

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 538.911

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2022.02.006

ВЛИЯНИЕ ОРИЕНТАЦИИ МЕЖФАЗНОЙ ГРАНИЦЫ Ti–Al И ДЕФОРМАЦИИ Ti НА СКОРОСТЬ ВЗАИМНОЙ ДИФФУЗИИ ПРИ ТЕМПЕРАТУРАХ ВЫШЕ ТЕМПЕРАТУРЫ ПЛАВЛЕНИЯ Al: МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ

Геннадий Михайлович Полетаев

Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, пр. Ленина, 46, 656038, Барнаул, Россия
gmpoletaev@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5252-2455>

Аннотация. С помощью метода молекулярной динамики проведено исследование влияния ориентации межфазной границы Ti–Al на интенсивность взаимной диффузии, а также влияния на нее деформации Ti при температурах выше температуры плавления Al. Для описания межатомных взаимодействий в системе Ti–Al использовались EAM потенциалы Зоупа и Мишина. Рассматривалось три ориентации границы относительно ГПУ кристалла Ti: (0001), (10 $\bar{1}$ 0) и (10 $\bar{1}$ 1). Было выяснено, что ориентация межфазной границы влияет на интенсивность диффузии в фазе Ti: более интенсивно атомы Al диффундировали в решетку титана при ориентации (0001), менее интенсивно – при ориентациях (10 $\bar{1}$ 0) и (10 $\bar{1}$ 1). Данное влияние ориентации межфазной границы связано с вероятностью отрыва атома Ti от границы кристалл-жидкость и определяется разницей энергий атомов Ti в фазе алюминия и встроенных в границу кристаллической фазы. На начальной стадии взаимной диффузии наблюдалось смещение границы между кристаллом и жидким металлом от самой границы раздела Ti и Al на две-три атомные плоскости в фазу алюминия – тонкий слой алюминия вблизи границы оставался в кристаллическом состоянии, повторяя кристаллическую решетку титана. Это обусловлено тем, что связи Ti–Al на границе значительно крепче межатомных связей в жидком алюминии. При исследовании влияния упругой деформации на интенсивность взаимной диффузии было получено, что почти во всех случаях интенсивность диффузии увеличивается при растяжении и уменьшается при сжатии, что связано с соответствующим изменением свободного объема, в значительной степени влияющего на диффузионную подвижность атомов.

Ключевые слова: молекулярная динамика, диффузия, межфазная граница, титан, алюминий.

Благодарности: Работа поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (FZMM-2020-0002).

Для цитирования: Полетаев Г.М. Влияние ориентации межфазной границы Ti–Al и деформации Ti на скорость взаимной диффузии при температурах выше температуры плавления Al: молекулярно-динамическое исследование // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2022. Т. 19, № 2. С. 188–196. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2022.02.006.

Original article

EFFECT OF Ti–Al INTERFACIAL ORIENTATION AND Ti DEFORMATION ON THE INTERDIFFUSION RATE AT TEMPERATURES ABOVE THE MELTING POINT OF Al: A MOLECULAR DYNAMICS STUDY

Gennady M. Poletaev

I.I. Polzunov Altai State Technical University, Lenin Pr., 46, Barnaul, 656038, Russia
gmpoletaev@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5252-2455>

Abstract. The influence of the orientation of Ti–Al interphase boundary on the intensity of mutual diffusion, as well as the influence of its deformation of Ti at temperatures above the melting temperature of Al, were studied by the method of molecular dynamics. Zope and Mishin EAM potentials were used to describe interatomic interactions in the Ti–Al system. Three orientations of the boundary relative to the hcp Ti crystal were considered: (0001), (10 $\bar{1}0$) and (10 $\bar{1}1$). It was found that the orientation of the interfacial boundary affects the intensity of diffusion in the Ti phase: Al atoms diffused more intensively into the titanium lattice at the (0001) orientation, and less intensively at the (10 $\bar{1}0$) and (10 $\bar{1}1$) orientations. This influence of the orientation of the interphase boundary is associated with the probability of detachment of the Ti atom from the crystal-liquid interface and is determined by the difference in the energies of the Ti atoms in the aluminium phase and those built into the boundary of the crystalline phase. At the initial stage of mutual diffusion, the boundary between the crystal and liquid metal was observed to shift from the very interface between Ti and Al by two or three atomic planes into the aluminium phase – a thin layer of aluminium near the boundary remained in the crystalline state, repeating the crystal lattice of titanium. This is due to the fact that the Ti–Al bonds at the boundary are much stronger than the interatomic bonds in liquid aluminium. When studying the effect of elastic deformation on the intensity of mutual diffusion, it was found that in almost all cases the intensity of diffusion increases with tension and decreases with compression, which is associated with a corresponding change in the free volume, which largely affects the diffusion mobility of atoms.

Keywords: molecular dynamics, diffusion, interphase boundary, titan, aluminium.

Acknowledgements: The study was supported by Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (FZMM-2020-0002).

For citation: Poletaev, G. M. (2022). Effect of Ti–Al interfacial orientation and Ti deformation on the interdiffusion rate at temperatures above the melting point of Al: a molecular dynamics study. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 2(19), 188–196. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2022.02.006.

