

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 538.9

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2025.04.003

## ФОРМИРОВАНИЕ АТОМНОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ ПРИ НАГРЕВЕ И ОТЖИГЕ СПЛАВА $\text{NiAl}_3$

Михаил Дмитриевич Старостенков<sup>1†</sup>, Евгений Викторович Лакман<sup>2</sup><sup>1, 2</sup> Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, пр. Ленина, 46, 656038, Барнаул, Россия<sup>1</sup> genphys@mail.ru†, <https://orcid.org/0000-0002-6326-761><sup>2</sup> lakman.e00@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0000-6994-741X>

**Аннотация.** Интерметаллические соединения системы Ni-Al, образующиеся в области фазовой диаграммы богатой алюминием, а именно  $\text{NiAl}_3$  и  $\text{Ni}_2\text{Al}_3$ , остаются малоизученными. К причинам, ограничивающим проведение экспериментальных и теоретических исследований данных соединений, можно отнести их сложную кристаллографическую структуру и относительно низкие температуры плавления. В данной работе с использованием метода молекулярной динамики проведено исследование формирования атомной структуры в процессах нагрева и отжига интерметаллида  $\text{NiAl}_3$  со сверхструктурой  $\text{D0}_{11}$ . Расчетная ячейка состояла из 16000 атомов. Межатомные взаимодействия задавались в приближении потенциала погруженного атома, который был разработан Мишиным с соавторами. Анализ распределения атомов в кристалле проведен с помощью параметра ближнего порядка Каули и метода рентгеновской дифракции. Оценка значений параметра Каули приведена для нескольких координационных сфер при различных температурах, что позволяет наблюдать изменение атомного упорядочения с повышением температуры. Построены профили линий рентгеновской дифракции в процессах нагрева и отжига. Показано удовлетворительное соответствие значений межплоскостных расстояний, рассчитанных для виртуальных дифрактограмм, экспериментальным значениям.

**Ключевые слова:** интерметаллид, сверхструктура, молекулярная динамика, отжиг, ближний порядок, функция радиального распределения, рентгеновская дифракция.

**Для цитирования:** Старостенков М.Д., Лакман Е.В. Формирование атомного упорядочения при нагреве и отжиге сплава  $\text{NiAl}_3$  // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2025. Т. 22, № 4. С. 404-411. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2025.04.003.

Original article

## FORMATION OF ATOMIC ORDERING DURING HEATING AND ANNEALING OF $\text{NiAl}_3$ ALLOY

Mikhail D. Starostenkov<sup>1†</sup>, Evgenii V. Lakman<sup>2</sup><sup>1, 2</sup> I.I. Polzunov Altai State Technical University, Lenin Pr., 46, Barnaul, 656038, Russia<sup>1</sup> genphys@mail.ru†, <https://orcid.org/0000-0002-6326-761><sup>2</sup> lakman.e00@gmail.com, <https://orcid.org/0009-0000-6994-741X>

**Abstract.** Intermetallic compounds of the Ni-Al system, formed in the aluminum-rich region of the phase diagram, namely  $\text{NiAl}_3$  and  $\text{Ni}_2\text{Al}_3$ , remain poorly understood. The limitations of experimental and theoretical studies of these compounds include their complex crystallographic structure and relatively low melting points. In this paper, molecular dynamics simulation was used to study the formation of the atomic structure during heating and annealing of the  $\text{NiAl}_3$  intermetallic compound with the  $\text{D0}_{11}$  superstructure. The computational cell consisted of 16000 atoms. Interatomic interactions were defined using the embedded atom potential approximation developed by Mishin et al. An analysis of the atomic distribution in the crystal was performed using the Cowley short-range order parameter and X-ray diffraction. The Cowley parameter values are estimated for several coor-

dination spheres at different temperatures, allowing one to observe changes in atomic ordering with increasing temperature. X-ray diffraction line profiles were constructed during heating and annealing. Satisfactory agreement between the interplanar spacings calculated for virtual diffraction patterns and experimental values is demonstrated.

**Keywords:** intermetallic, superstructure, molecular dynamics, annealing, short-range order, radial distribution function, X-ray diffraction.

**For citation:** Starostenkov M. D. & Lakman E. V. (2025). Formation of atomic ordering during heating and annealing of NiAl<sub>3</sub> alloy. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 22(4), 404-411. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2025.04.003.

