

**В. И. Йордан**, канд. физ.-мат. наук, доц., доц. кафедры<sup>1</sup>, вед. математик<sup>2</sup>,  
jordan@phys.asu.ru,

**И. А. Шмаков<sup>1</sup>**, ст. преподаватель, ihammers.sia@gmail.com

<sup>1</sup> Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Алтайский государственный университет", Барнаул

<sup>2</sup> Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН, Новосибирск

# 3D-визуализация гетерофазных интерметаллидных структур на основе компьютерного моделирования СВС в наноразмерной слоисто-блочной структуре Ti-Al

Приведены результаты термического и микроструктурного анализов самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС) интерметаллических соединений в наноразмерной атомной слоисто-блочной структуре Ti-Al, полученные с использованием известных программных пакетов LAMMPS и OVITO свободного доступа, а также с помощью программных средств, разработанных авторами статьи. С помощью пакета LAMMPS в версии параллельных вычислений, программная реализация которого основана на методе "молекулярной динамики", проводилось моделирование процесса СВС. Для 3D-визуализации результатов моделирования использовался пакет OVITO. Среди результатов микроструктурного анализа заслуживает внимания возникновение в ходе реакции СВС устойчивых гетерофазных интерметаллидных структур, подтвержденных с помощью пакета OVITO и созданного авторами программного модуля для расчета набора профилей плотности вещества СВС-продукта. В гетерофазных интерметаллидных структурах удалось обнаружить локальные особенности в виде слоистых квазикогерентных интерметаллических прослоек с наличием в них двумерных дефектов кристаллических решеток — плоскостей двойникования, разграничающих интерметаллические прослойки на пары зерен (двойников) с симметричной переориентацией решеток.

**Ключевые слова:** СВС, метод молекулярной динамики, система реагентов Ti-Al, элементарная кристаллическая ячейка, слоисто-блочная структура, температурный профиль, профиль плотности, гетерофазная интерметаллидная структура, дефект решетки, двойникование, параллельные вычисления, пакеты LAMMPS и OVITO

## Введение

Среди алюминидов титана в качестве перспективных конструкционных материалов можно выделить такие интерметаллидные сплавы, как  $TiAl_3$ ,  $TiAl$ ,  $Ti_3Al$ . Благодаря их прочностным свойствам, малой плотности, высокой коррозионной стойкости, жаростойкости и жаропрочности алюминиды титана оказались весьма привлекательными для различных областей машиностроения, в том числе авиационно-космической инженерии для создания защитных покрытий на технические изделия и материалы [1, 2].

В качестве эффективной технологии получения алюминидов титана уже несколько десятиле-

тий (начиная с 1980-х гг.) используется самораспространяющийся высокотемпературный синтез (СВС), в процессе которого волна, возникающая за счет большого выделения тепловой энергии в результате экзотермической химической реакции компонентов смеси (например, тонкодисперсных порошков), распространяется по смеси от слоя к слою, в которых синтезируются твердые целевые продукты [3]. Воспламенение первого слоя можно добиться воздействием на поверхность смеси кратковременного теплового импульса, например, с помощью электрической спирали, лазерного луча и др.

Перед фронтом волны горения находится зона прогрева, формирующаяся теплопереносом.

За фронтом волны находится зона "догорания", в которой еще продолжаются химические реакции, и которая впоследствии определяет стадию структуро- и фазообразования с учетом вторичных физико-химических превращений, определяющих состав и структуру конечных продуктов СВС [3]. Свойства конечных продуктов во многом определяются влиянием начальных условий и следующих факторов: пористости смеси реагентов и их дисперсности; стехиометрического начального соотношения реагентов; степени разбавления смеси инертными добавками; температуры смеси; тепловых потерь во внешнюю среду; устойчивости движения фронта волны горения и др.

Поведение волны горения на макроскопическом уровне формируется процессами, происходящими в микрогетерогенной структуре волны горения, в которой проявляется пространственная дискретность горения в виде "микроочагов" СВС, влияющих на устойчивость горения.

Физические эксперименты для исследования микрокинетики СВС требуют применения дорогостоящего оборудования, дорогостоящих порошковых материалов в качестве реагентов смеси и продолжительного времени на их проведение. В дополнение к экспериментальным исследованиям в области СВС в последнее время стали эффективными и целенаправленными методы компьютерного моделирования процесса СВС и программные пакеты на их основе. Такие пакеты в конфигурации параллельных вычислений позволили ускорить выполнение большого числа вычислительных экспериментов (ВЭ) по сравнению с физическими экспериментами. В качестве примеров использования программных пакетов для моделирования микрокинетики СВС можно отметить известные, используемые в режиме свободного доступа пакеты LAMMPS [4], OVITO [5, 6].

### **Краткое описание функциональных возможностей программных пакетов LAMMPS и OVITO**

В пакете LAMMPS программно реализован метод молекулярной динамики (МД), который в версии параллельных вычислений позволяет выполнять ВЭ по имитационному моделированию процесса СВС для атомных систем, содержащих до нескольких миллионов атомов.

