

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 539.911

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2025.01.011

СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В ИНТЕРМЕТАЛЛИДЕ NiAl ПРИ ОДНООСНЫХ ВЫСОКОСКОРОСТНЫХ ДЕФОРМАЦИЯХ В ОТСУТСТВИИ ДИССИПАЦИИ ЭНЕРГИИ

Михаил Дмитриевич Старостенков^{1†}, Евгений Викторович Лакман², Цзян Би³, Гоцзян Донг⁴, Нгуен Чонг Хоанг Чунг⁵

^{1,2} Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, пр. Ленина, 46, 656038, Барнаул, Россия

^{3,4} Яншаньский университет, Западный проспект Хэбэй № 438, 066004, Циньхуандао, Китай

⁵ Ядерный исследовательский институт, Далат, Вьетнам

¹ genphys@mail.ru†, <https://orcid.org/0000-0002-6326-761>

² lakman.e00@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0000-6994-741X>

³ bijiang198905@163.com, <http://orcid.org/0000-0002-7573-U37X>

⁴ dgj@ysu.edu.cn, <https://orcid.org/0000-0001-9123-8599>

⁵ trungth@gmail.com

Аннотация. Методом компьютерного эксперимента проведено исследование структурно-фазовых превращений возможных в интерметаллиде NiAl состава 50 % (ат.) Al и 50 % (ат.) Ni в условиях воздействия высокоскоростной деформации со скоростями превышающими скорость звука $5 \cdot 10^9$ с⁻¹ и $5 \cdot 10^{10}$ с⁻¹. Условия эксперимента задавались такими, чтобы не было диссипации энергии в волнах разгрузки. Взаимодействия между атомами в сплаве задавались в приближении многочастичного потенциала Мишина с соавторами. Монокристалл представлялся в виде куба с длиной сторон ребер 57,6 Å с ориентацией осей [100], [010], [001]. Показано, что одноосное растяжение сопровождается двумя фазовыми превращениями ОЦК – ОЦК+ГЦК и ОЦК+ГЦК – ГЦК. При одноосном сжатии происходят фазовые превращения ОЦК – ОЦК+ГПУ и ОЦК+ГПУ – ГПУ. Сжатие при температуре 300 К в структуре возникают дефекты упаковки с ГЦК прослойками. При более высоких температурах подобных дефектов не образуется. С ростом скоростей деформации возрастает предел текучести материала. На всех этапах деформация происходит по квазиупругому механизму. В переходных этапах наблюдаются области пластической деформации, однако движение дислокаций реализуется за счет прикладываемого внешнего напряжения без вклада тепловых колебаний решетки.

Ключевые слова: интерметаллид, сверхструктура, фазовый переход, фаза, симметрия, деформация, напряжение, растяжение, сжатие, монокристалл, дислокация.

Для цитирования: Старостенков М.Д., Лакман Е.В., Цзян Би, Гоцзян Донг, Чунг Н.Ч.Х. Структурно-фазовые превращения в интерметаллиде NiAl при одноосных высокоскоростных деформациях в отсутствии диссипации энергии // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2025. Т. 22, № 1. С. 109–115. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2025.01.011.

Original article

STRUCTURAL PHASE TRANSFORMATIONS IN INTERMETALLIC NiAl UNDER UNIAXIAL HIGH-SPEED DEFORMATIONS IN THE ABSENCE OF ENERGY DISSIPATION**Mikhail D. Starostenkov^{1†}, Evgenii V. Lakman², Jiang Bi³, Guojiang Dong⁴, N. T. H. Trung⁵**^{1,2} I.I. Polzunov Altai State Technical University, Lenin Pr., 46, Barnaul, 656038, Russia^{3,4} Yanshan University, West Hebei Avenue No. 438, Qinhuangdao, 066004, China¹ genphys@mail.ru†, <https://orcid.org/0000-0002-6326-761>² lakman.e00@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0000-6994-741X>³ bijiang198905@163.com, <http://orcid.org/0000-0002-7573-U37X>⁴ dgj@ysu.edu.cn, <https://orcid.org/0000-0001-9123-8599>⁵ trungth@gmail.com

