

## РАЗДЕЛ 1. ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

Научная статья

1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 538.911; 536.46

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.03.001

### СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ В ГЕТЕРОФАЗНЫХ СТРУКТУРАХ АЛЮМИНИДОВ НИКЕЛЯ И ТИТАНА В ПРОЦЕССЕ ИХ СИНТЕЗА: МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗООБРАЗОВАНИЯ

Владимир Иванович Иордан<sup>1†</sup>, Игорь Александрович Шмаков<sup>2</sup>

<sup>1,2</sup> Алтайский государственный университет, пр. Ленина, 61, 656049, Барнаул, Россия

<sup>1</sup> Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН, ул. Институтская, 4/1, 630090, Новосибирск, Россия

<sup>1</sup> W\_Jordan@mail.ru<sup>†</sup>, <https://orcid.org/0000-0002-6309-7271>

<sup>2</sup> ihammers.sia@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-1658-0663>

**Аннотация.** С помощью программных пакетов LAMMPS и OVITO проведено молекулярно-динамическое моделирование процесса самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС) алюминидов никеля и титана и исследование структурно-фазовых превращений с образованием гетерофазных структур в процессе их синтеза. Для описания межатомных взаимодействий в системах Ni–Al и Ti–Al использовались ЕАМ-потенциалы Пурджи, Зоупа и Мишина. Для систем Ni–Al и Ti–Al рассматривались два типа исходных структур: слоистые и матричные нанокристаллические композитные структуры с различной стехиометрией компонентов и определенными температурными условиями иницирования (зажигания) СВС. При исследовании кинетики СВ-синтеза интерметаллидов двух систем были установлены условия на стехиометрию и диапазоны температур горения, которые разграничивают между собой проявления следующих гетерогенных механизмов протекания реакции СВС и структурообразования интерметаллидов: реакционного растворения, реакционной диффузии, кристаллизации из расплава и «мозаичного» растворения с зарождением и ростом нанокристаллических зародышей. Для слоистой нанокомпозитной структуры Ni–Al со стехиометрией Al-79,75 ат. % Ni достаточно подробно проиллюстрирована кинетика структурно-фазовых превращений с указанием выявленных дефектов упаковки и дислокаций. Кроме того, приведены иллюстрации кинетики структурно-фазовых превращений для матричных нанокомпозитных структур двух систем.

**Ключевые слова:** молекулярная динамика, диффузия, межфазная граница, никель, титан, алюминий, гетерофазная структура, структурно-фазовые превращения.

**Для цитирования:** Иордан В.И., Шмаков И.А. Структурно-фазовые превращения в гетерофазных структурах алюминидов никеля и титана в процессе их синтеза: молекулярно-динамическое исследование фазообразования // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2023. Т. 20, № 3. С. 289–298. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.03.001.

Original article

### STRUCTURAL-PHASE TRANSFORMATIONS IN HETEROPHASE STRUCTURES OF NICKEL AND TITANIUM ALUMINIDES DURING THEIR SYNTHESIS: MOLECULAR DYNAMICS STUDY OF PHASE FORMATION

Vladimir I. Jordan<sup>1†</sup>, Igor A. Shmakov<sup>2</sup>

<sup>1,2</sup> Altai State University, Lenin Pr., 61, Barnaul, 656049, Russia

<sup>1</sup> Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics, SB RAS, Institutskaya Str., 4/1, Novosibirsk, 630090, Russia

<sup>1</sup> W\_Jordan@mail.ru<sup>†</sup>, <https://orcid.org/0000-0002-6309-7271>

<sup>2</sup> ihammers.sia@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0003-1658-0663>

**Abstract.** Using the software packages LAMMPS and OVITO, molecular dynamics simulation of the process of self-propagating high-temperature synthesis (SHS) of nickel and titanium aluminides and the study of structural-phase transformations with the formation of heterophase structures during their synthesis were carried out. To describe interatomic interactions in the Ni–Al and Ti–Al systems, the EAM potentials of P. Purja, R. Zope, and Y. Mishin were used. For the Ni–Al and Ti–Al systems, the following two types of initial structures were considered: layered and matrix nanocrystalline composite structures with different component stoichiometry and certain temperature conditions for SHS initiation (ignition). In the study of the kinetics of SH-synthesis of intermetallic compounds of two systems, the conditions for stoichiometry and combustion temperature ranges were established, which distinguish between the manifestations of the following heterogeneous mechanisms of the SHS reaction and structure formation of intermetallic compounds: reactive dissolution, reaction diffusion, crystallization from the melt, and "mosaic" dissolution with the nucleation and growth of nanocrystalline nuclei. For a layered Ni–Al nanocomposite structure with a stoichiometry of Al-79.75 at. % Ni, the kinetics of structural-phase transformations is illustrated in sufficient detail, indicating the identified stacking faults and dislocations. In addition, illustrations of the kinetics of structural-phase transformations are also given for matrix nanocomposite structures of two systems.

**Keywords:** molecular dynamics, diffusion, interfacial boundary, nickel, titanium, aluminum, heterophase structure, structural-phase transformations.

**For citation:** Jordan, V. I. & Shmakov, I. A. (2023). Structural-phase transformations in heterophase structures of nickel and titanium aluminides during their synthesis: molecular dynamics study of phase formation. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 20(3), 289–298. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2023.03.001.

## Введение

Алюминиды никеля и титана в качестве высокотемпературных конструкционных материалов оказались весьма перспективными в авиационно-космической и автомобильной инженериях для создания защитных покрытий на технические изделия и материалы [1-5]. Они обладают малой плотностью, прочностными свойствами, высокой коррозионной стойкостью, жаростойкостью и жаропрочностью.

Несмотря на достаточно эффективно развитые методы исследования структурной макрокинетики СВС, до сих пор остаются не решенными до конца вопросы относительно многостадийных гетерогенных механизмов зарождения интерметаллических фаз на нано- и микроуровнях иерархии гетерогенности реакционной среды [6-8] и возникновения гетерофазных структур в продуктах реакции СВС. Решению указанных проблем способствуют возможности моделирования с использованием, например, программного пакета LAMMPS в качестве одного из наиболее эффективных вариантов программной реализации метода молекулярной динамики [9] с широким набором потенциалов межатомного взаимодействия (в т.ч., потенциалов EAM [10, 11]). Визуализацию образованных СВС-структур обеспечивает программный пакет OVITO [12-14].