Введение

Интерметаллические соединения системы Ti–Al, благодаря таким свойствам, как высокая прочность при небольшой плотности при повышенных температурах, стойкость к коррозии и окислению, имеют высокий потенциал применения их в качестве высокотемпературных конструкционных материалов, в частности, для аэрокосмической и автомобильной отраслей [1–5]. В основе получения интерметаллидов лежит диффузионный процесс, который в данном случае имеет довольно сложный и многофакторный характер. При взаимной диффузии в процессе высокотемпературного синтеза на границе металлов Ti и Al формируется набор различных фаз, как твердых упорядоченных и разупорядоченных, так и жидких смесей с разным соотношением компонентов [6–9]. При этом характеристики диффузии могут значительно отличаться в различных фазах [8–11]. Для понимания и предсказания процессов, происходящих при синтезе интерметаллидов, большое значение имеет знание характеристик и механизмов диффузии отдельно в разных фазах системы Ti–Al.

Ранее в работах [12, 13] с помощью метода молекулярной динамики нами были рассчитаны характеристики самодиффузии отдельно

атомов Ti, Ni и Al в жидких сплавах систем Ti–Al и Ni–Al. В [12, 13] мы рассмотрели упорядоченные и разупорядоченные сплавы с составом $A_{75}B_{25}$, $A_{50}B_{50}$, $A_{25}B_{75}$ (A и B – компоненты сплава), а также чистые металлы. В работе [14] было проведено исследование влияния ориентации межфазной границы Ti–Al на интенсивность взаимной диффузии при твердофазном и твердо-жидкофазном контактах. В частности было показано, что интенсивнее диффузия атомов Al в Ti протекала при ориентации границы (0001) и медленнее при ориентациях (10 $\bar{1}0$) и (10 $\bar{1}1$).

Настоящая работа является продолжением работы [14] и посвящена дальнейшему изучению с помощью молекулярно-динамического моделирования влияния ориентации межфазной границы Ti–Al на интенсивность взаимной диффузии, а также влияния не нее деформации Ti при температурах выше температуры плавления Al. Интерес к исследованию влияния деформации вызван тем, что в последнее время одним из перспективных методов синтеза интерметаллидов является использование предварительной механоактивационной обработки [15, 16], в результате которой получают, так называемые, механокомпозиты, представляющие собой в случае системы Ti–Al матрицу из срав-

нительно более пластичного алюминия, в объеме которого находятся частицы более хрупкого и тугоплавкого титана [16]. Очевидно, что такая система характеризуется высокой степенью неравновесности из-за высокой концентрации дефектов, поверхностей раздела и внутренних напряжений.

Описание модели

Для описания межатомных взаимодействий в системе Ti–Al в молекулярно-динамической модели использовались EAM потенциалы Зоупа и Мишина [17]. Эти потенциалы были получены в [17] на основе сопоставления экспериментальных данных и результатов *ab initio* расчетов относительно различных свойств и структуры металлов Ti, Al и интерметаллидов Ti₃Al и TiAl. Они хорошо зарекомендовали себя при проведении различных исследований и прошли успешную апробацию по широкому

спектру механических и структурно-энергетических свойств сплавов системы Ti–Al [17–19].

Расчетные ячейки в модели включали около 120000 атомов и имели форму прямоугольных параллелепипедов (рис.1). Граница раздела двух металлов создавалась в центре расчетной ячейки вдоль плоскости YZ. По осям Y и Z задавались периодические граничные условия. При этом размеры ячейки вдоль осей Y и Z выбирались такими, чтобы они были кратны одновременно периодам повторяемости кристаллических структур Ti и Al (на начальном этапе Al создавался в кристаллическом состоянии). Кроме этого, производился учет различного теплового расширения при задании той или иной конкретной температуры, при которой планировалось проведение моделирования. По краям вдоль оси X структура расчетной ячейки была зафиксирована (жесткие граничные условия).

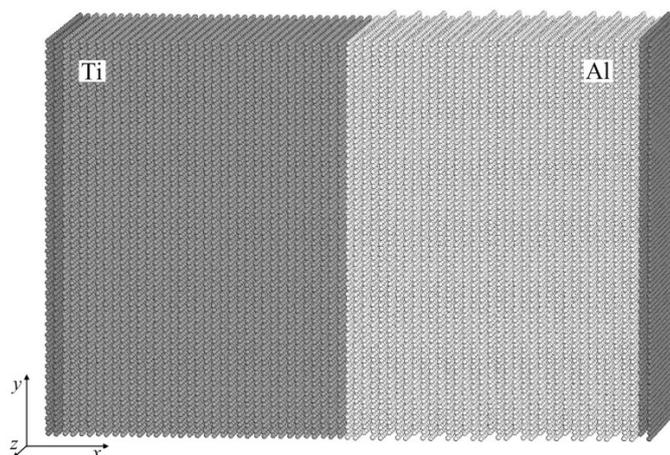


Рис.1. Расчетная ячейка для моделирования взаимной диффузии на межфазной границе Ti–Al. Темно-серые атомы на торцах ячейки оставались неподвижными в процессе моделирования (жесткие граничные условия)

