

**ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ
ПРОБЛЕМЫ
СОВРЕМЕННОГО
МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ**

Научный журнал
Издается с января 2004 г.

Том 18

Декабрь 2021 г.

№ 4

Фундаментальные проблемы современного материаловедения

том 18 №4 2021 г.

Международный специализированный научный журнал
Выходит ежеквартально
Издается с января 2004 года

Учредитель:

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова»

Соучредители:

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Алтайский государственный педагогический университет»

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Сибирский государственный индустриальный университет»

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Томский государственный архитектурно-строительный университет»

Издатель:

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова»

Адрес издателя: 656038, Алтайский край, г. Барнаул, пр-т Ленина, д. 46

Главный редактор: д.ф.-м.н., профессор Старостенков М.Д.

Тел.: +7 (385) 229-08-52 Fax: +7 (385) 236-78-64

E-mail: genphys@mail.ru

Зам. главного редактора (ответственный за выпуск): д.т.н., профессор Гурьев А.М.

Тел.: +7 (385) 229-08-63 Fax: +7 (385) 236-78-64

E-mail: gurievam@mail.ru

Зам. главного редактора (ответственный за online выпуск): д.ф.-м.н., профессор Полетаев Г.М.

Тел.: +7 (385) 229-08-52 Fax: +7 (385) 236-78-64

E-mail: gmpoletaev@mail.ru

Технический редактор: к.ф.-м.н., доцент Черных Е.В.

Тел.: +7 (385) 229-08-52 Fax: +7 (385) 236-78-64

E-mail: jane_5@mail.ru

Журнал включен в Перечень ВАК ведущих российских рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученых степеней доктора и кандидата наук (редакция от 02.02.2016 г.).

Журнал включен в каталог периодических изданий Ульрих  от 18.02.2015 г., в перечень журналов, вошедших в ядро РИНЦ и в список 650 российских журналов, вошедших в Russian Science Citation Index (RSCI), представленный на платформе Web of Science.

Журнал зарегистрирован в Федеральной службе по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций.

Свидетельство о регистрации средства массовой информации: ПИ № ФС77-75026 от 01.02.2019 г.

Информация о подписке:

«Фундаментальные проблемы современного материаловедения» выходит раз в квартал. Индекс в каталоге ООО «Урал-Пресс» – 31038.

Цена годовой подписки через редакцию: 1200 руб. (300 руб. за номер).

Адрес редакции: 656038, Алтайский край, г. Барнаул, пр-т Ленина, д. 46

Тел./факс (3852) 29-08-52

E-mail: genphys@mail.ru

Адрес в Internet: www.nsmds.ru/journal.html

Редакционная коллегия:

Старостенков М.Д. (д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой физики АлтГТУ, г. Барнаул, Россия)

Глезер А.М. (д.ф.-м.н., профессор, главный научный сотрудник Национального исследовательского технологического университета «МИСиС», директор ИМФМ ЦНИИЧермет им. И.П. Бардина, член совета РАН по физике конденсированного состояния, главный редактор журнала «Деформация и разрушения», зам. главного редактора журнала «Материаловедение» ЦНИИЧермет, г. Москва, Россия)

Громов В.Е. (д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой физики СибГИУ, г. Новокузнецк, Россия)

Гурьев А.М. (д.т.н., профессор, зав. кафедрой начертательной геометрии и графики АлтГТУ, г. Барнаул, Россия)

Кащенко М.П. (д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой общей физики УГЛТУ, г. Екатеринбург, Россия)

Кхаре А. (профессор, Индийский институт науки образования и исследований, г. Пуна, Индия)

Мулюков Р.Р. (член корр. РАН, д.ф.-м.н., профессор, директор ИПСМ РАН, г. Уфа, Россия)

Мэй Шунчи (профессор, декан УТУ, г. Ухань, Китай)

Козырев Н.А. (д.т.н., профессор, проректор по научной и инновационной деятельности СибГИУ, г. Новокузнецк, Россия)

Плотников В.А. (д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой общей и экспериментальной физики АлтГУ, г. Барнаул, Россия)

Полетаев Г.М. (д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой высшей математики и математического моделирования АлтГТУ, г. Барнаул, Россия)

Потекаев А.И. (д.ф.-м.н., профессор, директор СФТИ, главный редактор журнала «Известия вузов. Физика», г. Томск, Россия)

Пышнограй Г.В. (д.ф.-м.н., профессор АлтГТУ, г. Барнаул, Россия)

Рубаник В.В. (д.т.н., член-корреспондент Национальной академии наук Беларуси, директор ГНУ "ИТА НАН Беларуси", г. Витебск, Беларусь)

Старенченко В.А. (д.ф.-м.н., профессор, декан общеобразовательного факультета ТГАСУ, г. Томск, Россия)

Лыгденов Б.Д. (д.т.н., профессор ВСГУТУ, г. Улан-Удэ, Россия)

Дмитриев С.В. (д.ф.-м.н., доцент, зав. лабораторией ИПСМ РАН, г. Уфа, Россия)

Атучин В.В. (к.ф.-м.н., доцент, руководитель лаборатории «Оптические материалы и структуры» ИФП СО РАН, г. Новосибирск, Россия)

Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedenia (Basic Problems of Material Science (BPMS) Vol. 18 No.4 (2021))

International specialized scientific journal
Issued quarterly
Published since January 2004

Founders:

Federal State Budget Educational Institution of Higher Education «Polzunov Altai State Technical University»
Federal State Budget Educational Institution of Higher Education «Altai State Pedagogical University»
Federal State Budget Educational Institution of Higher Education «Siberian State Industrial University»
Federal State Budget Educational Institution of Higher Education «Tomsk State University of Architecture and Building»

Publisher:

Federal State Budget Educational Institution of Higher Education «Polzunov Altai State Technical University»
Lenin Pr., 46, Barnaul, 656038, Russia

Editor in chief

PhD, Hab., Professor Starostenkov M.D.