Abstract. Using a computer experiment, the structural and phase transformations possible in the intermetallic compound NiAl 50% (at.) Al and 50% (at.) Ni under conditions of high-speed deformation at speeds exceeding the speed of sound of $5 \cdot 10^9 \text{ s}^{-1}$ and $5 \cdot 10^{10} \text{ s}^{-1}$ were studied. The experimental conditions were set in such a way that no energy dissipation occurred in the unloading waves. The interactions between atoms in the alloy were specified in the approximation of the many-particle potential of Mishin et al. The single crystal was represented as a cube with an edge length of 57.6 Å with the orientation of the axes [100], [010], [001]. It is shown that uniaxial tension is accompanied by two phase transformations: BCC – BCC+FCC and BCC+FCC – FCC. During uniaxial compression, phase transformations BCC – BCC+HCP and BCC+HCP – HCP occur. Compression at 300 K at the last front, manufacturing defects with FCC interlayers. At higher temperatures, such defects do not form. As the deformation rate increases, the yield strength of the material increases. At all stages, deformation occurs according to a quasi-elastic mechanism. At transition stages, areas of plastic deformation are observed, but the movement of dislocations is carried out due to the applied external stress without the contribution of thermal vibrations of the lattice. At transition stages, areas of plastic deformation are observed, but the movement of dislocations is carried out due to the applied external stress without the contribution of thermal vibrations of the lattice.

Keywords: intermetallic, superstructure, phase transition, phase, symmetry, strain, stress, tension, compression, single crystal, dislocation.

For citation: Starostenkov, M. D., Lakman, E. V., Bi, j., Dong, G., Trung, N. T. H. (2025). Structural phase transformations in intermetallic NiAl under uniaxial high-speed deformations in the absence of energy dissipation. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 22(1), 109–115. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2025.01.011.

Введение

Среди огромного набора сплавов, находящихся широкое применение в качестве высокопрочных материалов, используемых на практике и возможных для последующих целей, выделяется система Ni-Al. Интересной особенностью данного сплава является его фазовая стабильность в интервале $\pm 5 \%$ (ат.) вблизи эквиатомного состава. Сплав представляется интерметаллидом со сверхструктурой В2 на основе ОЦК решетки. Отметим, что интерметаллид NiAl обладает достаточно высокой температурой плавления, составляющей 1911 К, более чем на 180 К превышающей температуру плавления Ni (1728 К) и даже температуру плавления Fe_8 (1811 К) [1, 2]. Как следует ожидать в ряду сплавов могут

быть системы с достаточно высокой температурой плавления, по сравнению с «чистыми» металлами. В то же время данный тип сплава обладает ценной для практического применения особенностью – низкой плотностью, что является полезным фактором его использования в аэрокосмических технологиях. Внешнее интенсивное воздействие на сплав может вызвать серию фазовых превращений, меняющих структуру и сверхструктуру интерметаллида, а следовательно, создавать новые физические и физико-механические свойства, которые могут находить определенное практическое применение. К таким воздействиям относятся одно и трехстороннее сжатие или растяжение, гидростатическое сжатие и растяжение, импульсное тепловое и радиационное воздействие, ионная имплантация, микроле-

гирование.

В системе NiAl в диапазоне концентраций компонентов $50 \pm 5\%$ (ат.) в процессах высокоскоростных импульсных воздействий на наноруровне могут возникать новые метастабильные образования (фазы), которые меняют физические и физико-механические свойства материала [3].