Fig.1. Computational cell for modeling mutual diffusion at the Ti–Al interphase boundary. Dark gray atoms at the ends of the cell remained immobile during the simulation (hard boundary conditions)

Рассматривалось три ориентации границы раздела Ti–Al относительно ГПУ кристаллической решетки Ti: (0001), (10 $\bar{1}$ 0) и (10 $\bar{1}$ 1). Данные плоскости изображены на рис.2. Плоскость (0001) является наиболее плотноупакованной (она соответствует плоскости (111) ГЦК решетки) – плотность заполнения ее атомами (если их радиус принять равным половине расстояния до ближайших соседей в идеальном кристалле) равна 90,7%.

В настоящей работе моделирование проводилось при температуре выше температуры плавления алюминия, поэтому ориентация его

кристаллической структуры на начальном этапе не имела значения. Температура в модели задавалась через начальные скорости атомов согласно распределению Максвелла [20–22]. Для сохранения температуры постоянной в процессе моделирования использовался термостат Нозе-Гувера. Шаг интегрирования по времени в методе молекулярной динамики был равен 2 фс. Применяемые потенциалы Зоупа и Мишина, наряду с другими свойствами, довольно хорошо описывают температуры плавления Ti и Al. В нашей модели были получены значения 1995 и 990 К соответственно (справочные зна-

чения: 1943 и 933 К). Плавление алюминия в модели происходило, как правило, значительно быстрее диффузии, в течение нескольких пикосекунд, тогда как моделирование взаимной диффузии проводилось в течение нескольких сот пикосекунд, в связи с чем, влияние самого процесса плавления на диффузионные характеристики было небольшим.

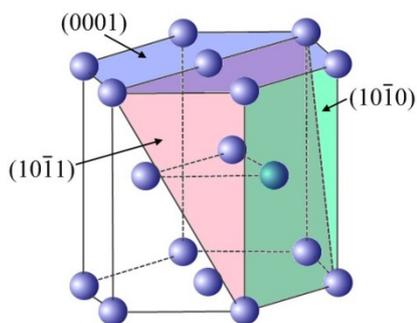


Рис.2. Рассматриваемые в работе три ориентации межфазной границы относительно ГПУ кристаллической решетки Ti

Fig.2. The three orientations of the interface considered in this work relative to the hcp crystal lattice of Ti

Результаты и обсуждение

В [14] ранее было замечено, что при твердо-жидкофазном контакте, после плавления алюминия, часть его вблизи межфазной границы Ti–Al остается в кристаллическом состоя-

нии, повторяя решетку титана, то есть фактически граница между твердым (кристаллическим) металлом и расплавом сдвигается на две-три (в зависимости от температуры) атомные плоскости вглубь алюминия (рис.3). Это обусловлено тем, что связи Ti–Al на границе значительно крепче межатомных связей в жидком алюминии.

Несмотря на фактическое смещение границы кристалл-жидкость в область алюминия, диффузия атомов Ti вглубь алюминия протекала достаточно интенсивно, чтобы ее можно было легко оценивать с помощью метода молекулярной динамики. Атомы Al диффундировали в кристаллический титан гораздо медленнее из-за сравнительно более высокой плотности кристаллической структуры по сравнению с жидким состоянием.

На рис.4 приведены кривые распределения концентрации атомов Ti в расчетных ячейках, полученные после моделирования взаимной диффузии при температурах 1500 и 1700 К в течение 300 и 200 пс соответственно для всех рассматриваемых ориентаций межфазной границы. Концентрационные кривые строились с помощью последовательного расчета, со сдвигом на 1 Å вдоль оси X, концентрации атомов Ti в слое толщиной 5 Å, параллельном плоскости YZ.

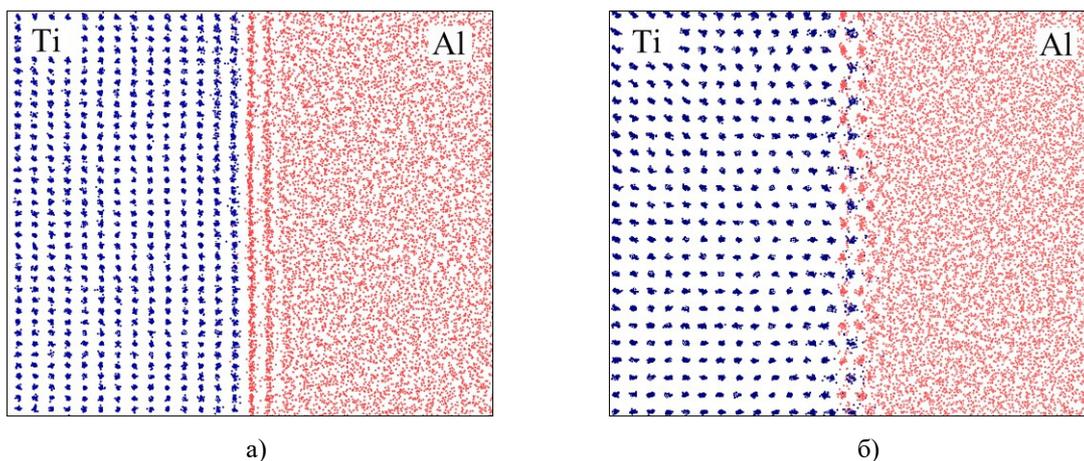


Рис.3. Формирование кристаллической структуры в Al вблизи межфазной границы при температуре выше температуры плавления алюминия (1300 К в данном случае): а) ориентация (0001); б) ориентация (10-10)