Tel.: +7 (385) 229-08-52 Fax: +7 (385) 236-78-64

E-mail: genphys@mail.ru

Sub-Editors

PhD, Hab., Professor Guriev A.M.

Тел.: +7 (385) 229-08-63 Fax: +7 (385) 236-78-64

E-mail: gurievam@mail.ru

PhD, Hab., Professor Poletaev G.M.

Тел.: +7 (385) 229-08-52 Fax: +7 (385) 236-78-64

E-mail: gmpoletaev@mail.ru

Editorial board:

Starostenkov M.D., PhD, Hab., Professor, Head of Department, I.I. Polzunov Altai State Technical University, Barnaul, Russia

Glezer A.M., PhD, Hab., Professor, Chief Researcher of the National Research Technological University «MISIS», Director, G.V. Kurdjumov Institute of Metals Science and Physics, State Research Center of the Russian Federation «I.P. Bardin Central Research Institute of Ferrous Metallurgy», Moscow, Russia

Gromov V.E., PhD, Hab., Professor, Head of Department, Siberian State Industrial University, Novokuznetsk, Russia

Guriev A.M., PhD, Hab., Professor, Head of Department, I.I. Polzunov Altai State Technical University, Barnaul, Russia

Kaschenko M.P., PhD, Hab., Professor, Head of Department, Ural State Forest Engineering University, Yekaterinburg, Russia

Khare A., PhD, Hab., Professor, Indian Institute of Science Education and Research, Pune, India

Mulyukov R.R., member corr. of RAS, PhD, Hab., Professor, director, Institute for Metals Superplasticity Problems of RAS, Ufa, Russia

Mei Shunqi, Professor, dean, Wuhan Textile University, Wuhan, China

Kozyrev N.A., PhD, Hab., Professor, Siberian State Industrial University, Novokuznetsk, Russia

Plotnikov V.A., PhD, Hab., Professor, Head of Department, Altai State University, Barnaul, Russia

Poletaev G.M., PhD, Hab., Professor, Head of Department, I.I. Polzunov Altai State Technical University, Barnaul, Russia

Potekaev A.I., PhD, Hab., Professor, Director, V.D. Kuznetsov's Siberian Physical-Technical Institute, Tomsk, Russia

Pyshnograev G.V., PhD, Hab., Professor, I.I. Polzunov Altai State Technical University, Barnaul, Russia

Rubanik V.V., PhD, Hab., Corresponding Member of the National Academy of Sciences of Belarus, director of the State Scientific Institution «Institute of Technical Acoustics National Academy of Sciences of Belarus», Vitebsk, Republic of Belarus

Starenchenko V.A., PhD, Hab., Professor, Dean, Tomsk State University of Architecture and Building, Tomsk, Russia

Lygdenov B.D., PhD, Hab., Professor, East Siberia State University of Technology and Management, Ulan-Ude, Russia

Dmitriev S.V., PhD, Hab., Institute for Metals Superplasticity Problems of RAS, Ufa, Russia

Atuchin V.V., PhD, Hab., Institute of Semiconductor Physics SB of RAS, Novosibirsk, Russia

Editorial

Polzunov Altai State Technical University, Lenin Pr., 46, Barnaul, 656038, Russia
www.nsmads.ru/journal.html, e-mail: genphys@mail.ru

PhD Chernykh E.V.

Tel.: +7 (385) 229-08-52 Fax: +7 (385) 236-78-64

E-mail: jane_5@mail.ru

СОДЕРЖАНИЕ

РАЗДЕЛ 1. ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

- Н.Н. Малущин, В.Е. Громов, Д.А. Романов, Л.П. Бащенко,
А.П. Ковалев, К.В. Соснин*
Физические основы комплексных технологий упрочнения деталей на базе плазменной
наплавки в среде азота.....399
- А.С. Грязнов, В.А. Плотников, А.В. Гусева*
Динамика спектральных линий акустической эмиссии при термоупругих мартенситных
превращениях в никелиде титана.....408
- П.В. Захаров, М.Д. Старостенков, У.И. Янковская,
С.В. Дмитриев, Е.А. Корзникова*
Солитоноподобные волны при периодическом гармоническом возмущении
в интерметаллическом соединении состава A_3B414
- Ю.Ф. Иванов, В.Е. Громов, С.В. Коновалов, Ю.А. Шлярова,
С.В. Воробьев, В.Я. Целлермаер*
Структура и дислокационная субструктура высокоэнтропийного сплава $CoCrFeMnNi$
после облучения импульсными электронными пучками.....422
- О.А. Маслова, А.В. Рябых, С.А. Безносюк*
К вопросу о протонной проницаемости графена и борофена в различных
диэлектрических средах.....432
- К.А. Осинцев, И.А. Панченко, С.В. Коновалов*
Прогнозирование фазового состава высокоэнтропийного сплава $Co-Cr-Zr-Mn-Ni$
с помощью расчета феноменологических критериев.....441
- Г.М. Полетаев, В.В. Коваленко*
Молекулярно-динамическое исследование влияния ориентации межфазной границы
на скорость взаимной диффузии при твердо-жидкофазном контакте Ti и Al450
- А.С. Семенов, М.Н. Семенова, А. Упадхьяя, С.В. Дмитриев*
Хаотические дискретные брызеры в треугольной решетке Ферми-Паста-Улама.....459
- Л.И. Исаенко, А.П. Елисеев, А.А. Голошумова, М.С. Молокеев, А.Ю. Тарасова*
Получение и исследование кристаллов смешанных галогенидов для низкофононных
лазерных матриц.....470
- А.В. Рябых, О.А. Маслова, С.А. Безносюк, М.В. Чикина, В.С. Глухачева*
Влияние состава амина на способность образования производных гексаазоизовюрцитана.....478