Наиболее простым способом для понимания возможных превращений является проведение компьютерного эксперимента. В настоящей работе представляются результаты исследований, выполняемых на основе метода молекулярной динамики [4]. При проведении подобных экспериментов следует найти наиболее адекватное представление межатомных взаимодействий, достаточно надежно описывающий известный набор экспериментальных данных материала: равновесный параметр решетки, энергии межатомных связей компонентов сплава, объемные модули упругие константы энергии образования точечных дефектов, динамические характеристики и другие [5]. В последние годы наиболее удачное представление межатомных связей для сплава NiAl на основе ОЦК решетки было выполнено в работах Мишина с соавторами [6]. В диссертации [7-9] было выполнено молекулярно-динамическое моделирование радиационных повреждений в сплаве NiAl со сверхструктурой B2 в приближении многочастичного потенциала (ЕАМ), в модели Мишина и др [6]. Для исследования процессов ионной бомбардировки авторы [7] модифицировали потенциал Мишина.

В данной работе проведено одноосное сжатие и растяжение монокристалла NiAl при различных скоростях деформации. Интервалы скоростей деформации были взяты значительно превышающими скорость звука в интерметаллиде NiAl, которая составляет $8 \cdot 10^3 \text{ c}^{-1}$. В выбранной модели скорость деформации составляла $5 \cdot 10^9 \text{ c}^{-1}$ и $5 \cdot 10^{10} \text{ c}^{-1}$. Такие скорости достигаются лишь при ударно-волновом воздействии. В нашем случае отсутствует волна разгрузочного воздействия на материал [10]. Это возможно в каналах прохождения треков в материале, облучаемом частицами высокой энергии [11].

Материалы и методика эксперимента

Объектом исследования является монокристалл NiAl со сверхструктурой B2 с пара-

метром решетки $a = 2,88 \text{ \AA}$. Монокристалл представлял собой куб с длиной ребра $57,6 \text{ \AA}$ с кристаллографической ориентацией [100], [010], [001] по осям X, Y и Z. Граничные условия во всех направлениях периодические.

Для описания межатомных взаимодействий использовался многочастичный потенциал Мишина [6], имеющий вид:

$$V_{NiAl}(r) = \psi\left(\frac{r - r_c}{h}\right) \times [a_1 e^{-b_1 r} V_{NiNi}(c_1(r - r_1)) + a_2 e^{-b_2 r} V_{AlAl}(c_2(r - r_2))], \#(1)$$

где $\psi(x)$ – функция обрезания, имеющая вид:

$$\psi(x) = f(x) = \begin{cases} x^4 & x < 0 \\ 1 + x^4 & x \geq 0 \end{cases} \#(2)$$

Функция $\psi(x)$ позволяет, плавно устремить к нулю межатомные взаимодействия на расстоянии $r \geq r_c$. Параметры потенциала подгонялись под экспериментальные значения параметра решетки, энергии упорядочения и упругих постоянных интерметаллида NiAl путем оптимизации среднеквадратичного отклонения свойств от целевых значений с применением метода имитации отжига.

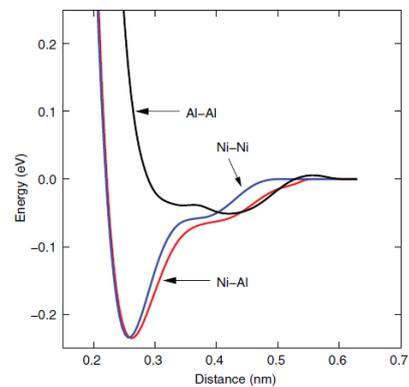


Рис.1. Вид функций парного взаимодействия потенциала Мишина [2]

Fig.1. Type of pair interaction functions of the Mishin potential [2]

Молекулярно-динамическое моделирование проводилось с использованием программного пакета LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) [12]. Для визуализации, полученных результатов использовался пакет OVITO (Open Visualization Tool) [13].

