической решетки) в процессе растяжения. Показано, что после сжатия до  $\varepsilon_{zz} = 0,16$  в Ti части образца преобладает ОЦК-решетка, а пограничная область со смешанными атомами Al и Ti имеет ГЦК-решетку. Появление ОЦК-решетки происходит из-за приложенного большого давления, что также было показано в экспериментах. В процессе растяжения решетка титана восстанавливается (появляются участки ГПУ-решетки), в результате чего на кривой растяжения наблюдаются скачки напряжения.

### Заключение

В настоящей работе изучен процесс формирования композита Ti/Al из двух первоначально разделенных кристаллов под действием деформационной обработки. Предлагаемая модель является упрощением сценария, экспериментально наблюдавшегося ранее в [15-21]. В экспериментах образцы представляют собой поликристаллы, в настоящей работе рассматривается монокристалл. Однако даже такая простая модель позволяет изучить механизмы перемешивания атомов на границе Ti и Al.

Установлено, что одноосное сжатие в сочетании со сдвиговой деформацией является эффективным способом получения композитной структуры. Сдвиговая деформация играет наиболее важную роль и значительно ускоряет перемешивание атомов. Анализ диффузии атомов на границе двух металлов показывает, что атомы Al диффундируют в блок Ti легче, чем атомы Ti диффундируют в блок Al.

Однако для понимания влияния различных факторов на процесс диффузии в бинарной системе Al/Ti необходимы дальнейшие исследования.

### Список литературы

1. Shao C., Zhao S., Wang X., Zhu Y., Zhang Z., Ritchie R. O. Architecture of high-strength aluminum-matrix composites processed by a novel microcasting technique // *NPG Asia Mat.* 2019. V. 11. P. 69.
2. Kim Y.-W., Kim S.-L. Advances in gammalloy materials-processes-application technology: Successes, dilemmas, and future // *JOM.* 2018. V. 70. P. 553–560.
3. Bewlay B.P., Nag S., Suzuki A., Weimer M.J. TiAl alloys in commercial aircraft engines // *Mat. at High Temp.* 2016. V. 33. P. 549–559.
4. Shouren W., Peiquan G., Liying Y. Centrifugal precision cast TiAl turbocharger wheel using ceramic mold // *J. Mater. Process. Techn.* 2008. V. 204. P. 492–497.
5. Tetsui T., Kobayashi T., Ueno T., Harada H. Consideration of the influence of contamination from oxide crucibles on TiAl cast material, and the possibility of achieving low-purity TiAl precision cast turbine wheels // *Intermetallics.* 2012. V. 31. P. 274–281.
6. Fan M., Domblesky J., Jin K., Qin L., Cui S., Guo X., Kim N., Tao J. Effect of original layer thicknesses on the interface bonding and mechanical properties of TiAl laminate composite // *Mater. Des.* 2016. V. 99. P. 535–542.
7. Li W., Yang Y., Liu J., Zhou Y., Li M., Wen S., Wei Q., Yan C., Shi Y. Enhanced nano-hardness and new insights into texture evolution and phase transformation of TiAl/TiB<sub>2</sub> in-situ metal matrix composites prepared via selective laser melting // *Acta Mater.* 2017. V. 136. P. 90–104.
8. Lapin J., Kamyshnykova K. Processing, microstructure and mechanical properties of in-situ Ti<sub>3</sub>AlTiAl matrix composite reinforced with Ti<sub>2</sub>AlC particles prepared by centrifugal casting // *Intermetallics.* 2018. V. 98. P. 34–44.
9. Wu H., Leng J., Teng X., Fan G., Geng L., Liu Z. Strain partitioning behavior of in situ Ti<sub>5</sub>Si<sub>3</sub>/TiAl composites // *J. Alloy Compd.* 2018. V. 744. P. 182–186.
10. Murr L., Gaytan S., Ceylan A., Martinez E., Martinez J., Hernandez D., Machado B., Ramirez D., Medina F., Collins S. Characterization of titanium aluminide alloy components fabricated by additive manufacturing using electron beam melting // *Acta Mater.* 2010. V. 58. P. 1887–1894.
11. Kenel C., Grolimund D., Fife J., Samson V., Petegem S.V., Swygenhoven H.V., Leinenbach C. Combined in situ synchrotron micro X-ray dif-