CONTENTS

SECTION 1. CONDENSED MATTER PHYSICS

<i>N.N. Malushin, V.E. Gromov, D.A. Romanov, L.P. Bashchenko, A.P. Kovalev, K.V. Sosnin</i> Physical foundations of integrated technologies for strengthening of parts on the basis of plasma surface in a nitrogen medium.....	399
<i>A.S. Gryaznov, V.A. Plotnikov, A.V. Guseva</i> Dynamics of acoustic emission spectral lines in thermoelastic martensitic transformations in titanium nickelide.....	408
<i>P.V. Zakharov, M.D. Starostenkov, U.I. Yankovskaya, S.V. Dmitriev, E.A. Korznikova</i> Soliton like waves under periodic harmonic disturbance in intermetallic compound of composition A_3B	414
<i>Yu.F. Ivanov, V.E. Gromov, S.V. Konovalov, Yu.A. Shliarova, S.V. Vorob'ev, V.Ya. Tsellermaer</i> Structure and dislocation substructure of CoCrFeMnNi high-entropy alloy after irradiation with pulsed electron beams.....	422
<i>O.A. Maslova, A.V. Ryabykh, S.A. Beznosyuk</i> On the question of proton permeability of graphene and borophene in different dielectric medium.....	432
<i>K.A. Osintsev, I.A. Panchenko, S.V. Konovalov</i> Prediction of the phase composition of Co-Cr-Zr-Mn-Ni high-entropy alloy by calculating phenomenological criteria.....	441
<i>G.M. Poletaev, V.V. Kovalenko</i> Molecular dynamics study of the influence of the interphase boundary orientation on the velocity of mutual diffusion in solid-liquid-phase contact of Ti and Al.....	450
<i>A.S. Semenov, M.N. Semenova, A. Upadhyaya, S.V. Dmitriev</i> Chaotic discrete breathes in a Fermi-Pasta-Ulam triangular lattice.....	459
<i>L.I. Isaenko, A.P. Yelisseyev, A.A. Goloshumova, M.S. Molokeev, A.Yu. Tarasova</i> Production and investigation of crystals of mixed halogenides for low-phonon laser matrices.....	470
<i>A.V. Ryabykh, O.A. Maslova, S.A. Beznosyuk, M.V. Chikina, V.S. Glukhacheva</i> Influence of the amine composition on the ability of formation of hexaazoisowurtzitane derivatives.....	478

Научная статья

01.04.07 – Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)

УДК 538.911

doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2021.04.007

**МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ОРИЕНТАЦИИ
МЕЖФАЗНОЙ ГРАНИЦЫ НА СКОРОСТЬ ВЗАИМНОЙ ДИФФУЗИИ
ПРИ ТВЕРДО-ЖИДКОФАЗНОМ КОНТАКТЕ Ti И Al****Геннадий Михайлович Полетаев^{1†}, Виктор Викторович Коваленко²**¹ Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, пр. Ленина, 46, 656038, Барнаул, Россия² Сибирский государственный индустриальный университет, ул. Кирова, 42, 654007, Новокузнецк, Кемеровская обл. – Кузбасс, Россия[†] gmpoletaev@mail.ru[†], <https://orcid.org/0000-0002-5252-2455>² vikt.kovalenko@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1664-003X>

Аннотация. Методом молекулярной динамики проведено исследование влияния ориентации межфазной границы относительно кристаллической решетки Ti на скорость взаимной диффузии при твердо-жидкофазном контакте Ti и Al. Рассматривалось три ориентации относительно ГПУ решетки Ti: (0001), (10 $\bar{1}$ 0) и (10 $\bar{1}$ 1). Было замечено, что на начальном этапе моделирования взаимной диффузии, после плавления алюминия, часть его вблизи межфазной границы оставалась в кристаллическом состоянии, повторяя решетку титана, то есть граница между кристаллом и жидким металлом, в действительности, сдвигалась на две-три атомные плоскости вглубь алюминия. Это объясняется тем, что связь Ti–Al значительно крепче связи Al–Al, в связи с чем, в частности, температуры плавления интерметаллидов системы Ti–Al превышают температуру плавления алюминия. Наблюдалось значительное преобладание диффузии атомов Ti в жидкий Al по сравнению с диффузией атомов Al в кристаллический Ti, что объясняется, в первую очередь, отличием агрегатных состояний Ti и Al. Для трех рассматриваемых ориентаций были получены концентрационные кривые после моделирования взаимной диффузии при различных температурах. Более пологие части кривых, отвечающие за диффузию атомов Ti вглубь жидкого Al, оказались схожими. Однако части, относящиеся к диффузии атомов Al в кристаллический Ti, имели отличия: интенсивнее диффузия атомов Al в Ti протекала при ориентации (0001) и медленнее при сравнительно более «рыхлых» ориентациях (10 $\bar{1}$ 0) и (10 $\bar{1}$ 1). Данное отличие было связано с глубиной потенциальных ям, в которых находятся атомы на границе раздела жидкость–кристалл.