Перед проведением одноосного растяжения и сжатия всем атомам присваивалась начальная скорость, которая соответствовала температуре 300 К. Затем структура уравнивалась при 300 К с использованием NPT ансамбля в течении 10 пс, временной шаг 0,001 пс. Деформация монокристалла проводилась в направлении [100], со скоростью $5 \cdot 10^9 \text{ c}^{-1}$ и $5 \cdot 10^{10} \text{ c}^{-1}$ при растяжении и $-5 \cdot 10^9 \text{ c}^{-1}$ и $-5 \cdot 10^{10} \text{ c}^{-1}$ при сжатии до момента достижения деформации 50 %. Атомные напряжения были рассчитаны с использованием теоремы Вириала [11]:

$$PV = \sum_i^N m_i \vartheta_i \otimes \vartheta_i + \frac{\sum_i^{N'} \mathbf{r}_i \otimes \mathbf{f}_i}{d}, \#(3)$$

где \mathbf{P} – тензор давления, V – объем системы, N – количество атомов в кристалле, m – масса атома i , ϑ – вектор скорости атома i , символ \otimes обозначает скалярное произведение, N' – количество атомов внутри расчетного блока и за его пределами (для периодических граничных условий),

\mathbf{r} – положение атома i , определяемое радиус-вектором, \mathbf{f} – вектор силы действующий на атом i , d – размерность системы, равная трем.

Для построения зависимости напряжения от деформации, использовалась компонента тензора напряжений σ_{xx} . В процессе растяжения температура поддерживалась постоянной (300 К) с использованием NPT ансамбля.

Результаты и их обсуждение

На рисунке 2 представлены результаты по

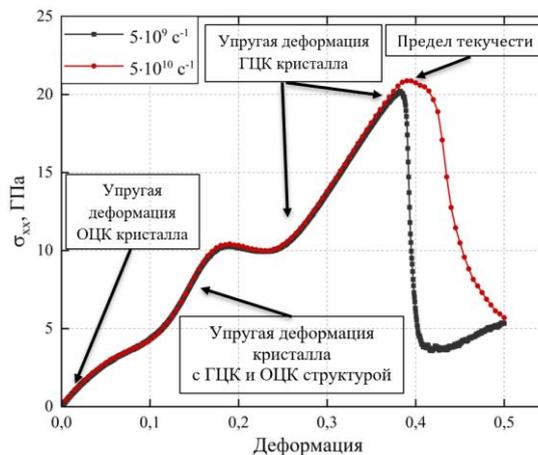


Рис.2. Зависимость компоненты тензора напряжений σ_{xx} от деформации

Fig.2. Dependence of the stress tensor component σ_{xx} on strain

одноосному растяжению монокристалла NiAl при различной скорости деформации.

Структурное окружение атома анализировалось с помощью модификатора common neighbor analysis в системе OVITO. По результатам анализа, одноосная деформация растяжения монокристалла NiAl сопровождается двумя фазовыми превращениями. Первое фазовое превращение происходит при деформации 8 % и приводит к образованию областей с гранецентрированной кубической решеткой в монокристалле с объемноцентрированной кубической решеткой. Второе фазовое превращение происходит при значении деформации 21 % и сопровождается образованием монокристалла NiAl с гранецентрированной кубической решеткой.

Упругая деформация монокристалла с гранецентрированной кубической решеткой завершается текучестью с образованием дислокаций типа Шокли с вектором Бюргера $\mathbf{b} = \mathbf{a} / 6 \langle 112 \rangle$. Увеличение скорости деформации, приводит к плавному снижению напряжений после достижения предела текучести, растяжение при низкой скорости деформации отличается меньшим по значению пределом текучести и резким уменьшением напряжений после его достижения.

Анализ ближайших соседей атома на различных стадиях деформации приведен на рисунке 3. На рисунке 3 синему цвету соответствует ОЦК структура, зеленому цвету соответствует ГЦК структура, а белому цвету неизвестная координационная структура.