- fraction and high-speed imaging on rapidly heated and solidified Ti-48Al under additive manufacturing conditions // *Scripta Mater.* 2016. V. 114. P. 117–120.
12. Ma M., Huo P., Liu W., Wang G., Wang D., Microstructure and mechanical properties of Al/Ti/Al laminated composites prepared by roll bonding // *Mater. Sci. Eng., A.* 2015. V. 636. P. 301–310.
13. Bazarnik P., Adamczyk-Cieslak B., Gałka A., Płonka B., Sniezek L., Cantoni M., Lewandowska M. Mechanical and microstructural characteristics of Ti6Al4V/AA2519 and Ti6Al4V/AA1050/AA2519 laminates manufactured by explosive welding // *Mater. Des.* 2016. V. 111. P. 146–157.
14. Sun Y., Aindow M., Hebert R.J., Langdon T.G., Lavernia E.J. High-pressure torsion-induced phase transformations and grain refinement in Al/Ti composites // *J. Mater. Sci.* 2017. V. 52. P. 12170–12184.
15. Mulyukov R.R., Korznikova G.F., Nazarov G.F., Khisamov R.K., Sergeev S.N., Shayakhmetov R.U., Khalikova G.R., Korznikova E.A. Annealing-induced phase transformations and hardness evolution in Al-Cu-Al composites obtained by high-pressure torsion // *Acta Mech.* 2021. V. 232. P. 1815–1828.
16. Korznikova G., Korznikova E., Nazarov K., Shayakhmetov R., Khisamov R., Khalikova G., Mulyukov R. Structure and mechanical behavior of Al-Nb hybrids obtained by high-pressure-torsion-induced diffusion bonding and subsequent annealing // *Adv. Eng. Mater.* 2020. V. 23. P. 2000757.
17. Khalikova G., Korznikova G., Nazarov K., Khisamov R., Sergeev S., Shayakhmetov R., Mulyukov R. On the possibility of applying severe plastic deformation by high pressure torsion for the manufacture of Al-Nb metal matrix composites // *Lett. Mater.* 2020. V. 10. P. 475–480.
18. Korznikova G., Nazarov K., Khisamov R., Sergeev S., Shayakhmetov R., Khalikova G., Baimova J., Glezer A., Mulyukov R. Intermetallic growth kinetics and microstructure evolution in Al-Cu-Al metal-matrix composite processed by high pressure torsion // *Mater. Lett.* 2019. V. 253. P. 412–415.
19. Danilenko V., Sergeev S., Baimova J., Korznikova G., Nazarov K., Khisamov R.K., Glezer A., Mulyukov R. An approach for fabrication of Al-Cu composite by high pressure torsion // *Mater. Lett.* 2019. V. 236. P. 51–55.
20. Kawasaki M., Han J.-K., Lee D.-H., Jang J.-il, Langdon T.G. Fabrication of nanocomposites through diffusion bonding under high-pressure torsion // *J. Mater. Res.* 2018. V. 33. P. 2700–2710.
21. Bartkowska A., Bazarnik P., Huang Y., Lewandowska M., Langdon T. G. Using high-pressure torsion to fabricate an Al-Ti hybrid system with exceptional mechanical properties // *Mater. Sci. Eng., A.* 2021. V. 799. P. 140114.
22. Peng L., Wang J., Li H., Zhao J., He L. Synthesis and microstructural characterization of Ti-Al<sub>3</sub>Ti metal-intermetallic laminate (MIL) composites // *Scripta Mat.* 2005. V. 52. P. 243–248.
23. Thiyaneshwaran N., Sivaprasad K., Ravisankar B. Work hardening behavior of Ti/Al-based metal intermetallic laminates // *Int. J. Adv. Manuf. Tech.* 2019. V. 93. P. 361–374.
24. Ding S., Wang X. Strain rate and temperature effects on the mechanical properties of TiN/VN composite: Molecular dynamics study // *J. Alloy Compd.* 2020. V. 814. P. 152151.
25. Su M., Deng Q., An M., Liu L., Chen L. Role of amorphous layer and interfaces on the tensile behaviors of triple-phase Ti/Ni nanolaminates: A molecular dynamic study // *J. Alloy Compd.* 2021. V. 868. P. 159282.
26. Han X., Liu P., Sun D., Wang Q. Molecular dynamics simulations of the tensile responses and fracture mechanisms of Ti<sub>2</sub>AlN/TiAl composite // *Theor. Appl. Fract. Mech.* 2019. V. 101. P. 217–223.
27. Polyakova P.V., Baimova J.A. Molecular dynamics simulation of diffusion in Mg-Al system under pressure // *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.* 2021. V. 1008. P. 012052.
28. Polyakova P.V., Nazarov K.S., Khisamov R.K., Baimova J.A. Molecular dynamics simulation of structural transformations in Cu-Al system under pressure // *J. Phys. Conf. Ser.* 2020. V. 1435. P. 012065.
29. Polyakova P.V., Pukhacheva J.A., Shcherbinin S.A., Baimova J.A., Mulyukov R.R. Fabrication of magnesium-aluminum composites under high-pressure torsion: Atomistic simulation // *Appl. Sci.* 2021. V. 11. P. 6801.
30. VMD [Электронный ресурс] / Официальный сайт <https://www.ks.uiuc.edu/>. Дата обращения 12.04.2022.
31. OVITO [Электронный ресурс] / Официальный сайт <https://www.ovito.org>. Дата обращения 12.04.2022.
32. Zope R. R., Mishin Y. Interatomic potentials for atomistic simulations of the Ti-Al sys-

