

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ОРИЕНТАЦИИ МЕЖФАЗНОЙ ГРАНИЦЫ НА ИНТЕНСИВНОСТЬ РАСТВОРЕНИЯ ТИТАНА В КРИСТАЛЛИЧЕСКОМ И АМОРФНОМ АЛЮМИНИИ

Г. М. Полетаев^{a*}, Ю. В. Бебихов^b, А. С. Семенов^b, А. А. Ситников^a

^a Алтайский государственный технический университет им. И. И. Ползунова
656038, Барнаул, Россия

^b Политехнический институт Северо-Восточного федерального университета им. М. К. Аммосова
678170, Мирный, Россия

Поступила в редакцию 3 ноября 2022 г.,
после переработки 2 декабря 2022 г.
Принята к публикации 19 декабря 2022 г.

Методом молекулярной динамики проведено исследование влияния ориентации межфазной границы на интенсивность растворения титана в кристаллическом и аморфном алюминии. Рассматривались четыре ориентации границы раздела Ti–Al относительно решеток Ti (ГПУ) и Al (ГЦК): 1) (0001):(111), 2) (0001):(001), 3) (10 $\bar{1}$ 0):(111), 4) (10 $\bar{1}$ 1):(001). Выяснено, что ориентация межфазной границы оказывает влияние на интенсивность растворения титана в алюминии и увеличивается для принятых обозначений в порядке 1–2–3–4. Важным явлением в данном случае оказалось образование на начальном этапе тонкого (толщиной в 2–3 атомные плоскости) кристаллического слоя в алюминии, повторяющего кристаллическую решетку титана, за которым при температуре ниже температуры плавления алюминия формировалась граница зерен, параллельная межфазной границе. При температурах выше температуры плавления алюминия данный кристаллический слой сохранялся, но его толщина постепенно уменьшалась по мере увеличения температуры. При рассмотрении алюминия в аморфном состоянии при температурах ниже температуры его плавления растворение титана происходило почти с той же интенсивностью, что и при кристаллическом состоянии алюминия. Это было связано с образованием во всех случаях на межфазной границе аналогичного кристаллического слоя в алюминии.

DOI: 10.31857/S0044451023040119
EDN: MCEOSD

1. ВВЕДЕНИЕ

Интерметаллические соединения системы Ti–Al и сплавы на их основе обладают сочетанием таких свойств, как высокий предел текучести при повышенных температурах и хорошая стойкость к окислению и коррозии одновременно с относительно низкой плотностью, что делает их перспективными для использования в качестве высокотемпературных конструкционных материалов, в частности, для аэрокосмической и автомобильной отраслей [1–5]. В основе технологии получения интерме-

таллидов лежит диффузионный процесс, который 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]. Знание диффузионной кинетики, характеристик и механизмов диффузии в металлических системах, в частности в системе Ti–Al, необходимо для более детального понимания процессов, происходящих при высокотемпературном синтезе, а также имеет большое значение для всей области исследования и создания интерметаллидов и бинарных сплавов.

Ранее в работе [10] с помощью метода молекулярной динамики нами было проведено исследование

* E-mail: gmpoletaev@mail.ru

самодиффузии отдельно атомов Ti и Al в жидких и твердых сплавах системы Ti–Al, а в работе [11] — влияния ориентации межфазной границы Ti–Al на интенсивность взаимной диффузии при твердом и жидком состояниях алюминия. В [11] для различных ориентаций были построены кривые распределения концентрации титана в области межфазной границы, с помощью которых был сделан вывод о более интенсивном проникновении атомов алюминия в кристаллическую решетку титана при ориентации границы вдоль плоскости (0001) относительно ГПУ-решетки титана по сравнению с ориентациями (10 $\bar{1}$ 0) и (10 $\bar{1}$ 1). В [11] было также отмечено, что диффузия атомов титана в жидком алюминии ожидаемо не зависела от ориентации границы. Вместе с тем, в работе [11] нами был упущен третий важный аспект процесса растворения титана в алюминии помимо указанных выше двух — интенсивность отрыва атомов титана на самой границе и их увлечение в фазу алюминия. Кроме того, в предыдущей работе [11] при исследовании взаимной диффузии ниже температуры плавления алюминия нами был рассмотрен алюминий только в кристаллическом состоянии, тогда как новые экспериментальные данные свидетельствуют о возможном снижении температуры воспламенения при высокотемпературном синтезе за счет наличия в исходной смеси алюминия в сильно деформированном или даже аморфном состоянии [12–14]. Например, в результате предварительной механоактивационной обработки, которая в настоящее время является одним из перспективных методов подготовки смеси до основной реакции синтеза [12–14], формируются так называемые механокмозиты, представляющие собой матрицу из более пластичного компонента (алюминия), в объеме которой находятся наноразмерные частицы более хрупкого компонента смеси (например, титана) [13, 14]. Такая система характеризуется высокой степенью неравновесности из-за высокой концентрации дефектов, поверхностей раздела, внутренних напряжений, а также наличия аморфной фазы. Отмечается, что начало реакции горения в такой неравновесной системе начинается при температурах, существенно ниже температуры плавления алюминия [13, 14].