Fig.3. Formation of a crystal structure in Al near the interface at a temperature above the melting point of aluminum (1300 K in this case): a) orientation (0001); b) orientation (10-10)

Следует отметить, что полученные кривые качественно идентичны концентрационным

кривым, получаемым в реальных экспериментах [8]. Здесь правая, более пологая, часть кри-

вых – это часть, отвечающая за диффузию атомов Ti вглубь жидкого алюминия. Заметно, что для кривых, соответствующих разной ориентации межфазной границы, эти части совпадают, что свидетельствует об очевидном факте, что ориентация границы не влияет на диффузию атомов Ti в жидком алюминии. Однако левые части концентрационных кривых, как можно видеть на рис.4, отличаются. Эта часть кривых, более крутой по сравнению с правой частью, характеризует диффузию атомов Al в кристаллическом титане. Следует заметить, что начинается эта часть еще до концентрации 50 %, то есть до «среднего» положения межфазной гра-

ницы. Это связано описанным выше явлением фактического смещения границы кристалл-жидкость на два-три атомных слоя в сторону алюминия. Судя по полученным кривым, для обеих температур 1500 и 1700 К, быстрее всего диффузия атомов Al вглубь Ti протекала при наиболее «плотнупакованной» ориентации межфазной границы – (0001). Для сравнительно более «рыхлых» упаковок ($10\bar{1}0$) и ($10\bar{1}1$), напротив, диффузия атомов Al в титан происходила менее интенсивно – концентрационные кривые в этих случаях более крутые, чем для ориентации (0001).

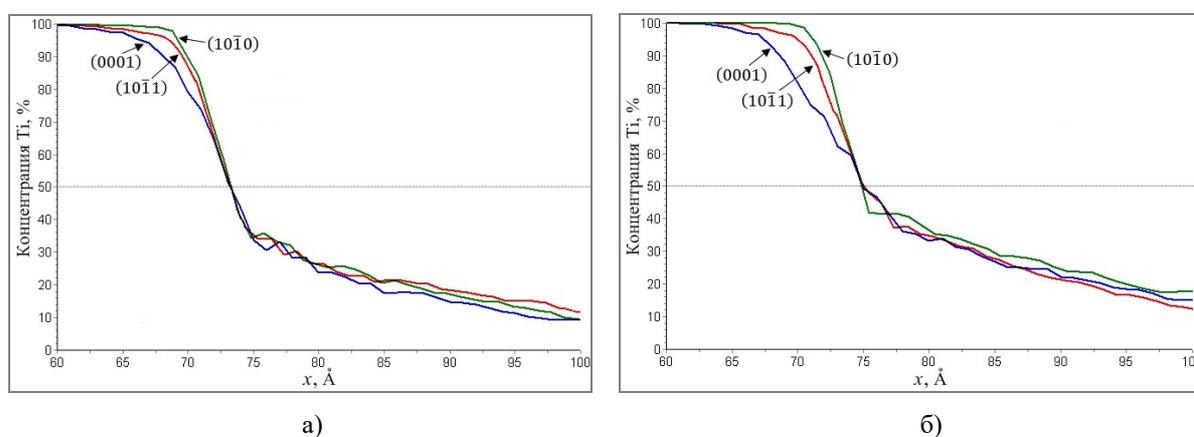


Рис.4. Распределение концентрации атомов Ti в расчетных ячейках с различной ориентацией межфазной границы: а) после 300 пс при температуре 1500 К; б) после 200 пс при температуре 1700 К

Fig.4. The concentration distribution of Ti atoms in the calculation cells with different orientations of the interfacial boundary: a) after 300 ps at a temperature of 1500 K; b) after 200 ps at 1700 K

Аналогичная анизотропия отмечается для скорости движения фронта гетерогенной кристаллизации в металлах [23-26]: фронт с относительно более «рыхлой» ориентацией (100) ГЦК решетки движется в 1,3-1,5 раза быстрее, чем фронт, имеющей ориентацию, соответствующую наибольшей упаковке (111). Данная анизотропия, очевидно, связана с энергией атомов, находящихся на межфазной границе. Вблизи границы раздела металлов при твердожидкофазном контакте, как и на границе кристалл-жидкость, определяющую роль играет разность свободных энергий атома вблизи границы в жидкой фазе и «встроенного» в границу кристаллической фазы. Эта разность, очевидно, пропорциональна энергии адатома на соответствующей свободной поверхности кристалла, а также энергии активации его миграции по данной поверхности. Например, в [27] с помощью компьютерного моделирования рассчитано, что энергия активации диффузии адатомов по сво-

бодной поверхности (100) ГЦК металлов почти в два раза больше, чем по поверхности (111).