Целью данной работы является исследование структурно-фазовых превращений в гетерофазных структурах алюминидов никеля и ти-

тана в процессе их синтеза, обнаруженных при определенных температурных условиях иницирования СВС и определенных стехиометрических соотношениях компонентов.

## Методика и этапы моделирования

Для моделирования кинетики процесса СВС в слоистых и матричных нанокристаллических композитных структурах систем Ni–Al и Ti–Al (рис.1 и 2) методом молекулярной динамики (МД) использовался программный пакет LAMMPS с потенциалами EAM [10, 11], используемых многими авторами, например, в работе [15]. Для визуализации результатов использован программный пакет OVITO [12-14]. В пакете LAMMPS создавались исходные структуры из нанокристаллических слоев (рис.1) и блоков (рис.2).

Предварительным этапом моделирования для всех рассмотренных структур является применение q-варианта алгоритма Полака-Рибьера-Поляка (PRP) – алгоритма сопряженных градиентов для безусловной оптимизации (<https://journalofinequalitiesandapplications.springeropen.com/articles/10.1186/s13660-021-02554-6>), с помощью которого нанокристаллические слои исходной системы под действием EAM-потенциала оптимально сближаются (по трем осям действуют периодические условия без применения канонических ансамблей).

На первом из основных этапов в течение 0,4 нс система прогревается при начальной

температуре  $T_0$  в условиях канонического NPT-ансамбля, обеспечивая «релаксацию» атомной структуры с учетом периодических граничных

условий по всем трем измерениям, которые сохраняются и на 2-ом этапе в течение 0,1 нс.

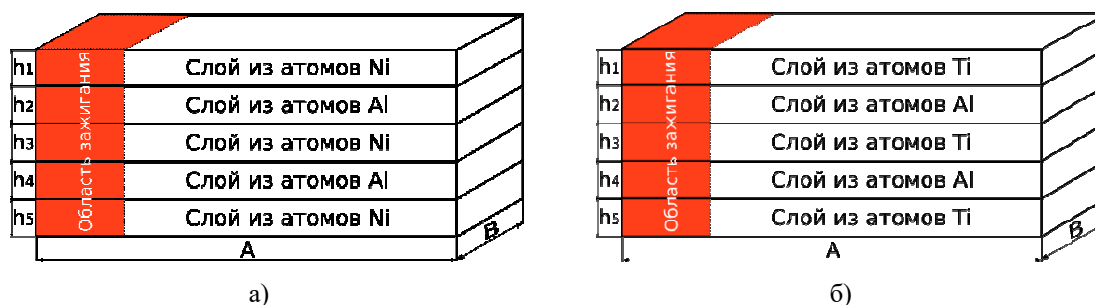


Рис.1. Изображения слоистых нанокристаллических композитных структур: (а) Ni–Al; (б) Ti–Al

Fig.1. Images of layered nanocrystalline composite structures: (a) Ni–Al; (b) Ti–Al

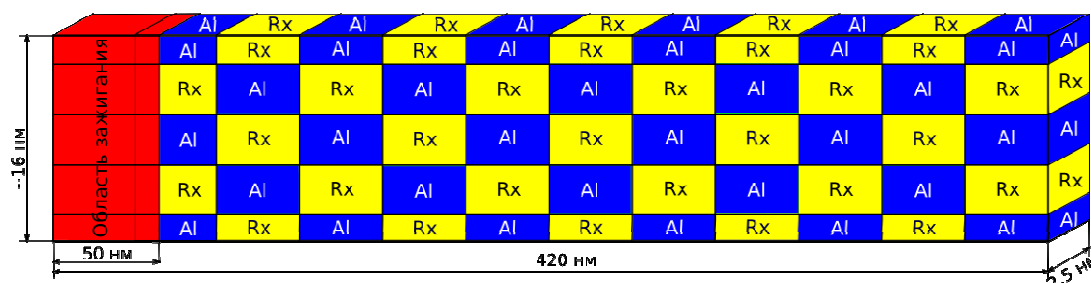


Рис.2. Изображение матричной (слоисто-блочной, шахматно-подобной) нанокристаллической композитной структуры Rx–Al: в первом случае реагентом Rx является Ni, а во втором – Ti

Fig.2. Image of a matrix (layer-block, chess-like) nanocrystalline composite structure Rx–Al: in the first case, the reagent Rx is Ni, and in the second, Ti

На 2-ом этапе в течение 0,1 нс и в пределах 50 нм (см. рис.1, 2) левая часть системы быстро нагревается по линейному закону от  $T_0$  до температуры воспламенения  $T_{ign}$  с соблюдением условий NVT-ансамбля, а в оставшейся части объема – условий NVE-ансамбля. Далее на 3-м этапе (позднее 0,5 нс) в системе фиксируются «свободные» граничные условия вдоль длины A (рис.1, на рис.2 вдоль длины 420 нм), а по оставшимся направлениям сохраняются периодические условия и условия NVE-ансамбля. В пределах 50 нм, начиная с 0,5 нс, инициируется волна горения СВС.