Настоящая работа посвящена исследованию с помощью молекулярно-динамического моделирования влияния ориентации межфазной границы на интенсивность растворения титана в кристаллическом и аморфном алюминии. В последнем случае рассматривались температуры ниже и выше температуры плавления алюминия.

2. ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

Для описания межатомных взаимодействий в системе Ti–Al использовались ЕАМ-потенциалы Зоупа и Мишина [15]. При их создании авторы [15] опирались на экспериментальные данные и результаты *ab initio*-расчетов относительно различных свойств и структуры металлов Ti, Al и интерметаллидов Ti₃Al и TiAl. Данные потенциалы хорошо зарекомендовали себя при проведении различных исследований и прошли успешную апробацию по широкому спектру механических и структурно-энергетических свойств интерметаллидов и сплавов системы Ti–Al [10–17]. В частности, используемые нами потенциалы показывают хорошее согласие с экспериментальными данными по температуре плавления Ti и Al: в нашей модели они получились равными соответственно 1995 и 990 К (справочные значения: 1943 и 933 К) [11].

Расчетные ячейки в молекулярно-динамической модели в настоящей работе содержали около 120 тысяч атомов и имели вид прямоугольных параллелепипедов (рис. 1). Межфазная граница создавалась в центре расчетной ячейки вдоль плоскости *yz*. Вдоль осей *y* и *z* имитировалось бесконечное повторение ячейки, т. е. были наложены периодические граничные условия. Размеры вдоль данных осей подбирались таким образом, чтобы они были кратны с минимально возможным отклонением периодам повторяемости одновременно кристаллических решеток Ti и Al. При этом учитывалось также неодинаковое тепловое расширение металлов для каждой конкретной температуры, при которой проводилось моделирование.

В предыдущей работе [11] при использовании аналогичной модели на торцы ячейки вдоль оси *x* были наложены жесткие граничные условия, т. е. структура на данных границах была зафиксированной. Это было сделано для фиксации ориентации кристаллических решеток титана и алюминия в процессе всего моделирования. Однако это же приводило к фиксированному объему всей расчетной ячейки. Расширение ячейки, связанное как с нагревом металлов, так и с плавлением алюминия, учитывалось при изначальном задании размеров расчетной ячейки, однако оно не могло изменяться в процессе моделирования, что вносило некоторую погрешность в результаты.

В настоящей работе мы оставили жесткие граничные условия только со стороны титана для удержания заданной ориентации его кристаллической структуры в течение моделирования, но со сторо-

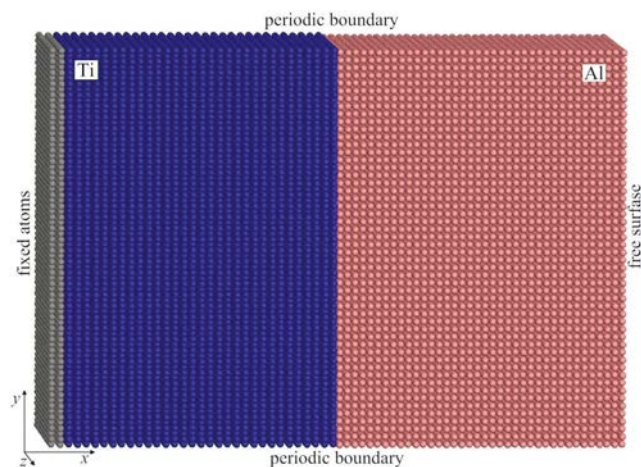


Рис. 1. Расчетная ячейка с ориентацией межфазной границы (0001):(001) до релаксации и задания температуры (серые атомы на левом торце ячейки оставались неподвижными в процессе моделирования)