Для подтверждения этого предположения нами отдельно были найдены значения потенциальной энергии атома Ti на различных поверхностях кристалла титана: (0001) – -3,07 эВ, ($10\bar{1}1$) – -3,46 эВ, ($10\bar{1}0$) – -3,71 эВ. Как можно видеть, потенциальная яма, в которой находятся адатомы, в случае поверхности ($10\bar{1}0$) глубже по сравнению с ямой на поверхности (0001), вследствие вероятности отрыва атома от первой поверхности выше, чем от второй.

Влияние деформации на интенсивность взаимной диффузии оценивалось по коэффициенту диффузии атомов Ti вглубь алюминия в течение 50 пс в слое толщиной 10 Å, параллельном межфазной границе и охватывающем ее. Оценка эта качественная и характеризует в основном интенсивность отрыва атомов Ti от границы и последующее увлечение их вглубь

алюминия. Кроме этого, получаемые таким образом коэффициенты диффузии в значительной степени зависели от ширины и положения расчетного слоя. Тем не менее, данная характеристика достаточно наглядна для оценки интенсивности взаимной диффузии. Перед каждым вычислением коэффициента расчетная ячейка охлаждалась до минимальной температуры для исключения влияния тепловых колебаний атомов.

На рис.5 показаны найденные в настоящей работе зависимости коэффициента диффузии

атомов Ti вдоль оси x от относительной деформации отдельно вдоль осей y и z . Относительная деформация варьировалась от 3 % сжатия (отрицательные значения ε на рисунке) до 3 % растяжения (положительные значения). Несмотря на сравнительно большие значения деформации, пластические сдвиги при данных значениях в молекулярно-динамической модели не инициировались, т.е. в работе рассматривалась упругая деформация.

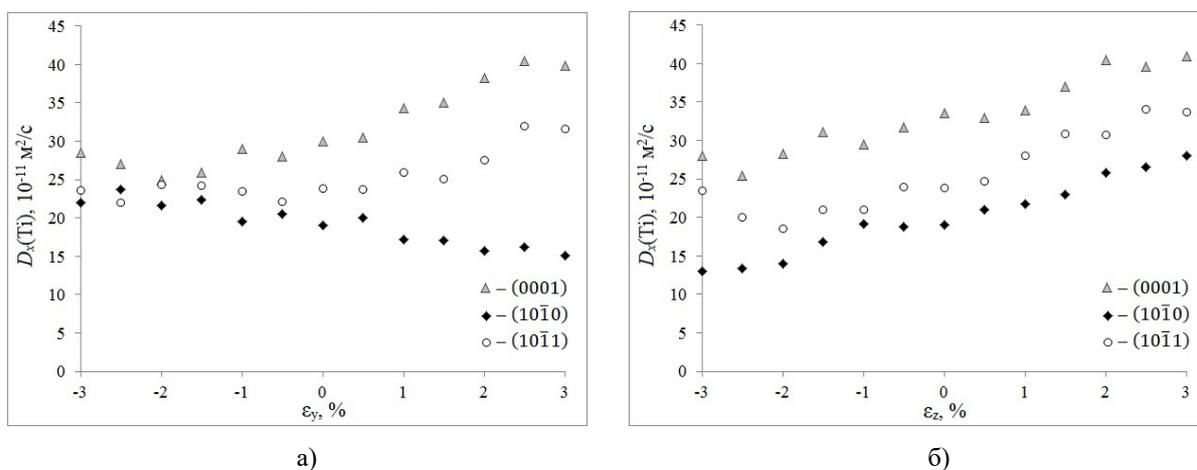


Рис.5. Распределение концентрации атомов Ti в расчетных ячейках: а) после 300 пс при температуре 1500 К; б) после 200 пс при температуре 1700 К. Цифрами отмечены рассматриваемые ориентации: 1 – (0001), 2 – (10 $\bar{1}$ 0), 3 – (10 $\bar{1}$ 1)

Fig.5. The concentration distribution of Ti atoms in the calculation cells: a) after 300 ps at a temperature of 1500 K; b) after 200 ps at a temperature of 1700 K. The numbers indicate the considered orientations: 1 – (0001), 2 – (10 $\bar{1}$ 0), 3 – (10 $\bar{1}$ 1)

В первую очередь следует обратить внимание на то, что почти во всех случаях, кроме деформации вдоль оси Y при ориентации , происходило увеличение интенсивности диффузии при растяжении и уменьшение при сжатии. Аналогичное влияние упругой деформации наблюдалось для самодиффузии в чистых металлах [28]: при упругом сжатии происходило увеличение энергии активации диффузии. В [29] было получено, что при всестороннем сжатии происходит снижение скорости миграции границ зерен, которая связана во многих случаях с диффузионными процессами. Упругая деформация, очевидно, влияет на долю свободного объема, наличие которого в значительной степени, помимо прочего, определяет миграционную подвижность как атомов, так и дефектов, ответственных за диффузию.