## Введение

Интерметаллические соединения системы Ni-Al остаются предметом интенсивных экспериментальных и теоретических исследований, поскольку представляют практический интерес в аэрокосмической и автомобильной промышленности. Большое количество работ было посвящено части фазовой диаграммы богатой никелем, а именно соединениям B2 NiAl и L1<sub>2</sub> Ni<sub>3</sub>Al. Однако интерметаллиды, образующиеся в области богатой алюминием (Ni<sub>2</sub>Al<sub>3</sub> и NiAl<sub>3</sub>), являются недостаточно изученными.

В экспериментальной работе [1] добавление в алюминий-никелевый сплав армирующей фазы NiAl<sub>3</sub> позволило достигнуть предела текучести 70-100 МПа при комнатной температуре, когда для чистого алюминия предел текучести составляет 26 МПа. В работах [2, 3] отмечено, что волокна NiAl<sub>3</sub>, в матрице алюминия обладают высокой стабильностью при повышенных температурах. Теоретические исследования были посвящены диффузионным и механическим свойствам соединения NiAl<sub>3</sub>, а также изучению влияния фононов на свойства точечных дефектов [4-6].

В настоящей работе, методом молекулярной динамики исследовано формирование атомной структуры в процессах нагрева и отжига интерметаллида NiAl<sub>3</sub>.

## Материалы и методика эксперимента

Объектом исследования является интерметаллид NiAl<sub>3</sub> с орторомбической элементарной ячейкой, содержащей 4 атома никеля и 12 атомов алюминия, пространственная группа Pnma, структурный тип D0<sub>11</sub>. Постоянные решетки равны:  $a = 6,598 \text{ \AA}$ ,  $b = 7,352 \text{ \AA}$ ,  $c = 4,802 \text{ \AA}$  [7]. Начальная конфигурация представляла собой кристалл размером  $10 \times 10 \times 10$  элементарных ячеек с периодиче-

скими граничными условиями.

Взаимодействие атомов в системе описывалось с помощью потенциала [8], который был применен в работах [5, 6] для изучения свойств NiAl<sub>3</sub>. Молекулярно-динамическое моделирование было выполнено с использованием программного пакета LAMMPS [9] с поддержкой ускорения вычислений на GPU [10]. Визуализация результатов осуществлялась с использованием пакета OVITO [11].

Радиус отсечки был равен  $7,95 \text{ \AA}$ . На начальном этапе проведена минимизация энергии системы методом сопряженных градиентов. Процедуры нагревания, охлаждения и отжига проводились с использованием изобарно-изотермического ансамбля (NPT). После атомам присваивалась начальная скорость, которая соответствовала температуре 10 К. Затем структура уравнивалась при 10 К в течение 1 нс, временной шаг  $0,001 \text{ пс}$ . На следующем этапе система нагревалась в течение 3 нс от 10 К до 300 К. Для образования расплава температура была увеличена до 2000 К со скоростью нагрева  $2,13 \cdot 10^{11} \text{ К/с}$ , затем система достигала равновесного состояния в течение 1 нс. На конечном этапе система охлаждалась 25 нс до температуры 900 К с последующим отжигом в течение 10 нс. Температура отжига выбрана ниже точки перитектики на равновесной диаграмме состояния Ni-Al.

В качестве метода анализа структуры материала использовалась парциальная функция радиального распределения  $g_{i-j}(r)$ , которая может быть вычислена по формуле:

$$g_{i-j}(r) = \frac{V}{N_i} \frac{dn_{i-j}(r)}{4\pi r^2 dr}, \quad (1)$$

где  $V$  – объем системы,  $N_i$  – число частиц вида  $i$ ,  $dn_{i-j}(r)$  – число атомов  $j$  внутри сферического слоя толщиной от  $r$  до  $r + dr$ ,

вокруг атома  $i$ . Определив число атомов  $j$  внутри сферического слоя толщиной от  $r$  до  $r + dr$ , вокруг атома  $i$ , можно вычислить параметр ближнего порядка Каули:

$$\alpha_{i-j} = 1 - \frac{n_{i-j}}{n_{all} x_j}, \quad (2)$$

где  $n_{all}$  – общее количество атомов в координатной сфере,  $x_j$  – доля атомов  $j$ -го сорта в системе. При случайном распределении атомов  $\alpha_{i-j}$  будет равно нулю. Если ближайшими соседями атома  $i$ -го сорта, являются атомы  $j$ -го сорта, то  $\alpha_{i-j} < 0$ . Если ближайшими соседями являются атомы одного сорта, то  $\alpha_{i-j} > 0$ .