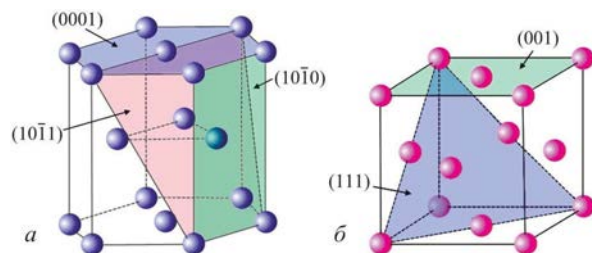


Рис. 2. Рассматриваемые в работе ориентации межфазной границы относительно кристаллической ГПУ-решетки Ti (a) и ГЦК-решетки Al (б)

ны алюминия использовали свободные (открытые) условия, которые позволяли расчетной ячейке свободно изменять объем (рис. 1). Похожие граничные условия использовались нами при моделировании скольжения дислокаций в [18, 19].

Рассматривались четыре ориентации границы раздела Ti–Al относительно кристаллических решеток Ti (ГПУ) и Al (ГЦК): 1) (0001):(111), 2) (0001):(001), 3) (1010):(111), 4) (1011):(001) (рис. 2). При исследовании диффузии в условиях аморфного состояния алюминия рассматривались, соответственно, три ориентации границы относительно решетки титана: (0001), (1010), (1011).

Аморфный алюминий создавался путем нагревания до температуры, значительно превышающей температуру плавления. После разрушения кристаллической структуры проводилось резкое охлаждение, в течение которого не успевала произойти кристаллизация. Положение атомов Ti в расчетной ячейке при проведении этой процедуры оставалось зафиксированным.

После создания расчетной ячейки с заданной ориентацией проводилась релаксация структуры при начальной температуре 0 К до достижения стабильного положения атомов на межфазной границе. В течение релаксации происходило небольшое повышение температуры. На заключительной стадии подготовки расчетной ячейки она вновь охлаждалась до минимальной температуры, близкой к 0 К.

Температура в компьютерных экспериментах задавалась через начальные скорости атомов согласно распределению Максвелла. Моделирование взаимной диффузии проводилось при постоянной температуре, значение которой варьировалось от 500 до 1700 К. Для сохранения температуры постоянной использовался термостат Нозе–Гувера. Шаг интегрирования по времени в методе молекулярной динамики был равен 2 фс.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

При проведении релаксации после создания расчетных ячеек была замечена важная особенность формирования структуры вблизи межфазной границы Ti–Al. Из-за несовпадения кристаллических структур Ti и Al несовершенства решетки, обусловленные этим несовпадением, формировались не на самой границе раздела фаз, а на небольшом расстоянии от нее (как правило, в несколько межатомных расстояний) в виде границы зерен в алюминии, параллельной межфазной границе (рис. 3a). Сама же межфазная граница дефектов, как правило, не содержала и «выталкивала» их в границу зерен в алюминии. Очевидно, что данное поведение обусловлено более крепкими связями атомов Ti и Al по сравнению со связями Al–Al. Введение дополнительных дефектов в межфазную границу, например, вакансий в связи с описанным выше явлением не приводило к существенному влиянию на процесс взаимной диффузии. Они еще в начале моделирования покидали межфазную границу и мигрировали в сторону границы зерен в алюминии.

В некоторых случаях граница зерен в алюминии могла мигрировать за пределы расчетной ячейки с выходом на свободную поверхность (правый край ячейки на рис. 1). В этом случае ориентация кристаллической решетки алюминия изменялась и уже не соответствовала заданной вначале.

С повышением температуры дефектная область, представляющая собой границу зерен, расширялась, кристаллическая структура в этой области разрушалась еще до температуры плавления алюминия, что приводило к формированию аморфного слоя, параллельного межфазной границе (рис. 3б). Дан-