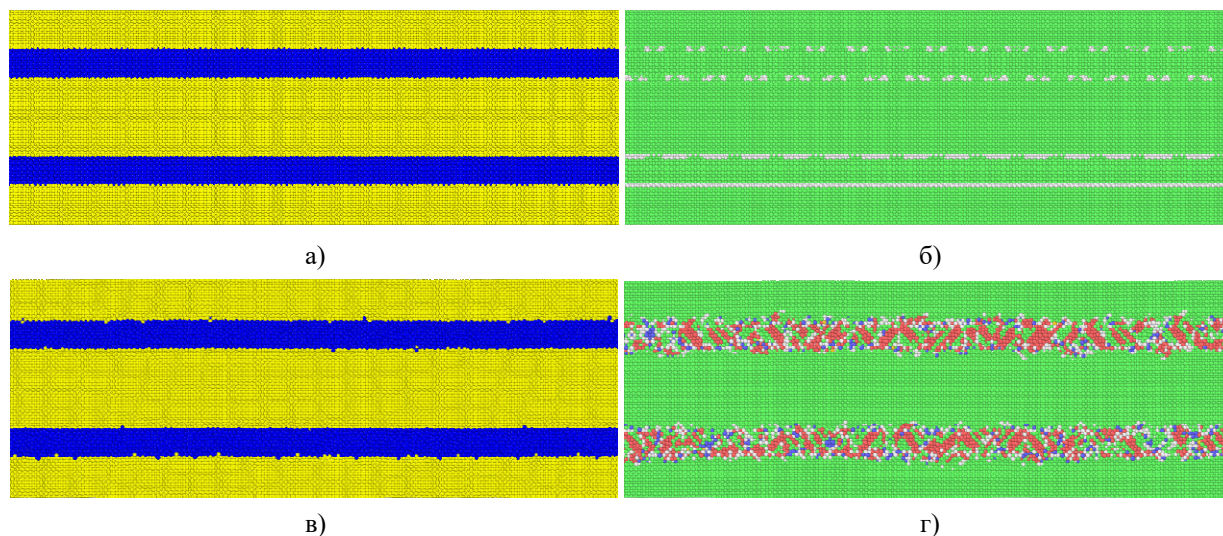
### Результаты и их обсуждение

В данной работе приведены результаты молекулярно-динамического исследования структурно-фазовых превращений в гетерофазных структурах слоистой системы Ni–Al (рис.1а), дополняющего результаты работы [16]. Исследование гетерофазной структуры слоистой системы Ti–Al (рис.1б), обнаруженной для стехиометрии  $N_{Ti}/N_{Al}=1,23$  (Al-55,16 ат. % Ti), достаточно

подробно отражено в [17] и здесь не приводится. Также приведены иллюстрации структурно-фазовых превращений и для матричных нанокompозитов двух систем с пояснениями.

Параметры слоистой системы Ni–Al (рис.1а) следующие:  $A=420$  нм,  $B=1,4$  нм,  $h_1=h_5=2,7$  нм,  $h_2=h_4=2$  нм,  $h_3=5,3$  нм и общая высота равна 14,7 нм. Общее число атомов составило 717410 атомов (число атомов Ni равно 572160, и 145250 атомов Al). Таким образом, стехиометрическое соотношение компонентов  $N_{Ni}/N_{Al}=3,94$  (Al-79,75 ат. % Ni) с учетом диаграммы состояния системы Ni–Al соответствует двухфазной области Ni+Ni<sub>3</sub>Al. На рис.3а,б показаны атомные структуры исходной системы, а на рис.3в,г – результаты предварительного этапа (применение q-алгоритма PRP для нее в пределах двух тысяч итераций) при  $T_0=600$  К.

Для визуализации типов структур (ГЦК, ОЦК, ГПУ и др.) в данной работе использовались два алгоритма пакета OVITO: «интервальный» CNA анализ (i-CNA) [12, 13] и Ackland-Jones анализ (AJ-анализ, [14]).



**Рис.3.** Слева: распределения атомов Ni (желтый цвет) и атомов Al (синий цвет) для исходной слоистой структуры Ni–Al (а) и в конце предварительного этапа (в). Справа: АЖ-анализ принадлежности атомов Ni и Al определенным типам кристаллических ячеек для исходной слоистой структуры Ni–Al (б) и в конце предварительного этапа (г): зеленый – ГЦК; красный – ГПУ; синий – ОЦК; светло-серый – тип не определен

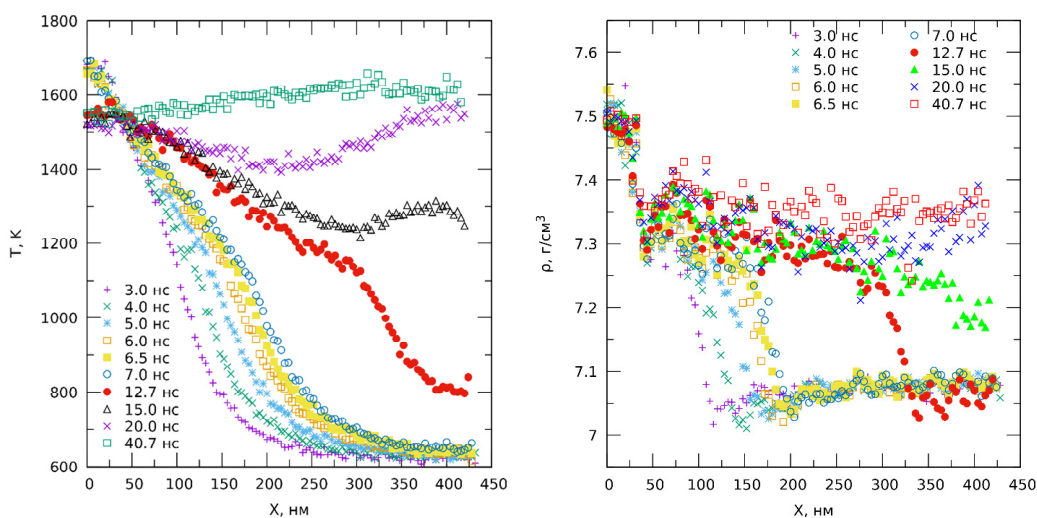
**Fig.3.** On the left: the distributions of Ni atoms (yellow) and Al atoms (blue) for the initial Ni–Al layered structure (а) and at the end of the preliminary stage (в). On the right: AJ-analysis of the belonging of Ni and Al atoms to certain types of crystal cells for the initial Ni–Al layered structure (б) and at the end of the preliminary stage (д): green – fcc; red – hcp; blue – bcc; grey – type is undefined

Металлы Ni и Al при нормальных условиях соответствуют ГЦК-структуре (подтверждается на рис.3б). На 4-х границах раздела слоев Ni и Al некоторые атомы Ni и Al (серый цвет) не распознаны как принадлежащие ГЦК-типу из-за несовпадения размеров их ячеек. На предварительном этапе слоистая система Ni–Al прогревается при  $T_0=600$  К (Al в состоянии твердой фазы), и производится оптимизация расстояний между слоями под действием ЕАМ-потенциала с учетом периодических условий по трем осям без применения канонических ансамблей. Как видно на рис.3г, ГЦК-структура слоев Ni осталась прежней, а в двух слоях Al образуются плоские дефекты упаковки в ГЦК-структуре за счет движения дислокаций в плоскости скольжения (111) [18]. Первоначальная ГЦК-структура перестраивается в структуру с наличием ГЦК- и ГПУ-прослоек. Кроме того, можно выделить дефекты в виде «двойников отжига» (угол порядка  $49,5-50^\circ$ ).