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., Коваленко В.В. Молекулярно-динамическое исследование влияния ориентации межфазной границы на скорость взаимной диффузии при твердо-жидкофазном контакте Ti и Al // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2021. Т. 18, № 4. С. 450–458. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2021.04.007.

Original article

**MOLECULAR DYNAMICS STUDY OF THE INFLUENCE OF THE INTERPHASE
BOUNDARY ORIENTATION ON THE VELOCITY OF MUTUAL DIFFUSION
IN SOLID-LIQUID-PHASE CONTACT OF Ti AND Al****Gennady M. Poletaev^{1†}, Victor V. Kovalenko²**¹ I.I. Polzunov Altai State Technical University, Lenin Pr., 46, Barnaul, 656038, Russia² Siberian State Industrial University, Kirov Str., 42, Novokuznetsk, 654007, Russia[†] gmpoletaev@mail.ru[†], <https://orcid.org/0000-0002-5252-2455>² vikt.kovalenko@yandex.ru, <https://orcid.org/0000-0003-1664-003X>

Abstract. The molecular dynamics method was used to study the influence of the orientation of the interphase boundary relative to the Ti crystal lattice on the velocity of mutual diffusion at solid-liquid-phase contact of Ti and Al. Three orientations with respect to the hcp Ti lattice were considered: (0001), $(10\bar{1}0)$ and $(10\bar{1}1)$. It was noted that at the initial stage of modeling mutual diffusion, after aluminum melted, part of it near the interphase boundary remained in the crystalline state, repeating the titanium lattice, that is, the boundary between the crystal and the liquid metal, in fact, shifted to two or three atomic planes deep into the aluminum. This is due to the fact that the Ti–Al bond is much stronger than the Al–Al bond, and therefore, in particular, the melting temperatures of intermetallic compounds of the Ti–Al system exceed the melting temperature of aluminum. A significant predominance of diffusion of Ti atoms into liquid Al was observed in comparison with the diffusion of Al atoms into crystalline Ti, which is explained, first of all, by the difference between the aggregate states of Ti and Al. For the three considered orientations, concentration curves were obtained after simulating mutual diffusion at different temperatures. The flatter parts of the curves responsible for the diffusion of Ti atoms deep into liquid Al turned out to be similar. However, the parts related to the diffusion of Al atoms into crystalline Ti had differences: the diffusion of Al atoms in Ti proceeded more intensively with the (0001) orientation and slower with the relatively "looser" orientations $(10\bar{1}0)$ and $(10\bar{1}1)$.

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

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

For citation: Poletaev, G. M. & Kovalenko, V. V. (2021). Molecular dynamics study of the influence of the interphase boundary orientation on the velocity of mutual diffusion in solid-liquid-phase contact of Ti and Al. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 4(18), 450–458. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2021.04.007.

Введение

Интерметаллические соединения системы Ti–Al и сплавы на их основе, благодаря сочетанию таких свойств, как низкая плотность, высокий предел текучести при повышенных температурах, хорошая стойкость к окислению и коррозии, имеют высокий потенциал применения их в качестве высокотемпературных конструкционных материалов, в частности, для аэрокосмической и автомобильной отраслей [1-5]. Основой технологии получения интерметаллидов и сплавов является диффузия, процесс которой в подобных системах имеет сложный и многофакторный характер. В диффузионной зоне на границе Ti и Al, например, в процессе высокотемпературного синтеза, могут присутствовать одновременно как твердые упорядоченные и разупорядоченные фазы, так и жидкие смеси с различным содержанием компонентов [6-9]. При этом диффузионные характеристики, такие как, например, энергия активации диффузии, значительно отличаются не только в указанных фазах, но зависят и от концентрации компонентов в простой смеси [8-11]. Знание характеристик и механизмов диффузии отдельно в разных фазах системы Ti–Al необходимо для более детального понимания процессов, происходящих при высокотемпературном синтезе, а также имеет большое значение

для всей области исследования и создания сплавов Ti–Al.

К настоящему времени накоплены экспериментальные данные о самодиффузии атомов Al и Ti преимущественно в интерметаллидах TiAl и Ti_3Al [11-13]. В [14, 15] нами было проведено исследование самодиффузии отдельно атомов Ti и Al в жидких и твердых сплавах системы Ti–Al. Рассматривались упорядоченные и разупорядоченные сплавы с составом $Ti_{75}Al_{25}$, $Ti_{50}Al_{50}$, $Ti_{25}Al_{75}$, а также чистые металлы Ti и Al. Для рассмотренных систем были, в частности, получены характеристики самодиффузии: энергия активации диффузии и предэкспоненциальный множитель в соответствующем уравнении Аррениуса.