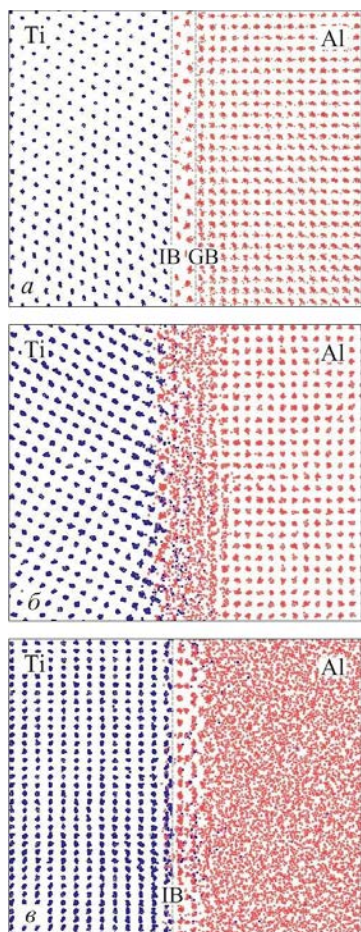


Рис. 3. Особенности структуры межфазной границы при различных температурах: *a* — формирование в Al границы зерен, параллельной межфазной границе (ориентация $(10\bar{1}1):(100)$, температура 500 K); *б* — формирование аморфного слоя на месте границы зерен при повышении температуры (та же ориентация $(10\bar{1}1):(100)$, температура 800 K); *в* — формирование кристаллической структуры в Al вблизи межфазной границы при температуре выше температуры плавления алюминия (ориентация $(0001):(100)$, температура 1050 K)

ное явление было неодинаковым для разных ориентаций: формирование и границы зерен, и аморфного слоя при температурах, близких к температуре плавления алюминия, в большей степени проявлялось и влияло на процесс взаимной диффузии при ориентациях $(10\bar{1}0):(111)$ и $(10\bar{1}1):(001)$ и почти не наблюдалось для ориентации $(0001):(111)$.

Вблизи самой межфазной границы структура алюминия, напротив, оставалась в кристаллическом состоянии даже после температуры плавления, повторяя в точности решетку титана (рис. 3в). Таким образом, граница раздела твердой и жидкой фаз оказывалась смещена (по крайней мере, на началь-

ном этапе взаимной диффузии) на две-три атомные плоскости в глубь алюминия. Как уже говорилось выше, это объясняется тем, что энергия связи Ti–Al больше энергии связи Al–Al, вследствие чего, в частности, температуры плавления интерметаллидов системы Ti–Al превышают температуру плавления алюминия. Поэтому атомы Al вблизи границы раздела фаз находятся в более глубоких потенциальных ямах, чем в объеме алюминия. В связи с этим для разрушения кристаллического слоя в алюминии возле межфазной границы необходимы большие температуры, чем для плавления алюминия. 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 твердожидкофазном контакте происходила значительно интенсивнее, чем при твердофазном контакте. В данном случае наблюдалось более существенное преобладание диффузии атомов Ti в глубь жидкого Al по сравнению с диффузией атомов Al в кристаллический Ti, что объясняется, в первую очередь, отличием агрегатных состояний Ti и Al.

При моделировании аморфного алюминия при температурах ниже температуры плавления атомная структура вблизи межфазной границы была аналогична той, что изображена на рис. 3в, т.е. в этом случае также наблюдалось формирование кристаллического слоя вблизи межфазной границы со стороны алюминия, который играл важную роль в процессе растворения титана. В некоторых случаях при температурах ниже температуры плавления алюминия наблюдалась гетерогенная кристаллизация изначально аморфного алюминия. Фронт кристаллизации в этом случае начинался, как правило, от межфазной границы.

На рис. 4 изображены графики концентрации титана в расчетных ячейках после проведения моделирования при температурах ниже и выше температуры плавления алюминия. Кривые распределения концентрации атомов Ti в расчетной ячейке строились путем анализа концентрации в слое толщиной $3\text{ \AA}$ при перемещении этого слоя на $1\text{ \AA}$ вдоль оси x . Для сравнительного анализа кривых они были наложены друг на друга таким образом, чтобы пересекаться в точке концентрации 50%, которая соответствует условному среднему положению межфазной границы. Левая часть на графиках — это область, соответствующая диффузии в титане, правая — диффузии в алюминии. Наклон кривой ха-