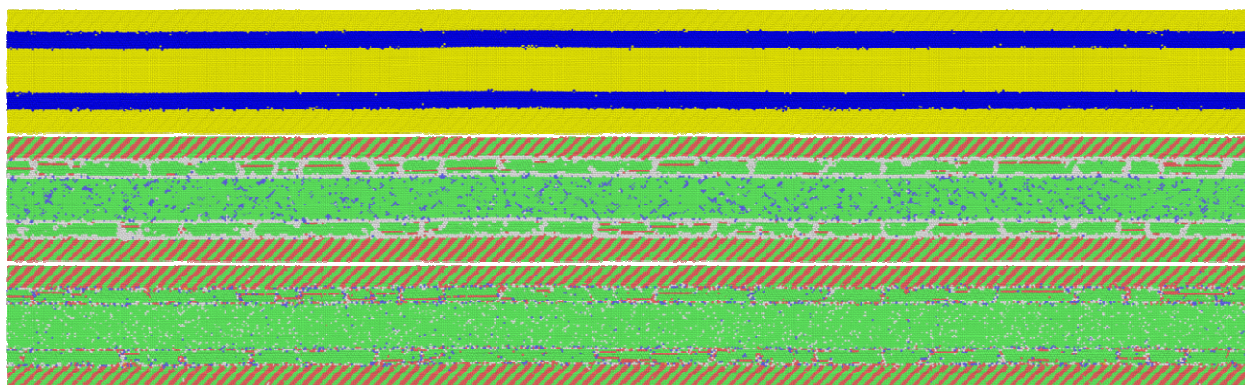
Продолжив этапы моделирования СВС, описанные выше (релаксация, зажигание СВС и этап движения волны СВС), были получены наборы профилей температуры и плотности вещества (рис.4) вдоль направления волны горения (вдоль длины  $A$ , рис.1а). Для расчета и построения профилей весь объем системы разбивался на последовательность блоков [18, 19] с размерами  $4 \times 1,4 \times 14,7$  нм (вдоль длины  $A$  с

шагом 4 нм) и были получены два линейных массива по 105 значений. Как видно на рис.4, волна горения проходит 420 нм за 20 нс (скорость волны порядка 20 м/с), затем температура в системе выравнивается от 1450–1500 К до уровня 1600 К. К моменту времени 20 нс плотность вещества выравнивается на уровне  $7,3-7,35$  г/см<sup>3</sup> и позднее уровень поднимается до  $7,36-7,38$  г/см<sup>3</sup>. За все время процесса СВС в начальной зоне системы, в которой инициировалось зажигание СВС, плотность практически не меняется и равна порядка  $7,48-7,5$  г/см<sup>3</sup> (соответствует плотности смеси фаз Ni+Ni<sub>3</sub>Al). Значения  $7,36-7,38$  г/см<sup>3</sup> соответствуют плотности трехкомпонентной области Ni+Ni<sub>3</sub>Al+NiAl, подтверждаемой анализом последовательности структурно-фазовых превращений, показанных на фрагментах рис.5 и рис.6, начиная с фрагмента (а) и по фрагмент (ж). На всех фрагментах рис.5 и рис.6 показано по три снимка: первый – распределение атомов Ni (желтый цвет) и Al (синий цвет); второй – принадлежность атомов Ni и Al определенным типам кристаллических ячеек, определяемая алгоритмом i-CNA; третий – принадлежность атомов Ni и Al определенным типам кристаллических ячеек, определяемая алгоритмом АЖ-анализа. Для обоих алгоритмов распознавания типов ячеек верно сопоставление: зеленый – ГЦК; красный – ГПУ; синий – ОЦК; серый – тип не определен.

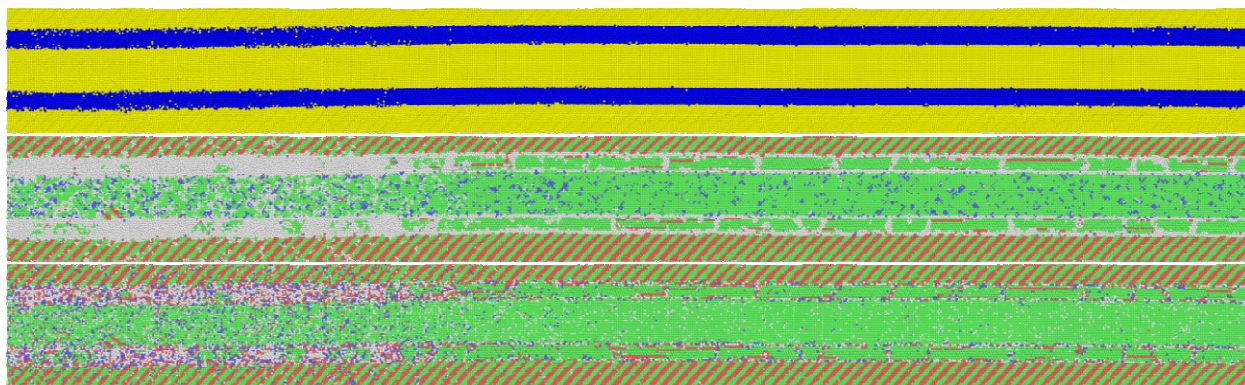




**Рис.4.** Набор температурных профилей (слева) и набор профилей плотности вещества (справа)  
**Fig.4.** Set of temperature profiles (left) and set of matter density profiles (right)



а)  $\tau=0,4$  нс – окончание первого этапа моделирования СВС (релаксация атомной структуры),  $\Delta L=150$  нм