Второй способ анализа структуры заключался в построении рентгеновских дифракционных картин с использованием вычислительного алгоритма, который подробно описан в работах [12, 13]. Используя закон Брэгга можно вычислить угол дифракции:

$$\frac{\sin \theta}{\lambda} = \frac{|\mathbf{K}|}{2}, \quad (3)$$

где  $\lambda$  – длина волны монохроматического излучения,  $|\mathbf{K}|$  – модуль вектора обратной решетки.

При угле  $\theta$ , равном углу Брэгга  $\theta_B$ , в определенных точках обратной решетки выполняется условие Брэгга  $\mathbf{K} = \mathbf{K}_B$ . В этих точках атомная структура обеспечивает конструктивную интерференцию излучения. Величина векторов обратной решетки связана с межплоскостными расстояниями  $d$  выражением [12, 13]:

$$\frac{1}{d} = |\mathbf{K}_B| \quad (4)$$

Для вычисления интенсивности дифракции используется структурный фактор рассеяния [12, 13]:

$$F(\mathbf{K}) = \sum_{j=1}^N f_j \exp 2\pi i \mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_j, \quad (5)$$

где  $f_j$  – коэффициент атомного рассеяния, который учитывает снижение интенсивности дифракции от отдельного атома из-за комптоновского рассеяния и зависят от типа атома, угла дифракции  $\theta$  и типа излучения,  $\mathbf{r}_j$  – радиус вектор атома в прямом пространстве.

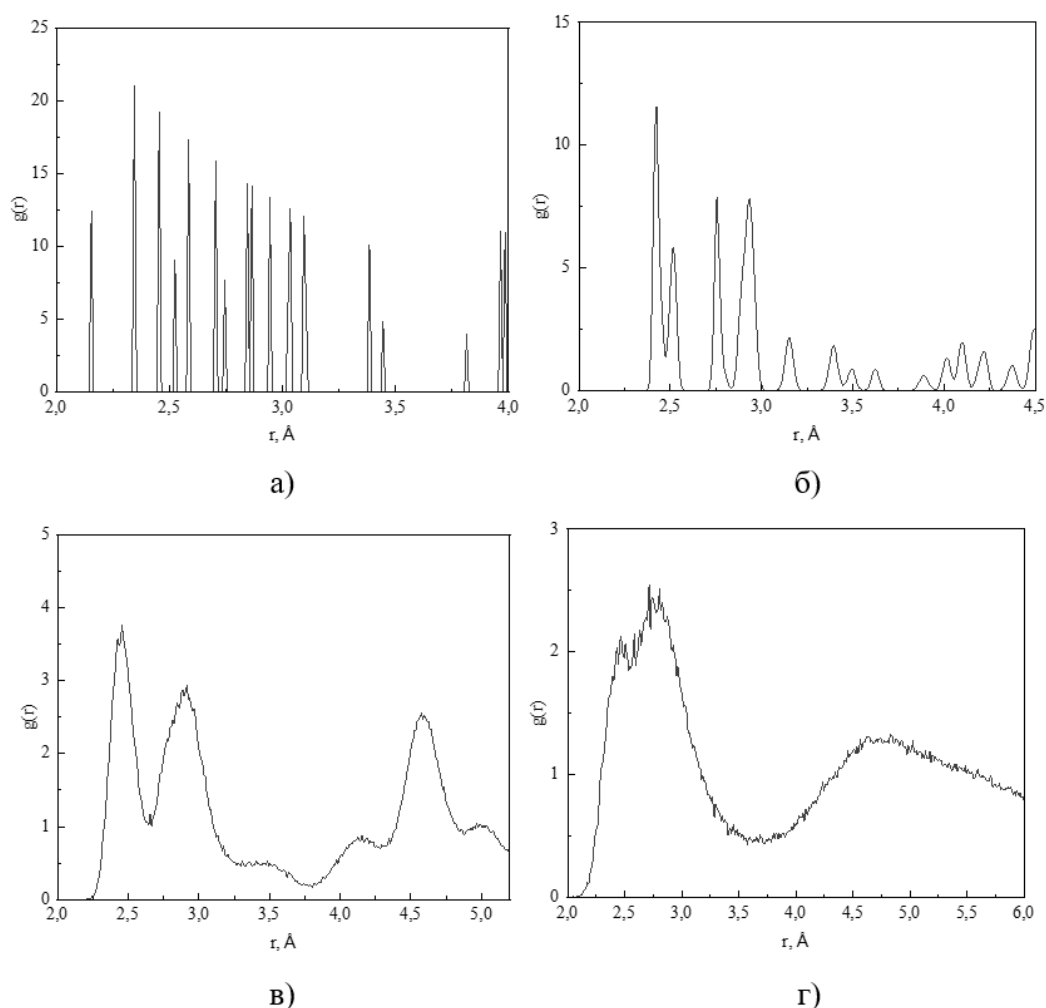
Интенсивность рентгеновской дифракции вычисляется по формуле [12, 13]:

$$I_x(\mathbf{K}) = L_p(\theta) \frac{F(\mathbf{K}) F^*(\mathbf{K})}{N} \quad (6)$$

где  $L_p(\theta)$  – фактор поляризации Лоренца, учитывающий относительное распределение точек обратной решетки и изменение интенсивности рассеяния при использовании неполяризованного падающего излучения,  $F^*(\mathbf{K})$  – комплексно-сопряженное значение структурного фактора рассеяния,  $N$  – количество атомов в системе.

### Результаты и их обсуждение

На рисунке 1 приведены функции радиального распределения для атомов интерметаллида  $\text{NiAl}_3$  при температурах: 0 К; 10 К; 300 К; 900 К



**Рис.1.** Функции радиального распределения для атомов кристаллита  $\text{NiAl}_3$ : а) температура 0 К; б) температура 10 К; в) температура 300 К; г) температура 900 К (после отжига)

**Fig.1.** Radial distribution functions of  $\text{NiAl}_3$  crystallite atoms: а) temperature 0 К; б) temperature 10 К; в) temperature 300 К; г) temperature 900 К (after annealing)

В таблицах 1-3 приведены значения параметра ближнего порядка Каули для нескольких координационных сфер. Значение  $\alpha_{\text{Al-Ni}} = -3$  указывает на окружение атомов алюминия исключительно атомами никеля. Для координационных сфер, в которых параметр ближнего порядка Каули находится в диапа-

зоне значений  $-3 < \alpha_{\text{Al-Ni}} < 0$ , характерно окружение атомов алюминия атомами никеля, но с наличием соседей из атомов одного сорта. Значения  $\alpha_{\text{Al-Ni}} > 0$ , свидетельствуют о преобладании в координационной сфере атомов одного сорта.

**Таблица 1.** Параметры ближнего порядка Каули в интерметаллиде  $\text{NiAl}_3$  для нескольких координационных сфер при температуре 10 К

**Table 1.** Cowley short-range order parameters in the intermetallic  $\text{NiAl}_3$  for several coordination spheres at a temperature of 10 К

$r, \text{\AA}$	2,43	2,52	2,76	2,94	3,15	3,40	3,50	3,63	3,89	4,02
$\alpha_{\text{Al-Ni}}$	-3,00	-3,00	-0,33	1,00	1,00	1,00	1,00	1,00	0,93	-2,63

**Таблица 2.** Параметры ближнего порядка Каули в интерметаллиде  $\text{NiAl}_3$  для нескольких координационных сфер при температуре 300 K

**Table 2.** Cowley short-range order parameters in the intermetallic  $\text{NiAl}_3$  for several coordination spheres at a temperature of 300 K

$r, \text{\AA}$	2,46	2,91	3,49	4,16	4,58	5,02
$\alpha_{\text{Al-Ni}}$	-2,94	0,57	0,98	0,06	0,37	-0,03