Заключение

С помощью метода молекулярной динамики проведено исследование влияния ориентации межфазной границы Ti–Al на интенсивность взаимной диффузии, а также влияния не нее деформации Ti при температурах выше температуры плавления Al. Рассматривалось три ориентации границы относительно ГПУ кристалла Ti: (0001), (10 $\bar{1}$ 0) и (10 $\bar{1}$ 1). Было выяснено, что ориентация межфазной границы влияет на интенсивность диффузии в фазе Ti: более интенсивно атомы Al диффундировали в решетку титана при ориентации (0001), менее интенсивно – при ориентациях (10 $\bar{1}$ 0) и (10 $\bar{1}$ 1). Данное влияние ориентации межфазной границы связано с вероятностью отрыва атома Ti от границы кристалл-жидкость и оп-

ределяется разницей энергий атомов Ti в фазе алюминия и встроенных в границу кристаллической фазы.

На начальной стадии взаимной диффузии наблюдалось смещение границы между кристаллом и жидким металлом от самой границы раздела Ti и Al на две-три атомные плоскости в фазу алюминия – тонкий слой алюминия вблизи границы оставался в кристаллическом состоянии, повторяя кристаллическую решетку титана. Это обусловлено тем, что связи Ti–Al на границе значительно крепче межатомных связей в жидком алюминии.

При исследовании влияния упругой деформации на интенсивность взаимной диффузии было получено, что почти во всех случаях интенсивность диффузии увеличивается при растяжении и уменьшается при сжатии, что связано с соответствующим изменением свободного объема, в значительной степени влияющего на диффузионную подвижность атомов.

Список литературы

1. Kim Y.W. Ordered intermetallic alloys, part III: gamma titanium aluminides // *The Journal of The Minerals, Metals & Materials Society*. 1994. V. 46. P. 30–39.
2. Appel F., Beaven P.A., Wagner R. Deformation processes related to interfacial boundaries in two-phase γ -titanium aluminides // *Acta Metallurgica et Materialia*. 1993. V. 41. P. 1721–1732.
3. Lapin J. TiAl-based alloys: Present status and future perspectives // *In Proceedings of the Metal; Tanger: Ostrava, Czech Republic*. 2009. V. 19, N 21.5. P. 2019–2031.
4. Tetsui T. Manufacturing technology for gamma-TiAl alloy in current and future applications // *Rare Metals*. 2011. V. 30. P. 294–299.
5. Voisin T., Monchoux J.-P., Couret A. Near-net shaping of titanium-aluminum jet engine turbine blades by SPS // *In book: Spark Plasma Sintering of Materials*. 2019. P. 713–737.
6. Wu Q., Wang J., Gu Y., Guo Y., Xu G., Cui Y. Experimental diffusion research on BCC Ti–Al–Sn ternary alloys // *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*. 2018. V. 39. P. 724–730.
7. Thiyaneswaran N., Sivaprasad K., Ravisankar B. Nucleation and growth of TiAl₃ intermetallic phase in diffusion bonded Ti/Al Metal Intermetallic Laminate // *Scientific Reports*. 2018. V. 8. 16797.
8. Wu H., Zhang Sh., Hu H., Li J., Wu J., Li Q., Wang Zh. Concentration-dependent diffusion kinetics of Ti–Al binary system at elevated temperatures: experiments and modeling // *Intermetallics*. 2019. V. 110. P. 106483.
9. Luo J.-G., Acoff V.L. Interfacial reactions of titanium and aluminum during diffusion welding // *Welding Journal*. 2000. V. 79. P. 239-s–243-s.
10. Rusing J., Herzig Ch. Titanium self-diffusion and chemical diffusion in Ti₃Al // *Saifta Metallurgica et Matetialia*. 1995. V. 33, N 4. P. 561–566.
11. Mishin Y., Herzig Ch. Diffusion in the Ti–Al system // *Acta Materialia*. 2000. V. 48, N 3. P. 589–623.
12. Полетаев Г.М. Самодиффузия в жидких и твердых сплавах системы Ti–Al: молекулярно-динамическое моделирование // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 2021. Т. 160, № 4(10). С. 527–533.
13. Poletaev G.M., Bebikhov Yu.V., Semenov A.S., Starostenkov M.D. Self-diffusion in melts of Ni–Al and Ti–Al systems: molecular dynamics study // *Letters on Materials*. 2021. V. 11, N 4. P. 438–441.
14. Полетаев Г.М., Ракитин Р.Ю. Влияние ориентации межфазной границы Ti–Al на скорость взаимной диффузии при твердом и жидком состояниях алюминия: молекулярно-динамическое моделирование // *Физика твердого тела*. 2022. Т. 64, № 4. С. 412–417.
15. Boldyrev V.V., Tkacova K. Mechanochemistry of solids: past, present, and prospects // *Journal of Materials Synthesis and Processing*. – 2000. V. 8. P. 121–132.
16. Filimonov V.Y., Loginova M.V., Ivanov S.G., Sitnikov A.A., Yakovlev V.I., Sobachkin A.V., Negodyaev A.Z., Myasnikov A.Y. Peculiarities of phase formation processes in activated Ti+Al powder mixture during transition from combustion synthesis to high-temperature annealing // *Combustion Science and Technology*. 2020. V. 192, N 3. P. 457–470.
17. Zope R.R., Mishin Y. Interatomic potentials for atomistic simulations of the Ti–Al system // *Physical Review B*. 2003. V. 68. 024102.
18. Kim Y.-K., Kim H.-K., Jung W.-S., Lee B.-J. Atomistic modeling of the Ti–Al binary system // *Computational Materials Science*. 2016. V. 119. P. 1–8.
19. Pei Q.-X., Jhon M.H., Quek S.S., Wu Z. A systematic study of interatomic potentials for me-