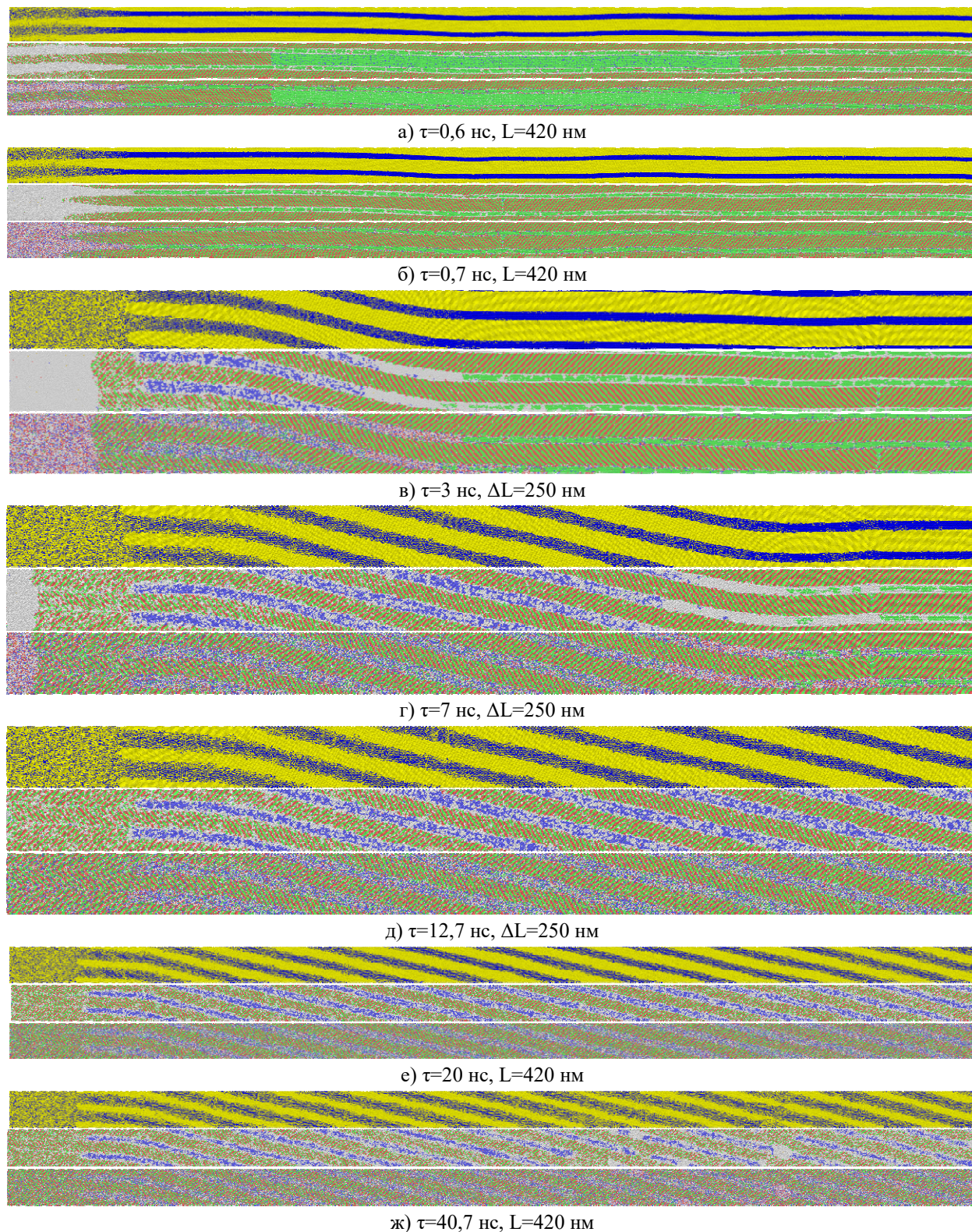


б)  $\tau=0,5$  нс – окончание второго этапа моделирования СВС (зажигание СВС),  $\Delta L=150$  нм

**Рис.5.** Наборы снимков структуры Ni–Al в моменты окончания первого (а) и второго (б) этапов СВС. В каждом наборе снимков: верхний – распределение атомов Ni (желтый) и Al (синий) по слоям; средний (алгоритм i-CNA) и нижний (AJ-анализ) – распределения атомов по типам ячеек (зеленый – ГЦК; красный – ГПУ; синий – ОЦК; серый – тип не определен). Размер  $\Delta L=150$  нм отсчитан от начала структуры (слева)

**Fig.5.** Sets of snapshots of the Ni–Al structure at the end of the first (a) and second (b) SHS stages. In each set of snapshots: the upper one shows the distribution of Ni (yellow) and Al (blue) atoms over the layers; middle (i-CNA algorithm) and bottom (AJ-analysis) – distributions of atoms by cell types (green – fcc; red – hcp; blue – bcc; grey – type is undetermined). Size  $\Delta L=150$  nm counted from the beginning of the structure (left)





**Рис.6.** Наборы снимков структуры Ni–Al в последовательные моменты времени движения волны горения СВС. В каждом наборе описания верхнего, среднего и нижнего снимков аналогичны описаниям на рис.5. Размер  $\Delta L=250$  нм отсчитан от начала структуры (слева). Размер  $L=420$  нм – длина всей структуры Ni–Al

**Fig.6.** Sets of snapshots of the Ni–Al structure at successive moments of the motion of the SHS combustion wave. In each set, the descriptions of the top, middle, and bottom snapshots are similar to the descriptions in Fig.5. The size  $\Delta L=250$  nm is counted from the beginning of the structure (left). Size  $L=420$  nm – the length of the entire Ni–Al structure