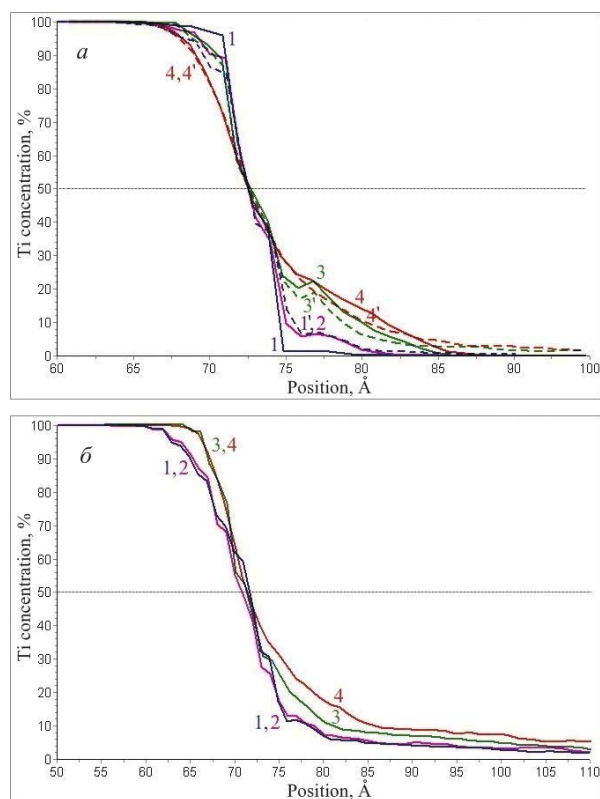


Рис. 4. Распределение концентрации атомов Ti в расчетных ячейках после моделирования в течение: а) 3000 пс при температуре 900 К; б) 2000 пс при температуре 1200 К. Цифрами на рисунке обозначены рассматриваемые ориентации межфазной границы: 1 — (0001):(111), 2 — (0001):(001), 3 — (10 $\bar{1}$ 0):(111), 4 — (10 $\bar{1}$ 1):(001). Цифрами со штрихами обозначены межфазные границы с аморфным алюминием

рактически характеризует интенсивность диффузии: чем выше кривая, тем диффузия протекает более интенсивно.

На рис. 4а изображены концентрационные кривые, полученные для всех рассматриваемых ориентаций межфазной границы после моделирования в течение 3000 пс при температуре 900 К. В первую очередь, следует заметить, что интенсивность взаимной диффузии зависит от ориентации межфазной границы: для ориентации 1 она минимальна, а для ориентаций 3 и особенно для 4 — наибольшая. Это же относится и к вариантам с аморфным алюминием (1', 3', 4'). В данном случае, т. е. до температуры плавления алюминия, наиболее важным явлением, влияющим на интенсивность диффузии, оказалась степень сопряженности атомных структур титана и алюминия на межфазной границе. Действительно, для ориентации (0001):(111), на что обращали внимание также авторы работы [20], характерна наибольшая степень сопряженности, что обуславлива-

ется высокой схожестью атомных плоскостей (0001) в Ti и (111) в Al (расстояния между ближайшими атомами в этих плоскостях очень близки для обоих металлов: соответственно 2.951 и 2.864 Å при абсолютном нуле, при нагреве эта разница еще более сокращается).

Интенсивнее диффузия протекала в области Al (правая часть на рис. 4а) — атомы Ti проникали глубже в Al по сравнению с проникновением атомов Al в решетку Ti (левая часть). Наличие границы зерен в Al, параллельной межфазной границе, о которой говорилось выше, значительно облегчало процесс диффузии до температуры плавления алюминия. Диффузия в области границы зерен происходила интенсивнее, чем в кристаллической решетке — это видно по подъему кривых (особенно для ориентаций 3 и 4) в месте, где находилась граница.

Граница зерен играла также важную роль и в диффузии атомов Al в решетку Ti (левая часть), являясь своего рода «поставщиком» вакансий в эту область. Таким образом, на этапе твердофазного контакта Ti–Al на интенсивность взаимной диффузии в первую очередь влияет наличие границы зерен в Al, которая образуется в результате несоответствия решеток Ti и Al.

При рассмотрении алюминия в аморфном состоянии при температуре 900 К существенного отличия от соответствующих ориентаций при его кристаллическом состоянии замечено не было. Все дело в том, что вблизи межфазной границы, независимо от начальной структуры Al, формируется своя атомная структура: тонкий кристаллический слой в 2–3 атомные плоскости в Al, повторяющий решетку Ti, затем следует дефектный слой, представляющий собой либо границу зерен (рис. 3а), либо аморфную фазу (рис. 3б, в). Следует подчеркнуть, что этот результат получен в условиях использования термостата.

Таким образом, снижение температуры воспламенения реакции высокотемпературного синтеза в случае наличия аморфной фазы алюминия, по всей видимости, связано не с более высокой диффузией в этом случае, а с дополнительным высвобождением энергии в результате кристаллизации алюминия.