tem // *Phys. Rev. B*. 2003. V. 68. P. 024102

33. Xu D., Wang H., Yang R., Veyssi re P. Molecular dynamics investigation of deformation twinning in TiAl sheared along the pseudotwinning direction // *Acta Mater.* 2008. V. 56. P. 1065–1074.

34. Kanani M., Hartmaier A., Janisch R. Stacking fault based analysis of shear mechanisms at interfaces in lamellar TiAl alloys // *Acta Mater.* 2016. V. 106. P. 208–218.

35. Pei Q.-X., Jhon M., Quek S. S., Wu Z. A systematic study of interatomic potentials for mechanical behaviors of Ti-Al alloys // *Comp. Mat. Sci.* 2021. V. 188. P. 110239.

36. Chauniyal A., Janisch R. Influence of lattice misfit on the deformation behavior of 2/lamellae in TiAl alloys // *Mater. Sci. Eng., A*. 2020. V. 796 P. 140053.

37. Neogi A., Alam M., Hartmaier A., Janisch R. Anisotropic failure behavior of ordered intermetallic TiAl alloys under pure model loading // *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 2020. V. 28. P. 065016.

#### Информация об авторах

П. В. Полякова – магистрант Уфимского государственного нефтяного технического университета, стажер-исследователь Института проблем сверхпластичного металлов РАН.

Ю. А. Баимова – доктор физико-математических наук, профессор РАН, заведующая лабораторией Института проблем сверхпластичного металлов РАН.

#### References

1. Humphreys, Shao, C., Zhao, S., Wang, X., Zhu, Y., Zhang, Z. & Ritchie, R. O. (2019). Architecture of high-strength aluminum-matrix composites processed by a novel microcasting technique. *NPG Asia Mat.*, 11. 69.

2. Kim, Y.-W. & Kim, S.-L. (2018). Advances in gammalloy materials-processes-application technology: Successes, dilemmas, and future. *JOM.*, 70. 553–560.

3. Bewlay, B. P., Nag, S., Suzuki, A. & Weimer, M. J. (2016). TiAl alloys in commercial aircraft engines. *Mat. at High Temp.*, 33. 549–559.

4. Shouren, W., Peiquan, G. & Liying, Y. (2008) Centrifugal precision cast TiAl turbo-charger wheel using ceramic mold. *J. Mater. Proc-*

*ess. Techn.*, 204. 492–497.

5. Tetsui, T., Kobayashi, T., Ueno, T. & Harada, H. (2012). Consideration of the influence of contamination from oxide crucibles on TiAl cast material, and the possibility of achieving low-purity TiAl precision cast turbine wheels. *Intermetallics.*, 31. 274–281.

6. Fan, M., Domblesky, J., Jin, K., Qin, L., Cui, S., Guo, X., Kim, N. & Tao, J. (2016). Effect of original layer thicknesses on the interface bonding and mechanical properties of TiAl laminate composite. *Mater Des.*, 99. 535–542.

7. Li, W., Yang, Y., Liu, J., Zhou, Y., Li, M., Wen, S., Wei, Q., Yan, C. & Shi, Y. (2017). Enhanced nano-hardness and new insights into texture evolution and phase transformation of TiAl/TiB 2 in-situ metal matrix composites prepared via selective laser melting. *Acta Mater.*, 136. 90–104.