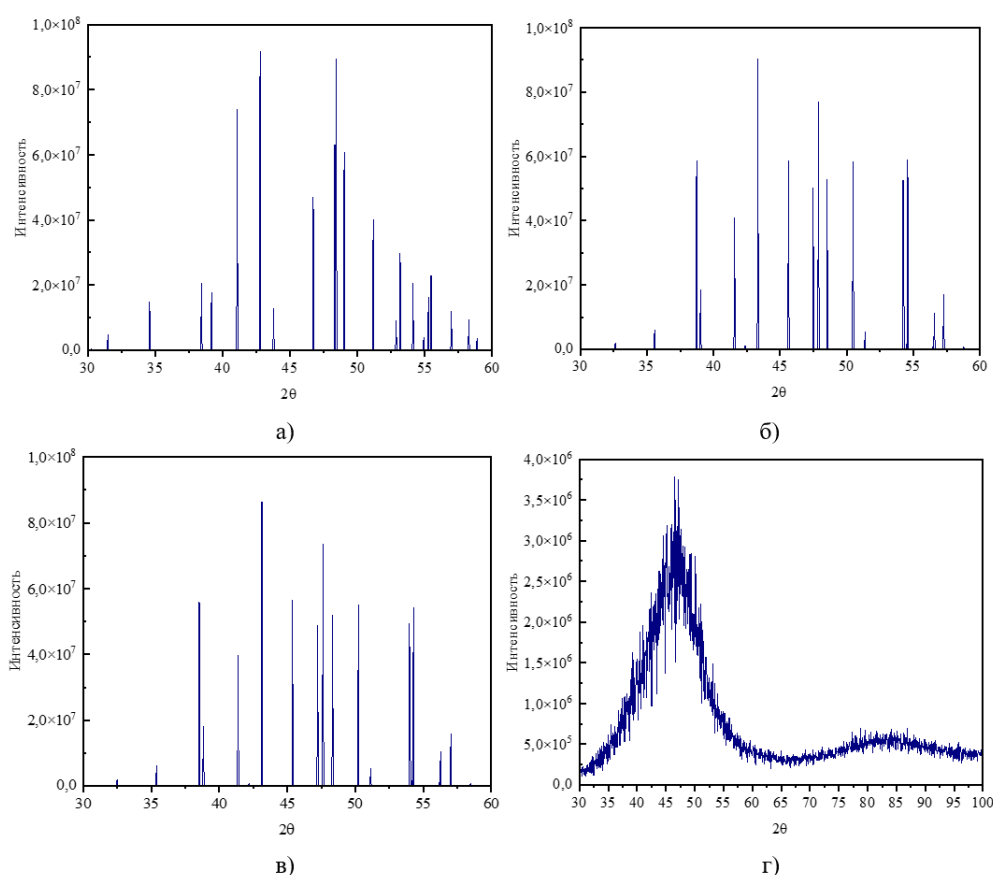
**Таблица 3.** Параметры ближнего порядка Каули в интерметаллиде  $\text{NiAl}_3$  для нескольких координационных сфер при температуре 900 K

**Table 3.** Cowley short-range order parameters in the intermetallic  $\text{NiAl}_3$  for several coordination spheres at a temperature of 900 K

$r, \text{\AA}$	2,47	2,76	2,73
$\alpha_{\text{Al-Ni}}$	-0,67	0,16	0,20

На рисунке 2 приведены снимки рентгеновской дифракции соединения  $\text{NiAl}_3$  при различных температурах. Как следует из рисунка 2в, после отжига при температуре 900 K, ди-

фракционные рефлексы являются уширенными, что свидетельствует о начале процесса кристаллизации.



**Рис. 2.** Снимки рентгеновской дифракции соединения  $\text{NiAl}_3$ : а) температура 0 K; б) температура 10 K; в) температура 300 K; г) температура 900 K (после отжига)

**Fig. 2.** X-ray diffraction patterns of  $\text{NiAl}_3$  compound: a) temperature 0 K; b) temperature 10 K; c) temperature 300 K; d) temperature 900 K (after annealing)

В таблице 4 приведены значения межплоскостных расстояний для дифрактограмм на рисунке 2. Рефлексы виртуальных картин рентгеновской дифракции сравнивались с экспериментальными результатами, взятыми из базы данных ICDD [14]. Значения межплоскостных расстояний для модельных дифрактограмм

удовлетворительно согласуются с экспериментальными значениями [14] при температурах: 0 К;

10 К; 300 К. Межплоскостные расстояния  $d$  рассчитаны для длины волны  $1,790 \text{ \AA}$ .