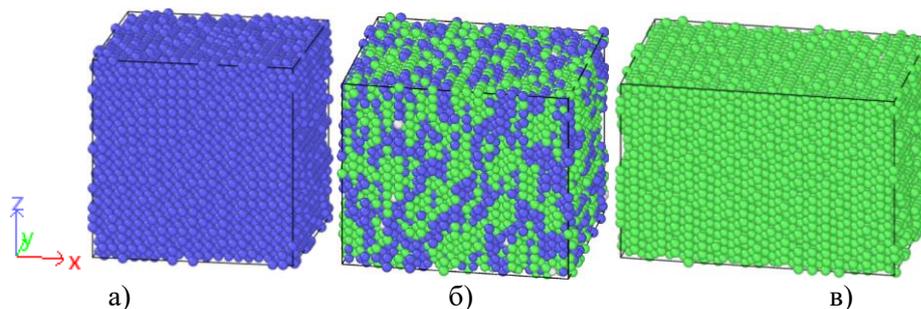


Рис.3. Анализ ближайших соседей в программе OVITO: а) структура блока при значении деформации 0 %, б) структура блока при значении деформации 13 %, в) структура блока при значении деформации 35 %

Fig.3. Common neighbors analysis in the OVITO program: a) block structure with a deformation value of 0 %, b) block structure with a deformation value of 13 %, c) block structure with a deformation value of 35 %

Для случая одноосного сжатия со скоростью деформации $-5 \cdot 10^9 \text{ c}^{-1}$, характерны следующие стадии: квазиупругая деформация кристалла с ОЦК решеткой 0 – 9 %, квазиупругая деформация монокристалла с ОЦК и ГПУ структурой 9 – 17%, упругая деформация кристалла с ГПУ структурой 17 – 18,9 %, пластическая деформация. При большей скорости деформации, наблюдается увеличение предела текучести, с сохранением стадий деформации в упругой области.

При формировании ГПУ структуры происходит образование дислокаций с вектором Бюргерса $\mathbf{b} = a/3 \langle 1\bar{1}00 \rangle$. Монокристалл с ГПУ структурой содержал прослойки с ГЦК

упаковкой атомных слоев. Проведение одноосного сжатия при температурах 600 К и 900 К, происходит без образования данного дефекта упаковки в ГПУ структуре. Зависимость компоненты тензора напряжений σ_{xx} от деформации для случая одноосного сжатия приведена на рисунке 4.

Структурное окружение атома на различных этапах одноосного сжатия приведено на рисунке 5, где синим цветом обозначены атомы с ОЦК структурой, зеленому цвету соответствуют атомы с ГЦК структурой, красным цветом показаны атомы с ГПУ структурой, белым отмечены атомы с неизвестной координационной структурой.