8. Lapin, J. & Kamyshnykova, K. (2018). Processing, microstructure and mechanical properties of in-situ Ti<sub>3</sub>AlTiAl matrix composite reinforced with Ti<sub>2</sub>AlC particles prepared by centrifugal casting. *Intermetallics.*, 98. 34–44.

9. Wu, H., Leng, J., Teng, X., Fan, G., Geng, L. & Liu, Z. (2018). Strain partitioning behavior of in situ Ti<sub>5</sub>Si<sub>3</sub>/TiAl composites. *J. Alloy Compd.*, 744. 182–186.

10. Murr, L., Gaytan, S., Ceylan, A., Martinez, E., Martinez, J., Hernandez, D., Machado, B., Ramirez, D., Medina, F. & Collins, S. (2010). Characterization of titanium aluminide alloy components fabricated by additive manufacturing using electron beam melting. *Acta Mater.*, 58. 1887–1894.

11. Kenel, C., Grolimund, D., Fife, J., Samson, V., Petegem, S. V., Swygenhoven, H. V. & Leinenbach, C. (2016). Combined in situ synchrotron micro X-ray diffraction and high-speed imaging on rapidly heated and solidified Ti–48Al under additive manufacturing conditions. *Scripta Mater.*, 114. 117–120.

12. Ma, M., Huo, P., Liu, W., Wang, G. & Wang, D. (2015). Microstructure and mechanical properties of Al/Ti/Al laminated composites prepared by roll bonding. *Mater. Sci. Eng., A*, 636. 301–310.

13. Bazarnik, P., Adamczyk-Cieslak, B., Gałka, A., Płonka, B., Sniezek, L., Cantoni, M. & Lewandowska, M. (2016). Mechanical and microstructural characteristics of Ti6Al4V/AA2519 and Ti6Al4V/AA1050/AA2519 laminates manufactured by explosive welding. *Mater. Des.*, 111. 146–