**Таблица 4.** Значения межплоскостных расстояний и углов  $2\theta$  для дифрактограмм на рисунке 2

**Table 4.** Values of interplanar distances and angles  $2\theta$  for diffraction patterns in Figure 2

Температура 0 К		Температура 10 К		Температура 300 К		Температура 900 К		База данных ICDD [14]	
$2\theta$ , град.	$d$ , Å	$2\theta$ , град.	$d$ , Å	$2\theta$ , град.	$d$ , Å	$2\theta$ , град.	$d$ , Å	$2\theta$ , град.	$d$ , Å
30,23	3,43	32,63	3,19	32,48	3,20	47,23	2,23	30,16	3,44
31,48	3,30	35,58	2,93	35,38	2,95	83,83	1,34	34,60	3,01
34,58	3,01	38,73	2,70	38,53	2,71			38,57	2,71
38,43	2,72	39,09	2,68	38,83	2,69			41,10	2,55
39,18	2,67	41,58	2,52	41,38	2,53			42,67	2,46
41,08	2,55	42,38	2,48	42,18	2,49			43,79	2,40
42,78	2,45	43,33	2,42	43,13	2,43			46,66	2,26
43,78	2,40	45,63	2,31	45,38	2,32			48,48	2,18
46,73	2,26	47,48	2,22	47,23	2,23			48,96	2,16
48,33	2,19	47,88	2,21	47,63	2,22			51,24	2,07
48,43	2,18	48,53	2,18	48,33	2,19			52,88	2,01
49,03	2,16	50,48	2,10	50,23	2,11			53,17	2,00
51,18	2,07	51,38	2,06	54,13	1,97			54,04	1,97
52,88	2,01	54,23	1,96	53,98	1,97			55,26	1,93
53,18	2,00	54,48	1,96	54,18	1,97			56,86	1,88
54,13	1,97	54,58	1,95	54,28	1,96			58,21	1,84
54,93	1,94	56,48	1,89	56,18	1,90				
55,28	1,93	56,58	1,89	56,28	1,90				
55,48	1,92	57,28	1,87	57,03	1,87				
56,98	1,88	58,78	1,82	58,48	1,83				
58,28	1,84								
58,88	1,82								

### Заключение

Методом молекулярной динамики изучено структурное упорядочение интерметаллида  $\text{NiAl}_3$  в процессах нагрева и отжига. Значения параметра ближнего порядка Каули указывают на преимущественное окружение атомов алюминия атомами никеля в первых координационных сферах при температурах: 10 К; 300 К; 900 К. Дифракционные максимумы на виртуальных дифракционных картинах идентифицированы с помощью картотеки PDF-2 (ICDD) [14]. Образование двух уширенных дифракци-

онных рефлексов после отжига при температуре 900 К, может свидетельствовать о начале процесса кристаллизации.

### Список литературы

1. Czerwinski F. Thermal Stability of Aluminum-Nickel Binary Alloys Containing the  $\text{Al-Al}_3\text{Ni}$  Eutectic // Metall Mater Trans A. 2021. V. 52. P. 4342-4356.
2. Suwanpreecha C., Pandee P., Patakham U., Limmaneevichitr C. New generation of eutec-

tic Al-Ni casting alloys for elevated temperature services // *Materials Science and Engineering. A, Structural Materials: Properties, Microstructure and Processing*. 2018. V. 709. P. 46-54.

3. Czerwinski F. Thermal Stability of Aluminum Alloys // *Materials*. 2020. V. 13, N. 15. P. 3441

4. Xiao C., Yang B., Lai Z., Chen Z., Yang H., Wang H., Zhou Y., Zeng X. First-Principles-Based Structural and Mechanical Properties of Al<sub>3</sub>Ni Under High Pressure // *Crystals*. 2025. V. 15, N. 1. P. 3

5. Tinguaud D., Françoise Nardou, Besson R. Diffusion in complex ordered alloys: atomic scale investigation of NiAl<sub>3</sub> // *Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics* (1998-2015). 2010. V. 81. P. 174108-1-174108-8

6. Tinguaud D., Besson R. Point defect phonons in intermetallics: NiAl<sub>3</sub> by atomic-scale simulation // *Physica Status Solidi (C) Current Topics in Solid State Physics*. 2009. V. 6, N. 9. P. 2008-2011