Настоящая работа посвящена исследованию с помощью молекулярно-динамического моделирования влияния ориентации межфазной границы относительно кристаллической решетки Ti на скорость взаимной диффузии при твердо-жидкофазном контакте Ti и Al, то есть при температурах выше температуры плавления Al, но ниже температуры плавления Ti.

Описание модели

Для описания межатомных взаимодействий в системе Ti–Al в молекулярно-динамической

модели использовались ЕАМ потенциалы Зоупа и Мишина [16]. Эти потенциалы были получены в [16] на основе сопоставления экспериментальных данных и результатов *ab initio* расчетов относительно различных свойств и структуры металлов Ti, Al и интерметаллидов Ti_3Al 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 [16–18].

Расчетные ячейки содержали около 70 тысяч атомов и имели вид прямоугольных параллелепипедов (рис.1). Межфазная граница создавалась в центре расчетной ячейки вдоль плоскости YZ. Вдоль осей Y и Z имитирова-

лось бесконечное повторение ячейки, то есть были наложены периодические граничные условия. При этом размеры вдоль данных осей подбирались таким образом, чтобы они были кратны, с минимально возможным отклонением, периодам повторяемости одновременно кристаллических решеток Ti и Al (изначально алюминий создавался в кристаллическом состоянии). При этом учитывалось также неодинаковое тепловое расширение металлов для каждой конкретной температуры, при которой проводилось моделирование. Вдоль оси X были наложены жесткие условия: атомы на левом и правом торцах расчетной ячейки (окрашены в темно-серый цвет на рис.1) оставались неподвижными в течение компьютерного эксперимента.

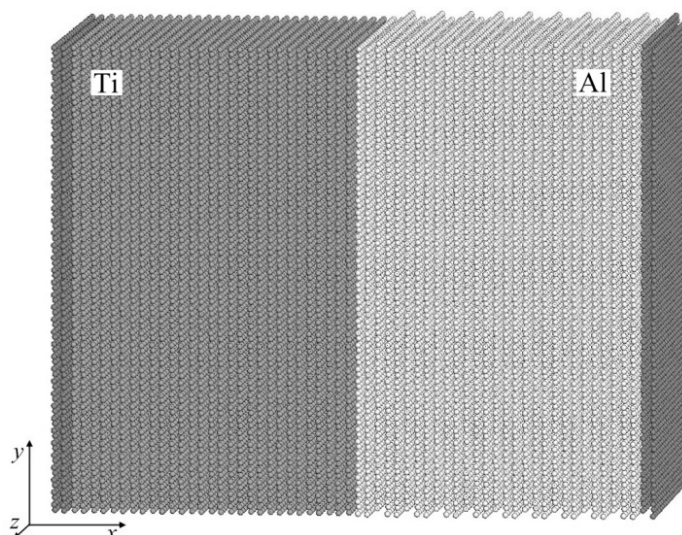


Рис.1. Расчетная ячейка для моделирования взаимной диффузии на границе Ti–Al до задания температуры (темно-серые атомы на торцах ячейки оставались неподвижными в процессе моделирования)

Fig.1. Computational cell for simulating interdiffusion at the Ti–Al interface before setting the temperature (dark gray atoms at the ends of the cell remained motionless during the simulation)

Рассматривалось три ориентации границы раздела Ti–Al относительно ГПУ кристаллической решетки Ti: (0001) , $(10\bar{1}0)$ и $(10\bar{1}1)$. На рис.2 данные атомные плоскости выделены цветом. Считается, что наиболее плотноупакованной плоскостью является плоскость (0001) – аналог плоскости (111) в ГЦК решетке. Но здесь все не так однозначно. Дело в том, что это справедливо, если учитывать плотность атомов строго в данной плоскости. Если же учитывать атомы в слое толщиной 1 Å, то наибольшая плотность упаковки будет у ориентации $(10\bar{1}0)$. В Таблице 1 приведены значения плотности заполнения атомных плоскостей

строго в плоскости и в слое толщиной 1 Å. Радиус атомов при этом был равен половине расстояния до ближайших соседей в идеальном кристалле.

В настоящей работе рассматривался твердо-жидкофазный контакт, то есть алюминий пребывал в течение моделирования в жидком состоянии и его начальная ориентация не имела значения. Температура в модели задавалась через начальные скорости атомов согласно распределению Максвелла [19–25]. Для сохранения температуры постоянной в процессе моделирования использовался термостат Нозе-Гувера. Шаг интегрирования по времени в методе молекулярной динамики был равен 2 фс. Исполь-

зуемые потенциалы, помимо прочего, хорошо описывают температуры плавления Ti и Al: 1995 и 990 К соответственно (справочные значения: 1943 и 933 К). Температура задавалась в диапазоне от 1300 К до 1800 К. Плавление

алюминия в модели происходило существенно быстрее диффузии, за несколько пикосекунд. Моделирование взаимной диффузии проводилось в течение нескольких сот пикосекунд.