При температуре 1200 К растворение титана заметно быстрее происходило при ориентациях 3 и 4 (рис. 4б). Начальная ориентация решетки Al после плавления алюминия не имела значения, поэтому, как видно на рисунке, кривые для ориентаций 1 и 2 практически совпадают. Полученные концентрационные кривые качественно похожи на те, которые получают для данной системы эксперимен-

тально [8]. В области жидкого алюминия, очевидно, интенсивность диффузии не зависит от ориентации межфазной границы (при условии примерно равной концентрации атомов Ti в фазе Al) — в правой части в связи с этим наклон кривых на рис. 4б одинаков. Однако ближе к межфазной границе их наклон и положение различаются: для ориентации 4 кривая находится выше остальных, что связано с более интенсивным растворением титана в данном случае. Далее по интенсивности растворения идет ориентация 3, и затем вместе ориентации 1 и 2.

Изменение характера кривой с пологого на более крутой в середине графика соответствует границе жидкой и кристаллической фаз. Диффузия в этой области 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 образования кристаллического слоя в алюминии вблизи межфазной границы.

В левой части, характеризующей проникновение атомов Al в кристаллический Ti и интенсивность протекания взаимной диффузии в нем, для рассматриваемых ориентаций результат отличается от полученного при температуре 900 К (рис. 4а). Быстрее всего при температуре 1200 К диффузия атомов Al в глубь Ti протекала при ориентации межфазной границы (0001) (1 и 2 на рис. 4б). Но одновременно с этим отрыв атомов Ti и увлечение их в фазу Al интенсивнее происходил при ориентациях (1010) и (1011) (3 и 4 на рис. 4б).

Похожая анизотропия отмечается, например, для скорости движения фронта гетерогенной кристаллизации в металлах [21–24]: фронт кристаллизации с относительно более «рыхлой» ориентацией (100) ГЦК-решетки движется в 1.3–1.5 раза быстрее, чем фронт, имеющей ориентацию, соответствующую наиболее плотной упаковке (111). Данная анизотропия обусловлена тем, что вблизи границы раздела разных металлов при твердо-жидкофазном контакте, как и на границе кристалл–жидкость одного металла, определяющую роль играет разность свободных энергий атома вблизи границы в жидкой фазе и «встроенного» в границу кристаллической фазы.

В дополнение к концентрационным кривым для анализа влияния ориентации межфазной границы на интенсивность растворения титана в алюминии использовалась специальная характеристика — удельное количество растворенных атомов Ti. Использование коэффициента диффузии атомов Ti, рассчитанного с помощью классического уравнения

Эйнштейна, в данном случае имеет ряд недостатков, связанных преимущественно с выделением диффузии Ti в области межфазной границы, определением эффективной ширины границы и отбрасыванием таких факторов, как миграция атомов Ti в фазе Al (которая в случае жидкого Al гораздо интенсивнее, чем на границе), смещения атомов Ti, вызванные не диффузией, а искажением кристаллической решетки вследствие диффузии или наличия дополнительных дефектов.

Удельное количество растворенных атомов Ti рассчитывалось как отношение разности числа растворенных атомов Ti в начале и конце компьютерного эксперимента ΔN к площади межфазной границы S . Растворенным атом Ti считался в том случае, если количество атомов Al в его ближайшем окружении, в пределах радиуса 3.7 Å, превышало 50%. Величина $\Delta N/S$ относительная, однако более показательная, чем коэффициент диффузии, и по сравнению с ним в нашем случае включает меньше посторонних факторов.

На рис. 5 изображены температурные зависимости удельного количества растворенных атомов Ti для всех рассмотренных ориентаций межфазной границы. Для каждой температуры, которая удерживалась с помощью термостата Нозе–Гувера постоянной в течение моделирования, измерение величины $\Delta N/S$ проводилось после компьютерного эксперимента в течение 500 пс. На рис. 5 хорошо видно различие скорости растворения при разных ориентациях межфазной границы, которое для принятых обозначений располагается при всех температурах в порядке 1–2–3–4, что согласуется с приведенными выше концентрационными кривыми (рис. 4). После температуры плавления алюминия (990 К в данной модели) скорость растворения с ростом температуры резко изменяется для всех ориентаций. При этом после плавления алюминия для ориентаций 1 и 2 (с одной и той же ориентацией межфазной границы относительно кристаллической решетки титана) графики объединяются в один, но не сразу, а только при температуре примерно выше 1150 К. По всей видимости, в данном случае на формирование кристаллического слоя в алюминии (как, например, на рис. 3б) оказывает влияние начальная ориентация его кристаллической решетки.