chanical behaviours of Ti–Al alloys // *Computational Materials Science*. 2021. V. 188. 110239.

20. Poletaev G.M., Zorya I.V., Rakitin R.Y., Iliina M.A. Interatomic potentials for describing impurity atoms of light elements in fcc metals // *Materials Physics and Mechanics*. 2019. V. 42, N 4. P. 380–388.

21. Chen C., Zhang F., Xu H., Yang Z., Poletaev G.M. Molecular dynamics simulations of dislocation-coherent twin boundary interaction in face-centered cubic metals // *Journal of Materials Science*. 2022. V. 57. P. 1833–1849.

22. Полетаев Г.М., Зоря И.В. Влияние примесей легких элементов на скорость движения фронта кристаллизации в Ni и Ag: молекулярно-динамическое моделирование // *Письма в ЖТФ*. 2020. Т. 46, № 12. С. 6–9.

23. Mendeleev M.I., Zhang F., Song H., Sun Y., Wang C.Z., Ho K.M. Molecular dynamics simulation of the solid-liquid interface migration in terbium // *The Journal of Chemical Physics*. 2018. V. 148. 214705.

24. Zhang H.Y., Liu F., Yang Y., Sun D.Y. The molecular dynamics study of vacancy formation during solidification of pure metals // *Scientific Reports*. 2017. V. 7. 10241.

25. Mendeleev M.I., Rahman M.J., Hoyt J.J., Asta M. Molecular-dynamics study of solid–liquid interface migration in fcc metals // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 2010. V. 18. 074002.

26. Sun D.Y., Asta M., Hoyt J.J. Kinetic coefficient of Ni solid-liquid interfaces from molecular-dynamics simulations // *Physical Review B*. 2004. V. 69. 024108.

27. Liu C.L., Cohen J.M., Adams J.B., Voter A.F. EAM study of surface self-diffusion of single adatoms of fcc metals Ni, Cu, Al, Ag, Au, Pd, and Pt // *Surface Science*. 1991. V. 253. P. 334–344.

28. Драпкин Б.М. О некоторых закономерностях диффузии в металлах // *Физика металлов и металловедение*. 1992. № 7. С. 58–63.

29. Molodov D.A., Straumal B.B., Shvindlerman L.S. The effect of pressure on migration of $\langle 001 \rangle$ tilt grain boundaries in tin bicrystals // *Scripta Metallurgica*. 1984. V. 18, N 3. P. 207–211.

Информация об авторах

Г. М. Полетаев – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий

кафедрой Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова.

References

1. Kim, Y. W. (1994). Ordered intermetallic alloys, part III: gamma titanium aluminides. *The Journal of The Minerals, Metals & Materials Society*, 46, 30–39.

2. Appel, F., Beaven, P. A. & Wagner, R. (1993). Deformation processes related to interfacial boundaries in two-phase γ -titanium aluminides. *Acta Metallurgica et Materialia*, 41, 1721–1732.

3. Lapin, J. (2009). TiAl-based alloys: Present status and future perspectives. In *Proceedings of the Metal; Tanager: Ostrava, Czech Republic*, 19(21.5), 2019–2031.

4. Tetsui, T. (2011). Manufacturing technology for gamma-TiAl alloy in current and future applications. *Rare Metals*, 30, 294–299.

5. Voisin, T., Monchoux, J.-P. & Couret, A. (2019). Near-net shaping of titanium-aluminum jet engine turbine blades by SPS. In *book: Spark Plasma Sintering of Materials*, 713–737.

6. Wu, Q., Wang, J., Gu, Y., Guo, Y., Xu, G. & Cui, Y. (2018). Experimental diffusion research on BCC Ti–Al–Sn ternary alloys. *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*, 39, 724–730.

7. Thiyaneshwaran, N., Sivaprasad, K. & Ravisankar, B. (2018). Nucleation and growth of TiAl₃ intermetallic phase in diffusion bonded Ti/Al Metal Intermetallic Laminate. *Scientific Reports*, 8, 16797.

8. Wu, H., Zhang, Sh., Hu, H., Li, J., Wu, J., Li, Q. & Wang, Zh. (2019). Concentration-dependent diffusion kinetics of Ti–Al binary system at elevated temperatures: experiments and modeling. *Intermetallics*, 110, 106483.