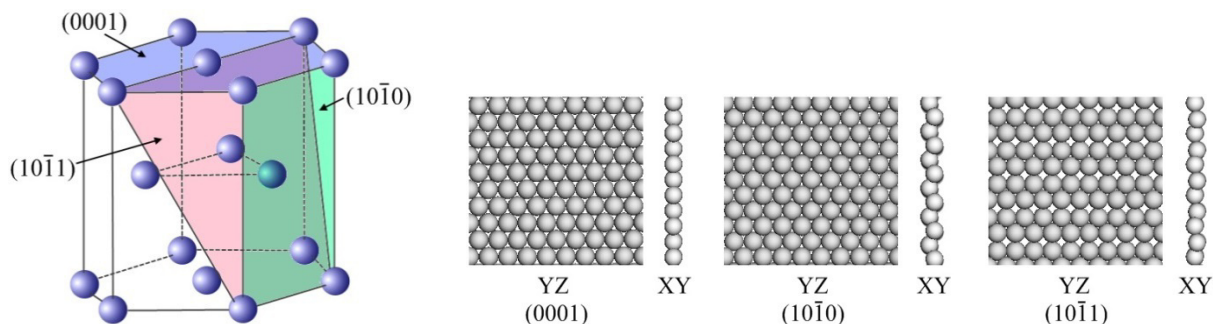


Рис.2. Рассматриваемые в работе три ориентации межфазной границы относительно кристаллической решетки Ti. Справа показаны соответствующие упаковки атомов в сечениях YZ и XY

Fig.2. The three orientations of the interface with respect to the Ti crystal lattice considered in this work. The corresponding packing of atoms in the YZ and XY sections is shown on the right

Таблица 1. Плотность заполнения атомных плоскостей

Table 1. Filling density of atomic planes

Плоскость	Строго в плоскости (в слое толщиной 0,1 Å)	В слое толщиной 1 Å
(0001)	90,69%	90,69%
(10 $\bar{1}0$)	49,49%	98,98%
(10 $\bar{1}1$)	44,46%	86,79%

Результаты и обсуждение

После плавления алюминия часть его вблизи межфазной границы оставалась в кристаллическом состоянии, точно повторяя решетку титана. То есть граница раздела твердой и жидкой фаз на самом деле как бы передвигалась на две-три атомные плоскости вглубь алюминия. На рис.3 изображены примеры данного феномена. Это объясняется тем, что связь Ti–Al гораздо крепче связи Al–Al, в связи с чем, в частности, температуры плавления интерметаллидов системы Ti–Al значительно превышают температуру плавления алюминия. Поэтому для разрушения связей Ti–Al на межфазной границе рассматриваемых температур недостаточно. Из-за этого отрыв атомов Ti и увлечение их в жидкий алюминий, очевидно, усложняется и происходит не так быстро, как это было бы при непосредственном контакте титана с жидкой фазой.

Несмотря на описанный выше феномен, взаимная диффузия на границе Ti–Al при твердо-жидкофазном контакте происходила доста-

точно интенсивно, чтобы ее можно было моделировать с помощью метода молекулярной динамики. Наблюдалось значительное преобладание диффузии атомов Ti вглубь жидкого Al по сравнению с диффузией атомов Al в кристаллический Ti, что объясняется, в первую очередь, отличием агрегатных состояний Ti и Al.

На рис.4 изображены концентрационные кривые, полученные при температурах 1500 и 1700 К после моделирования в течение 300 и 100 пс соответственно для трех рассматриваемых ориентаций межфазной границы. Кривые строились путем анализа концентрации атомов Ti в слое толщиной 5 Å при перемещении этого слоя на 1 Å вдоль оси X. Полученные концентрационные кривые качественно похожи на те, которые получают для данной системы экспериментально [8]. Правая пологая часть – это диффузия атомов Ti вглубь жидкого Al. Скорость этой диффузии, очевидно, не зависит от ориентации межфазной границы и совпадает для всех трех рассмотренных ориентаций. Изменение характера кривой с пологого на более

крутой в середине соответствует диффузии на межфазной границе в ее кристаллической области. Диффузия там протекает заметно медленнее, что отражается на угле наклона кривой. Следует заметить, что эта область начинается заметно раньше концентрации 50%, что связано с описанным выше феноменом сохранения кристаллической решетки в алюминии вблизи межфазной границы. Наклон в этой области также совпадает для трех рассмотренных ориентаций. Однако дальше, в области, отвечающей за проникновение атомов Al в кристалли-

ческий Ti и скорость взаимной диффузии в нем для трех ориентаций отчетливо видны отличия. Быстрее всего диффузия атомов Al вглубь Ti протекала при наиболее «плотноупакованной» и «гладкой» ориентации межфазной границы – (0001) (1 на рис.4). Более «рыхлые» упаковки (2 – $(10\bar{1}0)$ и 3 – $(10\bar{1}1)$ на рис.4) оказались более «устойчивыми» к проникновению атомов Al – концентрационные кривые в этих случаях заметно более крутые, чем для первой ориентации.