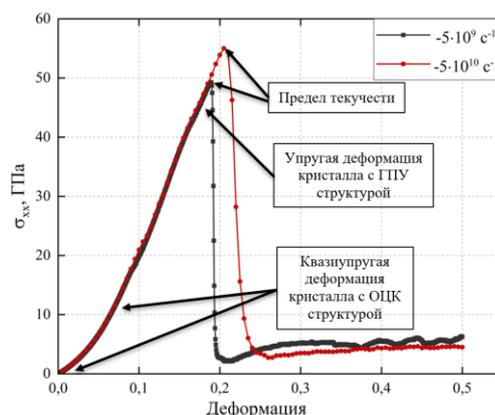


Рис.4. Одноосное сжатие монокристалла NiAl при различной скорости деформации

Fig.4. Uniaxial compression of a NiAl single crystal at various strain rates

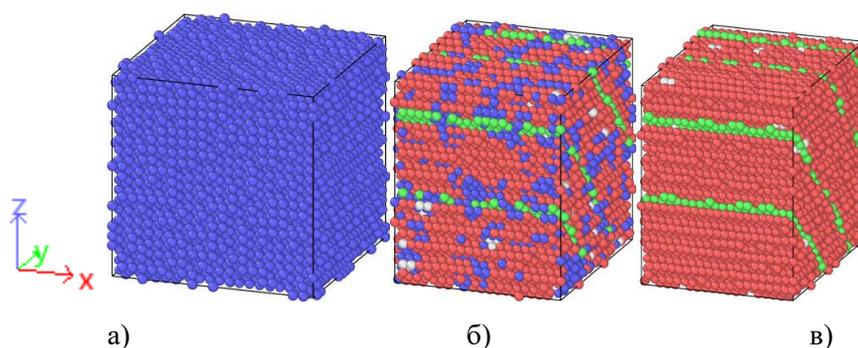


Рис.5. Анализ ближайших соседей в программе OVITO при одноосном сжатии: а) структура блока при значении деформации 0 %, б) структура блока при значении деформации 12 %, в) структура блока при значении деформации 17 %

Fig.5. Common neighbors analysis in the OVITO program with uniaxial compression: a) block structure with a deformation value of 0 %, b) block structure with a deformation value of 13 %, c) block structure with a deformation value of 35%

Заключение

С использованием метода молекулярной динамики, проведено моделирование одноосного сжатия и растяжения. При температуре 300 К в ГПУ структуре происходит образование дефекта упаковки с ГЦК структурой, проведение деформации при температурах 600 К и 900 К происходит без образования данного дефекта. Повышение скорости деформации сжатия и растяжения приводит к увеличению предела текучести монокристалла. Скорости деформации, используемые в работе, сравнимы со скоростями, возникающими при ударном нагружении материала порядка 10^6 c^{-1} . В таких условиях движение дислокаций осуществляется только за счет прикладываемого внешнего напряжения без вклада тепловых колебаний решетки (фононов), что приводит к возрастанию предела текучести.

Список литературы

1. Pearson W. B. Handbook of spacing lattice and Structures of Metals and Alloys. Vol. 1. London, N. Y.: Pergamon Press, 1958. P. 939.
2. Pearson W. B. Handbook of spacing lattice and Structures of Metals and Alloys. Vol. 2. London, N. Y.: Pergamon Press, 1967. P. 1446.
3. Козлов Э. В., Дементьев В. М., Кормин Н. М., Штерн Д. М. Структура и стабильность упорядоченных фаз. – Томск: Изд-во ТГУ, 1994. 247 с.
4. Starostenkov M. D., Zakharov P. V., Markidonov A. V., Tabakov P. V. Nonlinear Effects in Model Lattice of Metals Solitons, Dis-

crete Breathers, Quasi-Breathers, Shock Waves / Material Research Foundations Vol. 156. 2024, P. 130.

5. Starostenkov M. D., Markidonov A. V., Zakharov P. V., Tabakov P. V. Computer Modelling of Structural Transformations of Nanopores in fcc Metals / Material Research Foundations Vol. 63. 2019, P. 184.

6. Purja Pun G. P., Mishin Y. Development of an interatomic potential for the NiAl system // Phil. Mag. 2009. Vol. 89, № 3245.

7. Чунг Н. Ч. Х. Молекулярно-динамическое моделирование радиационного повреждения в сплаве NiAl со сверхструктурой B2: дис. ... канд. физ.-мат. наук: 01.04.07. Барнаул, 2020. 172 с.

8. Trung N. T. H., Phuong H. S. M., Starostenkov M. D., Romanenko V. V., Popov V. A. Threshold displacement energy in Ni, Al and B2 NiAl // IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering. 2018. V. 447, N 1. P. 12004

9. Starostenkov M., Chaplygin P., Chaplygina A., Potekaev A., Investigation of growth ordered phases in the alloy NiAl equatomic composition during stepwise cooling // Procedia IUTAM. 2017. V. 23. P. 78-83.

10. Канель Г. И., Фортов В. Е., Разоренов С. В. Ударные волны в физике конденсированного состояния // Успехи физических наук. 2007. Т. 177, № 8. С. 771-791.