9. Luo, J.-G. & Acoff, V. L. (2000). Interfacial reactions of titanium and aluminum during diffusion welding. *Welding Journal*, 79, 239-s–243-s.

10. Rusing, J. & Herzig, Ch. (1995) Titanium self-diffusion and chemical diffusion in Ti₃Al. *Scripta Metallurgica et Materialia*, 33(4), 561–566.

11. Mishin, Y. & Herzig, Ch. (2000). Diffusion in the Ti–Al system. *Acta Materialia*, 48(3), 589–623.

12. Poletaev, G. M. (2021). Self-diffusion in liquid and solid alloys of the Ti–Al system: molecular-dynamics simulation. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 133(4), 455–460.

13. Poletaev, G. M., Bebikhov, Yu. V., Semenov, A. S., Starostenkov, M. D. (2021). Self-diffusion in melts of Ni-Al and Ti-Al systems: molecular dynamics study. *Letters on Materials*, 11(4), 438–441.
14. Poletaev, G. M. & Rakitin, R. Y. (2022). Influence of the orientation of Ti-Al interphase boundary on the mutual diffusion rate at the solid and liquid states of aluminium: molecular dynamics simulation. *Physics of the Solid State*, 64(4), 412–417.
15. Boldyrev, V. V. & Tkacova, K. (2000). Mechanochemistry of solids: past, present, and prospects. *Journal of Materials Synthesis and Processing*, 8, 121–132.
16. Filimonov, V. Y., Loginova, M. V., Ivanov, S. G., Sitnikov, A. A., Yakovlev, V. I., Sobachkin, A. V., Negodyaev, A. Z. & Myasnikov, A. Y. (2020). Peculiarities of phase formation processes in activated Ti+Al powder mixture during transition from combustion synthesis to high-temperature annealing. *Combustion Science and Technology*, 192(3), 457–470.
17. Zope, R. R. & Mishin, Y. (2003). Interatomic potentials for atomistic simulations of the Ti-Al system. *Physical Review B*, 68, 024102.
18. Kim, Y.-K., Kim, H.-K., Jung, W.-S. & Lee, B.-J. (2016). Atomistic modeling of the Ti-Al binary system. *Computational Materials Science*, 119, 1–8.
19. Pei, Q.-X., Jhon, M. H., Quek, S. S. & Wu, Z. (2021). A systematic study of interatomic potentials for mechanical behaviours of Ti-Al alloys. *Computational Materials Science*, 188, 110239.
20. Poletaev, G. M., Zorya, I. V., Rakitin, R. Y. & Iliina, M. A. (2019). Interatomic potentials for describing impurity atoms of light elements in fcc metals. *Materials Physics and Mechanics*, 42(4), 380–388.
21. Chen, C., Zhang, F., Xu, H., Yang, Z. & Poletaev, G. M. (2022). Molecular dynamics simulations of dislocation-coherent twin boundary interaction in face-centered cubic metals. *Journal of Materials Science*, 57, 1833–1849.
22. Poletaev, G. M. & Zorya, I. V. (2020). Influence of light impurities on the crystal-melt interface velocity in Ni and Ag. Molecular dynamics simulation. *Technical Physics Letters*, 46(6), 575–578.
23. Mendeleev, M. I., Zhang, F., Song, H., Sun, Y., Wang, C. Z. & Ho, K. M. (2018). Molecular dynamics simulation of the solid-liquid interface migration in terbium. *The Journal of Chemical Physics*, 148, 214705.
24. Zhang, H. Y., Liu, F., Yang, Y. & Sun, D. Y. (2017). The molecular dynamics study of vacancy formation during solidification of pure metals. *Scientific Reports*, 7, 10241.
25. Mendeleev, M. I., Rahman, M. J., Hoyt, J. J. & Asta, M. (2010). Molecular-dynamics study of solid-liquid interface migration in fcc metals. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 18, 074002.
26. Sun, D. Y., Asta, M. & Hoyt, J. J. (2004). Kinetic coefficient of Ni solid-liquid interfaces from molecular-dynamics simulations. *Physical Review B*, 69, 024108.
27. Liu, C. L., Cohen, J. M., Adams, J. B. & Voter, A. F. (1991). EAM study of surface self-diffusion of single adatoms of fcc metals Ni, Cu, Al, Ag, Au, Pd, and Pt. *Surface Science*, 253, 334–344.
28. Drapkin, B. M. (1992). On some regularities of diffusion in metals. *Physics of metals and metallurgy*, (7), 58–63.
29. Molodov, D. A., Straumal, B. B. & Shvindlerman, L. S. (1984). The effect of pressure on migration of <001> tilt grain boundaries in tin bicrystals. *Scripta Metallurgica*, 18(3), 207–211.

Information about the authors

G. M. Poletaev – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of department, 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 25.04.2022; одобрена после рецензирования 02.05.2022; принята к публикации 10.05.2022.

The article was received by the editorial board on 25 Apr. 22; approved after reviewing on 02 May. 22; accepted for publication on 10 May.22.