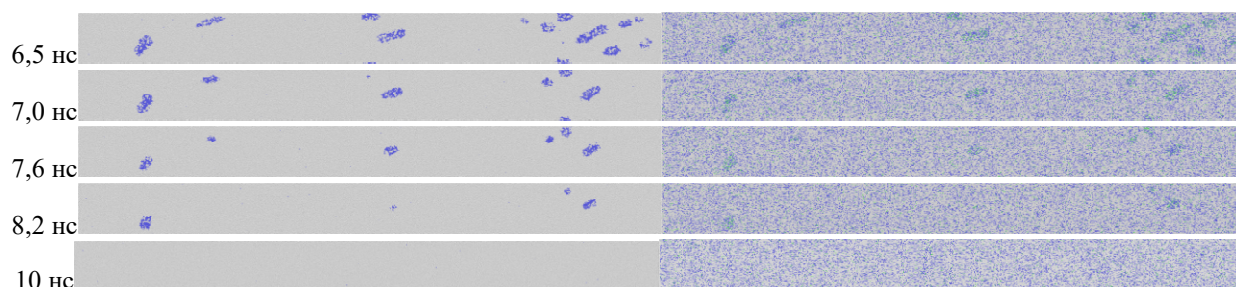
Сравнивая между собой два инструмента исследования структуро- и фазообразования в процессе СВС (алгоритм *i*-CNA и алгоритм AJ-анализа) по снимкам (рис.5, 6, 7) можно отметить, что алгоритм *i*-CAN немного лучше распознает кластеры ОЦК-атомов (синий цвет, нанозерна фазы В2–NiAl) по сравнению с AJ-анализом, но другие типы, например, ГПУ- и ГЦК-атомы (соответственно, красный и зеленый цвета) лучше распознает AJ-анализ (иногда *i*-CAN в этих случаях не определяет тип – серый цвет). Проведем краткий анализ рис.5 и 6.

В течение этапа релаксации (0,4 нс, рис.5а) в слоях твердофазного Al ( $T_0=600$  К) в условиях NPT-ансамбля восстанавливается ГЦК-структура, но в крайних Ni-слоях ГЦК-структура перестраивается в периодическую структуру с чередованием прослоек ГЦК/ГПУ, возникает плоский дефект упаковки за счет разделения дислокации  $\frac{1}{2}(110)$  на частичные дислокации Шокли в плоскости скольжения (111) [18]. Чередование прослоек ГЦК/ГПУ в крайних Ni-слоях сохраняется и далее по времени. В среднем же Ni-слое ГЦК-структура сохраняется до конца ( $\tau=0,5$  нс) второго этапа (зажигания СВС), но затем с двух концов в направлении к середине ( $X=210$  нм) она сокращается наполовину к моменту  $\tau=0,6$  нс. Вместо ГЦК-структуры в симметричных крайних зонах среднего Ni-слоя появляются зеркально отраженные относительно вертикальной (плоской) границы две структуры с чередованием прослоек ГЦК/ГПУ. К моменту  $\tau=0,7$  нс эти две зеркально-симметричные структуры сходятся на границе (угол между ними приблизительно  $99-100^\circ$ ), демонстрируя эффект «двойникования» (при температурном отжиге, [18]), который заметен даже на последнем фрагменте (рис.6ж). Кроме того, двойникование образует-

ся и с горизонтальными плоскими границами, проходящими по границам внутреннего Ni-слоя [18].

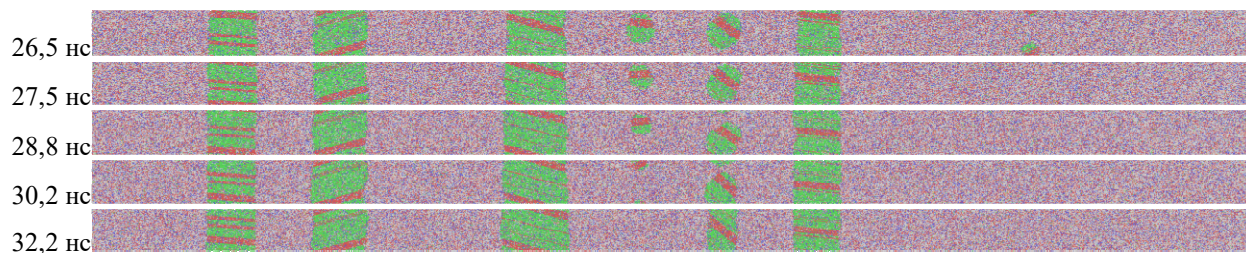
Анализируя температурную кинетику (рис.4) и сопоставляя ее с рис.6, можно выделить стадию реакционного растворения (в пределах 50 нм – в зоне зажигания СВС наблюдается сверхадиабатическая температура горения до 1700 К), в которой со временем (к 12,7 нс) формируется двухфазная область Ni+Ni<sub>3</sub>Al с периодической структурой упаковки (чередованием плоских прослоек ГЦК/ГПУ). В это же время в слоях Al (в тех зонах, где волна горения переводит Al в жидкое состояние) происходит интенсивное растворение (диффузия) атомов Ni с образованием нанокристаллических зародышей (нанозерен) В2–NiAl. Со временем толщина Ni-слоев уменьшается, а толщина слоев с фазой В2–NiAl растет, но не за счет роста размеров нанозерен В2–NiAl (толщина непосредственно самого внутреннего слоя фазы В2–NiAl при  $\tau>0,7$  нс практически не изменяется), а за счет того, что в утолщениях по обе стороны слоя фазы В2–NiAl нарастают примыкающие к ней два двухфазных слоя Ni+Ni<sub>3</sub>Al. В интервале времени от 20 и до 40,7 нс во второй половине системы (от  $X=250$  нм и до конца  $X=420$  нм) температура находится на максимальном уровне, приблизительно равного 1653 К (точка плавления фазы Ni<sub>3</sub>Al), поэтому для этого участка на рис.6ж в некоторых локальных местах заметно разрушение кристаллических структур В2–NiAl и Ni+Ni<sub>3</sub>Al.

Рассмотрим кинетику структурно-фазовых превращений (рис.7, 8) в матричных (слоистоблочных) нанокompозитных структурах Ni–Al и Ti–Al (рис.2) в кратком изложении с учетом опубликованных ранее работ [19, 20].



**Рис.7.** Наборы снимков структурно-фазовых превращений в слоисто-блочной системе Ni–Al в процессе СВС: слева – набор получен с помощью алгоритма *i*-CNA; справа – с помощью AJ-анализа

**Fig.7.** Sets of snapshots of structural-phase transformations in the Ni–Al layered-block system during SHS: on the left – the set was obtained using the *i*-CNA algorithm; on the right – the set was obtained using the AJ analysis



**Рис.8.** Набор снимков структурно-фазовых превращений в слоисто-блочной системе Ti–Al в процессе СВС для указанных моментов времени (набор получен с помощью алгоритма АЖ-анализа)

**Fig.8.** A set of snapshots of structural-phase transformations in the Ti–Al layered-block system during SHS for the indicated time points (the set was obtained using the AJ-analysis)

Для слоисто-блочной системы Ni–Al ( $N_{Ni}/N_{Al}=2,164$ , т.е. Ni % =68,4 % и Al % =31,6 %) выбраны снимки (рис.7). Общее количество атомов в системе равно 992340. Начальная температура  $T_0$  была равна 600 К, а температура зажигания  $T_{ign}$  равна 1200 К.