- 157.
14. Sun, Y., Aindow, M., Hebert, R. J., Langdon, T. G. & Lavernia, E. J. (2017). High-pressure torsion induced phase transformations and grain refinement in Al/Ti composites. *J. Mater. Sci.*, 52. 12170–12184.
15. Mulyukov, R. R., Korznikova, G. F., Nazarov, G. F., Khisamov, R. K., Sergeev, S. N., Shayachmetov, R. U., Khalikova, G. R. & Korznikova, E. A. (2021). Annealing-induced phase transformations and hardness evolution in Al–Cu–Al composites obtained by high-pressure torsion. *Acta Mech.*, 232. 1815–1828.
16. Korznikova, G., Korznikova, E., Nazarov, K., Shayakhmetov, R., Khisamov, R., Khalikova, G. & Mulyukov, R. (2020). Structure and mechanical behavior of Al–Nb hybrids obtained by high-pressure-torsion-induced diffusion bonding and subsequent annealing. *Adv. Eng. Mater.*, 23. 2000757.
17. Khalikova, G., Korznikova, G., Nazarov, K., Khisamov, R., Sergeev, S., Shayakhmetov, R. & Mulyukov, R. (2020). On the possibility of applying severe plastic deformation by high pressure torsion for the manufacture of Al–Nb metal matrix composites. *Lett. Mater.*, 10. 475–480.
18. Korznikova, G., Nazarov, K., Khisamov, R., Sergeev, S., Shayachmetov, R., Khalikova, G., Baimova, J., Glezer, A. & Mulyukov, R. (2019). Intermetallic growth kinetics and microstructure evolution in Al–Cu–Al metal-matrix composite processed by high pressure torsion. *Mater. Lett.*, 253. 412–415.
19. Danilenko, V., Sergeev, S., Baimova, J., Korznikova, G., Nazarov, K., Khisamov, R. K., Glezer, A. & Mulyukov, R. (2019). An approach for fabrication of Al–Cu composite by high pressure torsion. *Mater. Lett.*, 236. 51–55.
20. Kawasaki, M., Han, J.-K., Lee, D.-H., Jang, J.-il, Langdon, T. G. (2018). Fabrication of nanocomposites through diffusion bonding under high-pressure torsion. *J. Mater. Res.*, 33. 2700–2710.
21. Bartkowska A., Bazarnik P., Huang Y., Lewandowska M. & Langdon T. G. (2021). Using high-pressure torsion to fabricate an Al–Ti hybrid system with exceptional mechanical properties. *Mater. Sci. Eng., A.*, 799. 140114.
22. Peng, L., Wang, J., Li, H., Zhao, J. & He, L. (2005). Synthesis and microstructural characterization of Ti–Al<sub>3</sub>Ti metal-intermetallic laminate (MIL) composites. *Scripta Mat.*, 52. 243–248.
23. Thiyaneshwaran, N., Sivaprasad, K. & Ravisankar, B. (2019). Work hardening behavior of Ti/Al-based metal intermetallic laminates. *Int. J. Adv. Manuf. Tech.*, 93. 361–374.
24. Ding, S. & Wang, X. (2020). Strain rate and temperature effects on the mechanical properties of TiN/VN composite: Molecular dynamics study. *J. Alloy Compd.*, 814. 152151.
25. Su, M., Deng, Q., An, M., Liu, L. & Chen, L. (2021). Role of amorphous layer and interfaces on the tensile behaviors of triple-phase Ti/Ni nanolaminates: A molecular dynamic study. *J. Alloy Compd.*, 868. 159282.
26. Han, X., Liu, P., Sun, D. & Wang, Q. (2019). Molecular dynamics simulations of the tensile responses and fracture mechanisms of Ti<sub>2</sub>AlN/TiAl composite. *Theor. Appl. Fract. Mech.*, 101. 217–223.
27. Polyakova, P. V. & Baimova, J. A. (2021). Molecular dynamics simulation of diffusion in Mg–Al system under pressure. *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.*, 1008. 012052.
28. Polyakova, P. V., Nazarov, K. S., Khisamov, R. K. & Baimova, J. A. (2020). Molecular dynamics simulation of structural transformations in Cu–Al system under pressure. *J. Phys. Conf. Ser.*, 1435. 012065.
29. Polyakova, P. V., Pukhacheva, J. A., Shcherbinin, S. A., Baimova, J. A. & Mulyukov, R. R. (2021). Fabrication of magnesium-aluminum composites under high-pressure torsion: Atomistic simulation. *Appl. Sci.*, 11. 6801.
30. VMD Electronic resource] / Official site <https://www.ks.uiuc.edu/>. Date of the application 12.04.2022.
31. OVITO Electronic resource] / Official site <https://www.ovito.org>. Date of the application 12.04.2022.
32. Zope, R. R. & Mishin, Y. (2003). Interatomic potentials for atomistic simulations of the Ti–Al system. *Phys. Rev. B.*, 68. 024102.
33. Xu, D., Wang, H., Yang, R. & Veysseyre, P. (2008). Molecular dynamics investigation of deformation twinning in TiAl sheared along the pseudotwinning direction. *Acta Mater.*, 56. 1065–1074.
34. Kanani, M., Hartmaier, A. & Janisch, R. (2016). Stacking fault based analysis of shear mechanisms at interfaces in lamellar TiAl alloys. *Acta Mater.*, 106. 208–218.
35. Pei, Q.-X., Jhon, M., Quek, S. S. & Wu, Z. (2020). A systematic study of interatomic potentials for mechanical behaviors of Ti–Al alloys. *Comp. Mat. Sci.* 188. 110239.

36. Chauniyal, A. & Janisch, R. (2020). Influence of lattice misfit on the deformation behavior of  $\alpha$ /lamellae in TiAl alloys. *Mater. Sci. Eng., A.*, 796 140053.

37. Neogi, A., Alam, M., Hartmaier, A. & Janisch, R. (2020). Anisotropic failure behavior of ordered intermetallic TiAl alloys under pure model loading. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.*, 28. 065016.

*P. V. Polyakova – undergraduate of the Ufa State Petroleum Technological University, Trainee Reseacher of the Institute for Metals Superplasticity Problems of the Russian Academy of Sciences.*

*J. A. Baimova – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor of the Russian Academy of Sciences, Head of the Laboratory of the Institute for Metals Superplasticity Problems of the Russian Academy of Sciences.*

### ***Information about the authors***

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.  
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 12.04.2022; одобрена после рецензирования 22.04.2022; принята к публикации 28.04.2022.

The article was received by the editorial board on 12 Apr. 22; approved after reviewing on 22 Apr. 22; accepted for publication on 28 Apr. 22.