В случаях, когда до температуры плавления алюминий находился в аморфном состоянии, как и отмечалось ранее, значительных отличий от вариантов с кристаллическим состоянием не наблюдалось — кривые 1', 3', 4' на рис. 5 располагаются немногим выше кривых, соответствующих тем же

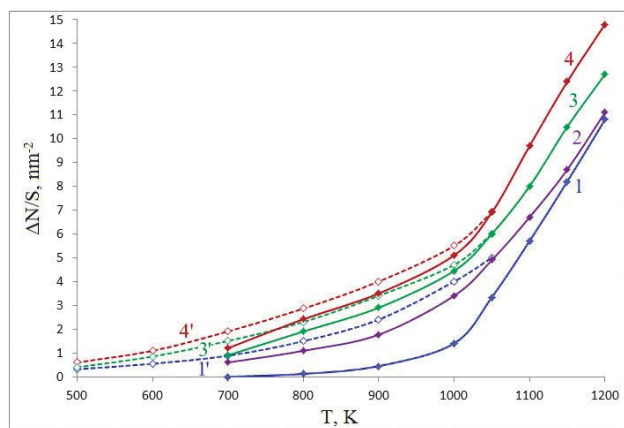


Рис. 5. Температурные зависимости удельного количества растворенных атомов Ti для всех рассмотренных ориентаций межфазной границы: 1 — (0001):(111), 2 — (0001):(001), 3 — (10 $\bar{1}$ 0):(111), 4 — (10 $\bar{1}$ 1):(001). Цифрами со штрихами обозначены межфазные границы с аморфным алюминием (штриховые линии)

ориентациям относительно титана, но при кристаллическом состоянии алюминия (1, 3 и 4 на рис. 5). Ранее уже говорилось, этот, на первый взгляд, необычный результат объясняется образованием во всех случаях, независимо от начальной структуры алюминия, тонкого (толщиной в 2–3 атомные плоскости) кристаллического слоя в алюминии, повторяющего кристаллическую структуру решетки титана. Дефекты, в том числе дислокации несоответствия, располагаются преимущественно не на самой границе раздела фаз, а в алюминии, после этого слоя, где либо располагается граница зерен, параллельная межфазной границе, либо аморфная фаза. Границы зерен или границы раздела кристаллического слоя и аморфной фазы, в свою очередь, служат источниками вакансий, за счет миграции которых преимущественно осуществляется взаимная диффузия в области межфазной границы на начальном этапе растворения.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методом молекулярной динамики проведено исследование влияния ориентации межфазной границы Ti–Al на интенсивность растворения титана в кристаллическом и аморфном алюминии, в последнем случае — при температурах ниже и выше температуры плавления алюминия. Рассматривались четыре ориентации границы раздела Ti–Al относительно решеток Ti (ГПУ) и Al (ГЦК): 1) (0001):(111), 2) (0001):(001), 3) (10 $\bar{1}$ 0):(111), 4) (10 $\bar{1}$ 1):(001). При исследовании диффузии в условиях аморфного состояния алюминия рассматрива-

лись, соответственно, три ориентации границы относительно решетки титана: (0001), (10 $\bar{1}$ 0), (10 $\bar{1}$ 1). Температура в процессе одного компьютерного эксперимента оставалась постоянной.

Выяснено, что ориентация межфазной границы оказывает влияние на интенсивность растворения титана в алюминии и для принятых обозначений увеличивается в порядке 1–2–3–4. Важным явлением в данном случае оказалось образование на начальном этапе растворения тонкого (толщиной в 2–3 атомные плоскости) кристаллического слоя в алюминии, повторяющего кристаллическую решетку титана, за которым при температуре ниже температуры плавления алюминия формировалась граница зерен, параллельная межфазной границе. Дефекты с межфазной границы, в том числе дислокации несоответствия, «вытеснялись» на данную границу зерен. При температурах выше температуры плавления алюминия кристаллический слой в нем вблизи межфазной границы сохранялся, но его толщина постепенно уменьшалась с ростом температуры. Границы зерен или границы раздела кристаллического слоя и аморфной фазы служили источниками вакансий, за счет миграции которых преимущественно осуществлялась взаимная диффузия в области межфазной границы на начальном этапе растворения.