Температура горения (по времени до 6 нс) находилась в диапазоне 1630-1650 К [19] и из расплава кристаллизовались несколько нанозерен (см. рис.7) с фазами B2–NiAl (ОЦК-тип, синий цвет) и  $L1_2$ –Ni<sub>3</sub>Al (ГЦК-тип, зеленый цвет, АЖ-анализ). Затем температура немного возросла до 1660-1670 К и превысила точку плавления фазы Ni<sub>3</sub>Al ( $T=1653$  К), что и привело к разрушению структуры нанозерен.

Для слоисто-блочной системы Ti–Al ( $N_{Ti}/N_{Al}=1,242$ , т.е. Ti % =55,4 % и Al % =44,6 %) выбраны снимки (рис.8). Начальная температура  $T_0$  была равна 800 К, а температура зажигания  $T_{ign}=1400$  К. Общее количество атомов равно 1028175. Температура горения находилась в диапазоне 1440-1510 К [20]. В зонах с температурой горения, меньшей точки плавления фазы Ti<sub>3</sub>Al ( $T=1453$  К), сохранились пять устойчивых гетерофазных структур (рис.8). В них прожилки красного цвета (ГПУ-тип) соответствуют фазе Ti<sub>3</sub>Al, а область зеленого цвета (ГЦК-тип) – фазе  $\gamma$ -TiAl.

### Заключение

С помощью молекулярно-динамического моделирования процесса СВ-синтеза алюминидов никеля и титана проведено исследование структурно-фазовых превращений с образованием гетерофазных структур в процессе их синтеза. Для описания межатомных взаимодействий в системах Ni–Al и Ti–Al использовались ЕАМ-потенциалы [10, 11]. Для этих систем рассматривалось два типа исходных структур: слоистые и матричные нанокристаллические композитные структуры с различной стехиометрией компонентов и определенными темпе-

ратурными условиями инициирования (зажигания) СВС. При исследовании кинетики СВ-синтеза интерметаллидов двух систем были определены условия на стехиометрию и диапазоны температур горения, которые разграничивают между собой проявления гетерогенных механизмов протекания реакции СВС и структурообразования интерметаллидов. А именно: реакционное растворение происходит при концентрациях Al свыше 45 % и при высоких начальных температурах ( $T_0>400$ -500 К) и высоких температурах горения (приблизительно при  $T>1653$  К для системы Ni–Al, т.е. выше точки плавления Ni<sub>3</sub>Al; при  $T>1453$  К для системы Ti–Al, т.е. выше точки плавления Ti<sub>3</sub>Al). При пониженных  $T_0$  ( $T_0<400$  К) и температурах горения (соответственно, при  $T<1653$  К и  $T<1453$  К) с такой же концентрацией Al (свыше 45 %) происходит кристаллизация из расплава, что подтверждается работами [6, 7]. При  $T_0>400$  К и концентрации Al ниже 45 % (рис.6, фрагменты (б)-(ж)) в слое жидкого Al системы Ni–Al происходит зарождение и рост нанокристаллических зародышей фазы B2–NiAl (округлой или, чаще всего, хаотичной формы). Авторы работы [6] этому механизму дали название «мозаичного» растворения с зарождением нанокристаллических зародышей («нанозерен»). Кинетика в слоистой нанокompозитной структуре Ni–Al со стехиометрией Al-79,75 ат. % Ni подтверждает такой механизм и достаточно подробно иллюстрирует структурно-фазовые трансформации с указанием выявленных дефектов упаковки и дислокаций. Кроме того, выше приведены иллюстрации кинетики структурно-фазовых трансформаций и для матричных нанокompозитных структур двух систем.

### Список литературы

1. Yvon P., Carré F. Structural materials challenges for advanced reactor systems // J. Nucl. Mater. 2009. V. 385. P. 217–222.



2. Tetsui T. Manufacturing technology for gamma-TiAl alloy in current and future applications // *Rare Metals*. 2011. V. 30. P. 294–299.
3. 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.
4. Пячин С.А., Ершова Т.Б., Бурков А.А., Власова Н.М., Комарова В.С. Использование алюминидов титана для создания электроискровых покрытий // *Известия ВУЗов. Порошковая металлургия и функциональные покрытия*. 2015. № 1. С. 55–61.
5. Аванесян Т.Ч. Особенности высокотемпературного окисления и микродугового оксидирования сплавов на основе  $\gamma$ -TiAl. Дисс. ... к.х.н.: 05.17.03. М., 2014. 159 с.
6. Turlo V., Politano O., Baras F. Microstructure evolution and self-propagating reactions in Ni-Al nanofolios: an atomic-scale description // *J. of Alloys and Compounds*. 2017. V. 708. P. 989–998.
7. Politano O., Baras F., Mukasyan A., Vadchenko S.G., Rogachev A.S. Microstructure development during NiAl intermetallic synthesis in reactive Ni–Al nanolayers: Numerical investigations vs TEM observations // *Surface & Coatings Technology*. 2013. V. 215, No. 25. P. 485–492.
8. Schwarz F., Spolenak R. The influence of premixed interlayers on the reaction propagation in Al-Ni multilayers – An MD approach // *J. Appl. Phys.* 2022. V. 131. P. 075107.
9. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // *J. Comp. Phys.* 1995. No. 117. P. 1–19.
10. Purja P.G.P., Mishin Y. Development of an interatomic potential for the Ni-Al system // *Philosophical Magazine*. 2009. V. 89(34–36). P. 3245–3267.
11. Zope R.R., Mishin Y. Interatomic Potentials for Atomistic Simulations of the Ti–Al System // *Phys. Rev. B*. 2003. V. 68. P. 024102.
12. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 2010. V. 18. P. 015012.
13. Larsen P.M. Revisiting the Common Neighbour Analysis and the Centrosymmetry Parameter [Электронный ресурс] / Официальный сайт – <https://doi.org/10.48550/arXiv.2003.08879>. Дата обращения 19 Mar 2020.
14. Ackland G.J., Jones A.P. Applications of local crystal structure measures in experiment and simulation // *Phys. Rev. B*. 2006. V. 73(5). P. 054104.
15. 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.
16. Шмаков И.А., Иордан В.И., Соколова И.Е. Компьютерное моделирование СВ-синтеза алюминидов никеля методом молекулярной динамики в пакете LAMMPS с использованием параллельных вычислений // *Высокопроизводительные вычислительные системы и технологии*. 2018. № 1(8). С. 48–54.
17. Jordan V.I. and Shmakov I.A. Reproducibility of a heterophase structure emergence effect when changing the ignition temperature of SHS in a layered nanosized nonstoichiometric Ti-Al system // *IOP Conf. Journal of Physics: Conf. Series*. 2019. V. 1281. P. 012030.
18. Келли А., Гровс Г. Кристаллография и дефекты в кристаллах. Пер. с англ. М.: Мир, 1974. 496 с.
19. Jordan V., Shmakov I. Thermal and Microstructural Analysis of Intermetallide Synthesis in the Ni–Al Layered-Block Atomic Structure Based on the Computer-Aided Simulation of SHS // *Communications in Computer and Information Science*. 2020. V. 1304. P. 43–61.
20. Иордан В.И., Шмаков И.А. 3D визуализация гетерофазных интерметаллидных структур на основе компьютерного моделирования СВС в наноразмерной слоисто-блочной структуре Ti–Al // *Программная инженерия*. 2022. Т. 13, № 10. С. 515–524.