11. Thompson A. P., Plimpton S. J., Mattson W. D. General formulation of pressure and stress tensor for arbitrary many-body interaction potentials under periodic boundary conditions // The Journal of chemical physics. 2009. V. 131, N 15. P. 154107.

12. Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // J Comp Phys. 1995. Vol. 117. P. 1-19.

13. Stukowski A. Visualization and analysis

of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool // Modeling and Simulation Materials Science and Engineering. 2010. V. 18, N 1. P. 015012.

Информация об авторах

М. Д. Старостенков – доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник, профессор Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова.

Е. В. Лакман – аспирант Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова.

Ц. Би – доктор наук Яньшанского университета.

Г. Донг – профессор Яньшанского университета.

Н. Ч. Х. Чунг – научный сотрудник Ядерного исследовательского института.

References

1. Pearson, W. B. (1958). Handbook of spacing lattice and Structures of Metals and Alloys. Pergamon Press, 1, 939.

2. Pearson, W. B. (1967). Handbook of spacing lattice and Structures of Metals and Alloys. Pergamon Press, 2, 1446.

3. Kozlov, E. V., Demytyev, V. M., Kormin, N. M., Shtern, D. M. (1994). Structure and stability of ordered phases, P. 247.

4. Starostenkov, M. D., Markidonov, A. V., Zakharov, P. V., Tabakov, P. V. (2024). Nonlinear Effects in Model Lattice of Metals Solitons, Discrete Breathers, Quasi-Breathers, Shock Waves. Material Research Foundations, 156, 130.

5. Starostenkov, M. D., Markidonov, A. V., Zakharov, P. V., Tabakov, P. V. (2019). Computer Modelling of Structural Transformations of Nanopores in fcc Metals. Material Research Foundations, 63, 184.

6. Purja Pun, G. P., Mishin, Y. (2009). Development of an interatomic potential for the NiAl system. Philosophical Magazine, 89(34), 3245-3267.

7. Trung, N. T. H. (2020). Molecular Dynamics Simulation of Radiation Damage in NiAl Alloy with B2 Superstructure. PhD Thesis. Barnaul, 172.

8. Trung, N. T. H., Phuong, H. S. M., Starostenkov, M. D., Romanenko, V. V., Popov, V. A. (2018). Threshold displacement energy in Ni, Al and B2 NiAl. IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering, 447(1), 12004.

9. Starostenkov, M., Chaplygin, P., Chaplygina, A., Potekaev, A. (2017). Investigation of growth ordered phases in the alloy NiAl equatomic composition during stepwise cooling. Procedia IUTAM, 23, 78-83.

10. Kanel, G. I., Fortov, V. E., Razorenov, S. V. (2007). Shock waves in condensed matter physics. Advances in Physical Sciences, 177(8), 771-791.

11. Thompson, A. P., Plimpton, S. J., Mattson, W. D. (2009). General formulation of pressure and stress tensor for arbitrary many-body interaction potentials under periodic boundary conditions. The Journal of chemical physics, 131(15), 154107.

12. Plimpton, S. (1995). Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. J Comp Phys, 117, 1-19.

13. Stukowski, A. (2010). Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool. Modeling and Simulation Materials Science and Engineering, 18(1), 015012.

Information about the authors

M. D. Starostenkov – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Chief Researcher, Professor, I.I. Polzunov Altai State Technical University.

E. V. Lakman – Post-Graduate Student, I.I. Polzunov Altai State Technical University.

J. Bi – Professor, Yanshan University.

G. Dong – Professor, Yanshan University.

N.T.H. Trung – Researcher at the Institute for Nuclear Research

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

Статья поступила в редакцию 14.11.2024; одобрена после рецензирования 17.01.2025; принята к публикации 03.02.2025.

The article was received by the editorial board on 14 Nov. 2024; approved after reviewing 17 Jan. 2025; accepted for publication 03 Feb. 2025.