При рассмотрении алюминия в аморфном состоянии до температуры ниже его температуры плавления растворение титана при одной и той же постоянной температуре происходило почти с той же интенсивностью, что и при кристаллическом состоянии алюминия. Это было связано с образованием во всех случаях на межфазной границе независимо от начальной структуры алюминия аналогичного кристаллического слоя в алюминии. Таким образом, снижение температуры воспламенения реакции высокотемпературного синтеза в случае наличия аморфной фазы алюминия, по всей видимости, связано не с более высокой диффузией в этом случае из-за повышенного свободного объема в ней, а с дополнительным высвобождением энергии в результате кристаллизации алюминия.

Финансирование. Работа Полетаева Г.М. и Ситникова А.А. (постановка задачи, разработка модели, редактирование финальной версии статьи) поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (грант FZMM-2023-0003); Бебихова Ю.В. и Семенова А.С. (проведение компьютерных экспериментов, получение и интерпретация результатов) — Российским Научным Фондом (грант РНФ №22-22-00810).

ЛИТЕРАТУРА

1. Y.-W. Kim, *J. Metals* **46**, 30 (1994).
2. F. Appel, P. A. Beaven, and R. Wagner, *Acta metall. mater.* **41**, 1721 (1993).
3. J. Lapin, *Proc. Metal, Tanger, Ostrava* **19**, 2019 (2009).
4. T. Tetsui, *Rare Metals* **30**, 294 (2011).
5. T. Voisin, J.-P. Monchoux, and A. Couret, in *Spark Plasma Sintering of Materials*, ed. by P. Cavaliere, Springer, Cham (2019), p. 713.
6. Q. Wu, J. Wang, Y. Gu, Y. Guo, G. Xu, and Y. Cui, *J. Phase Equilib. Diffus.* **39**, 724 (2018).
7. N. Thiyaneshwaran, K. Sivaprasad, and B. Ravisan-
kar, *Sci. Rep.* **8**, 16797 (2018).
8. H. Wu, Sh. Zhang, H. Hu, J. Li, J. Wu, Q. Li, and
Zh. Wang, *Intermetallics* **110**, 106483 (2019).
9. J.-G. Luo, *Welding J.* **79**, 239-s (2000).
10. Г. М. Полетаев, *ЖЭТФ* **160**, 527 (2021).
11. Г. М. Полетаев, Р. Ю. Ракитин, *ФТТ* **64**, 412
(2022).
12. V. V. Boldyrev, K. Tkacova, *J. Mater. Synt. Proc.* **8**,
121 (2000).
13. V. Y. Filimonov, M. V. Loginova, S. G. Ivanov,
A. A. Sitnikov, V. I. Yakovlev, A. V. Sobachkin,
A. Z. Negodyaev, and A. Y. Myasnikov, *Comb. Sci.*
Techn. **192**, 457 (2020).
14. M. V. Loginova, V. I. Yakovlev, V. Yu. Filimonov,
A. A. Sitnikov, A. V. Sobachkin, S. G. Ivanov, and
A. V. Gradoboev, *Lett. Mater.* **8**, 129 (2018).
15. R. R. Zope and Y. Mishin, *Phys. Rev. B* **68**, 024102
(2003).
16. Y.-K. Kim, H.-K. Kim, W.-S. Jung, and B.-J. Lee,
Comput. Mater. Sci. **119**, 1 (2016).
17. Q.-X. Pei, M. H. Jhon, S. S. Quek, and Z. Wu,
Comput. Mater. Sci. **188**, 110239 (2021).
18. C. Chen, F. Zhang, H. Xu, Z. Yang, and G. M. Pole-
taev, *J. Mater. Sci.* **57**, 1833 (2022).
19. Г. М. Полетаев, И. В. Зоря, *ЖЭТФ* **158**, 485
(2020).
20. Q. Bizot, O. Politano, A. A. Nepapushev, S. G. Vad-
chenko, A. S. Rogachev, and F. Baras, *J. Appl. Phys.*
127, 145304 (2020).
21. M. I. Mendelev, F. Zhang, H. Song, Y. Sun,
C. Z. Wang, and K. M. Ho, *J. Chem. Phys.* **148**,
214705 (2018).
22. H. Y. Zhang, F. Liu, Y. Yang, and D. Y. Sun,
Sci. Rep. **7**, 10241 (2017).
23. M. I. Mendelev, M. J. Rahman, J. J. Hoyt, and
M. Asta, *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **18**, 074002
(2010).
24. D. Y. Sun, M. Asta, and J. J. Hoyt, *Phys. Rev. B.* **69**,
024108 (2004).