#### Информация об авторах

В. И. Иордан – кандидат физико-математических наук, доцент, Алтайского государственного университета; ведущий математик Института теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН.

И. А. Шмаков – старший преподаватель Алтайского государственного университета.

#### References

1. Yvon, P. & Carré, F. (2009). Structural materials challenges for advanced reactor systems. *J. Nucl. Mater.*, 385, 217–222.
2. Tetsui, T. (2011). Manufacturing technology for gamma-TiAl alloy in current and future applications. *Rare Metals*, 30, 294–299.

3. 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.
4. Pyachin, S. A., Ershova, T. B., Burkov, A. A., Vlasova, N. M. & Komarova, V. S. (2015). Using titanium aluminides to create electrospark coatings. *Izvestiya vuzov. Powder metallurgy and functional coatings*, 1, 55–61. (In Russ.).
5. Avanesyan, T. Ch. (2014). Features of high-temperature oxidation and microarc oxidation of alloys based on  $\gamma$ -TiAl. *Diss. ... Ph.D.*: 05.17.03. M., 159 p.
6. Turlo, V., Politano, O. & Baras, F. (2017). Microstructure evolution and self-propagating reactions in Ni-Al nanofibers: an atomic-scale description. *J. of Alloys and Comp.*, 708, 989–998.
7. Politano, O., Baras, F., Mukasyan, A., Vadchenko, S. G. & Rogachev, A. S. (2013). Microstructure development during NiAl intermetallic synthesis in reactive Ni–Al nanolayers: Numerical investigations vs TEM observations. *Surface & Coatings Technology*, 215(25), 485–492.
8. Schwarz, F. & Spolenak, R. (2022). The influence of premixed interlayers on the reaction propagation in Al-Ni multilayers – An MD approach. *J. Appl. Phys.*, 131, 075107.
9. Plimpton, S. (1995). Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics. *J. Comp. Phys.*, 117, 1–19.
10. Purja, P. G. P. & Mishin, Y. (2009). Development of an interatomic potential for the Ni-Al system. *Philosophical Magazine*, 89(34–36), 3245–3267.
11. Zope, R. R. & Mishin, Y. (2003). Interatomic potentials for atomistic simulations of the Ti–Al system. *Phys. Rev. B.*, 68, 024102.
12. Stukowski, A. (2010). Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO – the Open Visualization Tool. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 18, 015012.
13. Larsen P.M. Revisiting the Common Neighbour Analysis and the Centrosymmetry Parameter [Electronic resource] / Official site – <https://doi.org/10.48550/arXiv.2003.08879>. Date of the application 19 Mar 2020.
14. Ackland, G. J. & Jones, A. P. (2006). Applications of local crystal structure measures in experiment and simulation. *Phys. Rev. B.*, 73(5), 054104.
15. 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 sovremennoy materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 19(2), 188–196. (In Russ.).
16. Shmakov, I. A., Jordan, V. I. & Sokolova, I. E. (2018). Computer simulation of the SH-synthesis of nickel aluminide by the molecular dynamics method in the LAMMPS package using parallel computing. *High-Performance Computing Systems and Technologies*, 1(8), 48–54. (In Russ.).
17. Jordan, V. I. & Shmakov, I. A. (2019). Reproducibility of a heterophase structure emergence effect when changing the ignition temperature of SHS in a layered nanosized non-stoichiometric Ti-Al system. *IOP Conf. Journal of Physics: Conf. Series*, 1281, 012030.
18. Kelly A. & Groves G. (1974). Crystallography and crystal defects. Transl. from English. Moscow: Publishing House “Mir”. P. 496.
19. Jordan, V. & Shmakov, I. (2020). Thermal and Microstructural Analysis of Intermetallic Synthesis in the Ni–Al Layered-Block Atomic Structure Based on the Computer-Aided Simulation of SHS. *Communications in Computer and Information Science*, 1304, 43–61.
20. Jordan, V. I. & Shmakov, I. A. (2022). 3D visualization of heterophase intermetallic structures based on computer simulation of SHS in a nanosized Ti–Al layered-block structure. *Programmnyaya Inzheneriya*, 13(10), 515–524. (In Russ.).

### Information about the authors

V. I. Jordan – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor of the Altai State University; Leading Mathematician of the S.A. Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics of the SB RAS.

I. A. Shmakov – Senior Lecturer of the Altai State University.

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

Статья поступила в редакцию 21.06.2023; одобрена после рецензирования 03.07.2023; принята к публикации 17.07.2023.

The article was received by the editorial board on 21 June 23; approved after reviewing 03 July 23; accepted for publication 17 July 23.