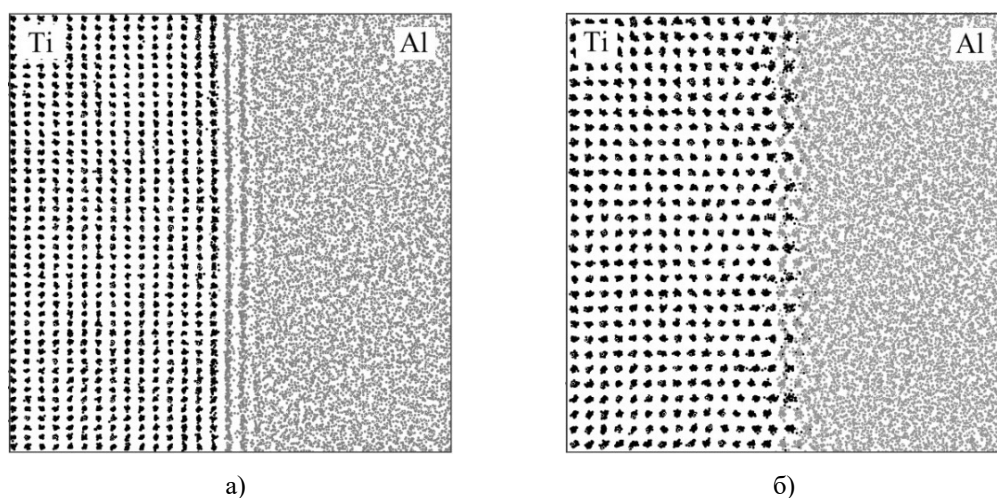


Рис.3. Формирование кристаллической структуры в Al вблизи межфазной границы при температуре выше температуры плавления алюминия (1300 K)

Fig.3. Formation of a crystal structure in Al near the interface at a temperature above the melting point of aluminum (1300 K)

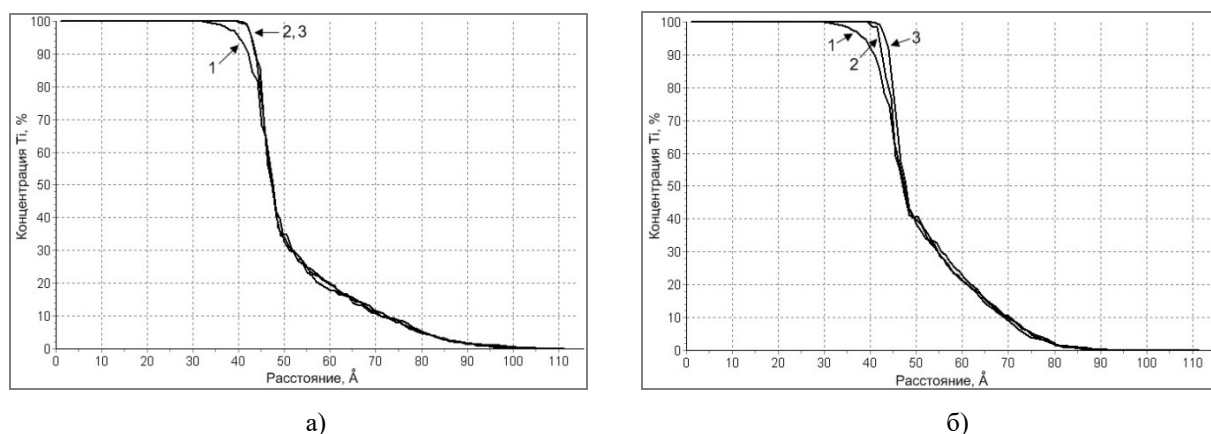


Рис.4. Распределение концентрации атомов Ti в расчетных ячейках: а) после 300 пс при температуре 1500 K; б) после 100 пс при температуре 1700 K. Цифрами отмечены рассматриваемые ориентации: 1 – (0001), 2 – $(10\bar{1}0)$, 3 – $(10\bar{1}1)$

Fig.4. The distribution of the concentration of Ti atoms in the computational cells: a) after 300 ps at a temperature of 1500 K; b) after 100 ps at a temperature of 1700 K. The numbers indicate the considered orientations: 1 – (0001), 2 – $(10\bar{1}0)$, 3 – $(10\bar{1}1)$

Похожее влияние ориентации границы раздела наблюдается при движении фронта кристаллизации в металлах [26-29]: кристаллизация от границы, имеющей относительно более «рыхлую» ориентацию (100) в ГЦК решетке, движется в 1,3-1,5 раз быстрее, чем от границы, имеющей самую плотную ориентацию (111). Такое поведение можно объяснить отличием глубины потенциальных ям, в которых находятся атомы на межфазной границе. Вблизи самой границы раздела металлов при твердо-жидкофазном контакте, как и на границе жидкость-кристалл, основную роль играет величина разности свободных энергий атома вблизи границы в жидкой фазе и «встроенного» в границу кристалла. Эту величину можно сравнить с энергией адатома на соответствующей свободной поверхности кристалла, или с энергией активации его миграции по данной поверхности. Например, в [30] с помощью компьютерного моделирования показано, что энергия активации диффузии адатомов по свободной поверхности (100) ГЦК металлов почти в два раза больше, чем по поверхности (111).

Заключение

Методом молекулярной динамики проведено исследование влияния ориентации межфазной границы относительно кристаллической решетки Ti на скорость взаимной диффузии при твердо-жидкофазном контакте Ti и Al. Рассматривалось три ориентации относительно ГПУ решетки Ti: (0001), (10 $\bar{1}$ 0) и (10 $\bar{1}$ 1). Было замечено, что после плавления алюминия часть его вблизи межфазной границы оставалась в кристаллическом состоянии, повторяя решетку титана, то есть граница между кристаллом и жидким металлом, в действительности, сдвигалась на две-три атомные плоскости вглубь алюминия.

Наблюдалось значительное преобладание диффузии атомов Ti вглубь жидкого Al по сравнению с диффузией атомов Al в кристаллический Ti, что объясняется, в первую очередь, отличием агрегатных состояний Ti и Al. Для трех рассматриваемых ориентаций были получены концентрационные кривые после моделирования взаимной диффузии при различных температурах. Более пологие части кривых, отвечающие за диффузию атомов Ti вглубь жидкого Al, оказались схожими. Однако части, относящиеся к диффузии атомов Al в

кристаллический Ti, имели отличия: интенсивнее диффузия атомов Al в Ti протекала при ориентации (0001) и медленнее при сравнительно более «рыхлых» ориентациях (10 $\bar{1}$ 0) и (10 $\bar{1}$ 1).