7. Hicks D., Mehl MJ., Gossett E., Toher C., Levy O., Hanson RM., Hart G., Curtarolo S. The AFLOW Library of Crystallographic Prototypes: Part 2 // *Computational Materials Science*. 2018. V. 161. P. S1-S1011

8. Mishin Y., Mehl M. J., Papaconstantopoulos D. A. Embedded-atom potential for B2-NiAl // *Physical Review B*. 2002. V. 65, N. 22. P. 224114

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

10. Brown W. M., Wang P., Plimpton S. J., Tharrington A. N. Implementing Molecular Dynamics on Hybrid High Performance Computers – Short Range Forces // *Computer Physics Communications*. 2011. V. 182. N. 4. P. 898-911

11. 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.

12. Coleman S. P., Sichani M. M., Spearot D. E. A Computational Algorithm to Produce Virtual X-ray and Electron Diffraction Patterns from Atomistic Simulations // *JOM: the journal of the Minerals, Metals & Materials Society*.

2014. V. 66. P. 408-416.

13. Coleman S. P., Laurent C., Spearot D. E. Virtual diffraction analysis of Ni [0 1 0] symmetric tilt grain boundaries // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 2013. V. 21, N. 5. P. 055020

### **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.*

### **References**

1. Czerwinski, F. (2021). Thermal Stability of Aluminum-Nickel Binary Alloys Containing the Al-Al<sub>3</sub>Ni Eutectic. *Metall Mater Trans A*, 52, 4342-4356.

2. Suwanpreecha, C., Pandee P., Patakhram, U., Limmaneevichitr, C. (2018). New generation of eutectic Al-Ni casting alloys for elevated temperature services. *Materials Science and Engineering. A, Structural Materials: Properties, Microstructure and Processing*, 709, 46-54.

3. Czerwinski, F. (2020). Thermal Stability of Aluminum Alloys. *Materials*, 13(15), 3441.

4. Xiao, C., Yang, B., Lai, Z., Chen, Z., Yang, H., Wang, H., Zhou, Y., Zeng, X. (2025). First-Principles-Based Structural and Mechanical Properties of Al<sub>3</sub>Ni Under High Pressure. *Crystals*, 15(1), 3.

5. Tinguaud, D., Françoise, Nardou, Besson, R. (2010). Diffusion in complex ordered alloys: atomic scale investigation of NiAl<sub>3</sub>. *Physical Review B: Condensed Matter and Materials Physics* (1998-2015), 81, 174108-1-174108-8.

6. Tinguaud, D., Besson, R. (2009). Point defect phonons in intermetallics: NiAl<sub>3</sub> by atomic-scale simulation. *Physica Status Solidi (C) Current Topics in Solid State Physics*, 6(9), 2008-2011.

7. Hicks, D., Mehl, MJ., Gossett, E., Toher, C., Levy, O., Hanson, RM., Hart, G., Curtarolo,

S. (2018). The AFLOW Library of Crystallographic Prototypes: Part 2. Computational Materials Science, 161, S1-S1011.

8. Mishin, Y., Mehl, M. J., Papaconstantopoulos, D. A. (2002). Embedded-atom potential for B2-NiAl. Physical Review B, 65(22), 224114

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

10. Brown, W. M., Wang, P., Plimpton, S. J., Tharrington, A. N. (2011). Implementing Molecular Dynamics on Hybrid High Performance Computers – Short Range Forces. Computer Physics Communications, 182(4), 898-911.

11. 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.

12. Coleman, S. P., Sichani, M. M., Spearot, D. E. (2014). A Computational Algorithm to Produce Virtual X-ray and Electron Diffraction Patterns from Atomistic Simulations. JOM: the journal of the Minerals, Metals & Materials Society, 66, 408-416.

13. Coleman, S. P., Laurent, C., Spearot, D. E. (2013). Virtual diffraction analysis of Ni [010] symmetric tilt grain boundaries. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 21(5), 055020.

### ***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 – Postgraduate Student, I.I. Polzunov Altai State Technical University.*

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

Статья поступила в редакцию 21.10.2025; одобрена после рецензирования 24.11.2025; принята к публикации 01.12.2025.

The article was received by the editorial board on 21 Oct. 2025; approved after reviewing 24 Nov. 2025; accepted for publication 01 Dec. 2025.