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. Thiyaneshwaran 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 // Saipia 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. Rusing J., Herzig C. Concentration and temperature dependence of titanium self-diffusion and interdiffusion in the intermetallic phase Ti_3Al // *Intermetallics*. 1996. V. 4, N 8. P. 647–657.
13. Herzig C., Przeorski T., Mishin Y. Self-diffusion in $\gamma\text{-TiAl}$: an experimental study and atomistic calculations // *Intermetallics*. 1999. V. 7, N 3–4. P. 389–404.
14. Poletaev G.M. Self-diffusion in liquid and solid alloys of the Ti–Al system: molecular-dynamics simulation // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 2021. V.133, N 4. P. 455–460.
15. 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.
16. Zope R.R., Mishin Y. Interatomic potentials for atomistic simulations of the Ti–Al system // *Physical Review B*. 2003. V. 68. 024102.
17. 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.
18. Pei Q.-X., Jhon M.H., Quek S.S., Wu Z. A systematic study of interatomic potentials for mechanical behaviours of Ti–Al alloys // *Computational Materials Science*. 2021. V. 188. 110239.
19. Полетаев Г.М., Новоселова Д.В., Зоря И.В., Старостенков М.Д. Исследование формирования избыточного свободного объема в тройных стыках границ зерен при кристаллизации на примере никеля // *Физика твердого тела*. 2018. Т. 60, № 5. С. 846–850.
20. Poletaev G., Zorya I., Rakitin R. Molecular dynamics study of migration mechanism of triple junctions of tilt boundaries in fcc metals // *Computational Materials Science*. 2018. V. 148. P. 184–189.
21. 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.
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. Полетаев Г.М., Зоря И.В. Исследование влияния примесей легких элементов на скольжение краевой дислокации в никеле и серебре: молекулярно-динамическое моделирование // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 2020. Т. 158, № 3. С. 485–491.
24. Полетаев Г.М., Ракитин Р.Ю. Молекулярно-динамическое исследование влияния концентрации вакансий на скорость миграции границ наклона в никеле // *Физика твердого тела*. 2021. Т. 63, № 5. С. 582–587.
25. Полетаев Г.М., Ракитин Р.Ю. Влияние концентрации вакансий на скорость миграции границ наклона в никеле: молекулярно-динамическое моделирование // *Письма в ЖТФ*. 2021. Т. 47, № 8. С. 29–32.
26. Mendelev 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.
27. 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.
28. Mendelev 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.
29. 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.
30. 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.

Информация об авторах

Г. М. Полетаев – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова.

В. В. Коваленко – доктор физико-математических наук, профессор Сибирского государственного индустриального университета.

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; Tanger: 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. Rusing, J. & Herzig, C. (1996). Concentration and temperature dependence of titanium self-diffusion and interdiffusion in the intermetallic phase Ti₃Al. *Intermetallics*, 4(8), 647–657.
13. Herzig, C., Przeorski, T. & Mishin, Y. (1999). Self-diffusion in γ -TiAl: an experimental study and atomistic calculations. *Intermetallics*, 7(3–4), 389–404.
14. 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.
15. 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.
16. Zope, R. R. & Mishin, Y. (2003). Interatomic potentials for atomistic simulations of the Ti–Al system. *Physical Review B*, 68, 024102.
17. 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.
18. 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.
19. Poletaev, G. M., Novoselova, D. V., Zorya, I. V. & Starostenkov, M. D. (2018). Formation of the excess free volume in triple junctions during nickel crystallization. *Physics of the Solid State*, 60(5), 847–851. (In Russ.).
20. Poletaev, G., Zorya, I. & Rakitin, R. (2018). Molecular dynamics study of migration mechanism of triple junctions of tilt boundaries in fcc metals. *Computational Materials Science*, 148, 184–189.
21. 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.
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. (In Russ.).
23. Poletaev, G. M. & Zorya, I. V. (2020). Effect of light element impurities on the edge dislocation glide in nickel and silver: molecular dynamics simulation. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 131(3), 432–436. (In Russ.).
24. Poletaev, G. M. & Rakitin, R. Yu. (2021). Molecular-dynamics simulation of the influence of a vacancy concentration on the tilt boundary migration velocity in nickel. *Physics of the Solid State*, 63(5), 682–687. (In Russ.).
25. Poletaev, G. M. & Rakitin, R. Yu. (2021). The effect of vacancy concentration on the migration rate of the tilt boundaries in nickel: molecular dynamics modeling. *Technical Physics Letters*, 47, 398. (In Russ.).
26. Mendelev, 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.

27. 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.

28. Mendelev, 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.

29. 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.

30. 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.

Information about the authors

G. M. Poletaev – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of department, I.I. Polzunov Altai State Technical University.

V. V. Kovalenko – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Siberian State Industrial University.

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

Статья поступила в редакцию 12.11.2021; одобрена после рецензирования 23.11.2021; принята к публикации 29.11.2021.

The article was received by the editorial board on 12 Nov. 21; approved after reviewing 23 Nov. 21; accepted for publication 29 Nov. 21.