В рамках метода МД (как метода статистической физики) у взаимодействующих между собой атомов изменяются микроскопические параметры (их координаты и скорости), а следовательно, в атомной системе изменяются макроскопические

параметры: энергия, температура и давление. Равновесные состояния системы с некоторыми неизменными макропараметрами определяют понятия "канонических ансамблей" термодинамики в статистической механике.

Например, в каноническом ансамбле *NVT* и соответствующем ему термостате Ноэ—Гувера сохраняются следующие значения: число атомов *N*; объем *V*; температура *T*. Микроканонический ансамбль *NVE*, где *E* — внутренняя энергия системы, и соответствующий ему термостат Ланжевена можно использовать для быстрого достижения определенного равновесного состояния системы. Не требуя условия термостатирования, с помощью ансамбля *NVE* можно отслеживать эволюцию системы. Еще одним каноническим ансамблем является *NPT*-ансамбль с термостатом и баростатом, где *P* — давление.

Например, вычислительную процедуру метода МД можно определить с помощью многошагового алгоритма Верле [7, 8]:

$$\begin{cases} v_i(t + \Delta t/2) = v_i(t) + \frac{F_i(t)}{2m_i} \Delta t, \\ r_i(t + \Delta t) = r_i(t) + v_i(t + \Delta t/2) \Delta t, \\ F_i(t + \Delta t) = -\nabla_i U(r_i(t + \Delta t)), \\ v_i(t + \Delta t) = v_i(t + \Delta t/2) + \frac{F_i(t + \Delta t)}{2m_i} \Delta t, \end{cases} \quad (1)$$

в котором с учетом дискретного временного шага  $\Delta t$  и интегрированием уравнений движения (уравнений Ньютона) рассчитываются траектории частиц.

В системе (1):  $v_i(t)$  — скорость *i*-го атома;  $r_i(t)$  — радиус-вектор *i*-го атома;  $F_i(t)$  — вектор-сила, действующая на *i*-й атом;  $m_i$  — масса *i*-го атома;  $\nabla_i U(r_i(t))$  — градиент от потенциала  $U(r_i(t))$ , который определяет действующую на *i*-й атом силу  $F_i(t)$ . В первой и последней формулах системы уравнений (1) отношения значений сил  $F_i(t)$  и  $F_i(t + \Delta t)$  к массе  $m_i$  определяют значения ускорений *i*-го атома в моменты времени *t* и *t + Δt* соответственно. Сила  $F_i(t)$ , действующая на *i*-й атом, определяется с помощью градиента от многочастичного потенциала  $U(r_i(t))$  как суммарный результат взаимодействия с каждым "соседним" атомом (число соседних атомов определяется так называемым радиусом "обрезки"). Расчитанные наборы координат и скоростей для всех атомов системы в последовательные моменты времени позволяют рассчитывать энергию системы атомов, температуру и другие параметры системы в те же моменты времени. Точность таких расчетов

зависит от выбора модельной функции потенциала межатомного взаимодействия  $U(r)$ .

Для исследования синтезируемых интерметаллических сплавов системы Ti-Al достаточно эффективным и универсальным потенциалом межатомного взаимодействия является модель "погруженного атома" (*embedded atom model* — EAM) [9]. Доступный для загрузки табличный файл EAM-потенциала (<https://www.ctcms.nist.gov/potentials/Download/2003--Zope-R-R-Mishin-Y-Ti-Al/2/Zope-Ti-Al-2003.eam.alloy>), предназначенный для системы Ti-Al, используется как входной файл для программного пакета LAMMPS (<http://lammps.sandia.gov/>). Использование EAM-потенциалов совместно с методом МД достаточно эффективно при моделировании и оценке механических, тепловых и структурных свойств металлических систем.

Пакет программ LAMMPS свободно распространяется по лицензии GPL и доступен в виде исходных кодов. Версия, написанная на C++ с интерфейсом передачи сообщений MPI, позволяет выполнять параллельные вычисления и значительно ускорить большой объем вычислений при симуляции исследуемых процессов [4]. Построение атомной системы, назначение потенциалов и настройки процедур моделирования реализуются в пакете LAMMPS с помощью входного конфигурационного файла (config.txt), предварительно создаваемого исследователем. Симуляция исследуемого процесса запускается последовательностью команд, записанных в файле config.txt.

Пакет LAMMPS использует модель "списков соседей" для частиц, которые отталкиваются на коротких расстояниях, поэтому локальная плотность частиц невысока, чем обеспечивается высокая вычислительная эффективность (процессоры обмениваются информацией о списках — о таких поддоменах).

Пакет OVITO [5, 6], в котором также используется пространственная декомпозиция на поддомены, применяется для 3D-визуализации исследуемых сложных объектов и процессов, а также для построения изображений с распределением атомов и типов структур, соответствующих элементарным ячейкам ГЦК (гранецентрированная кубическая), ОЦК (объемно-центрированная кубическая), ГПУ (гексагональная плотноупакованная) и т. д. (англ. аббр.: fcc, bcc, hcp и т. д.). Для рендеринга (отрисовки или визуализации) можно использовать способы трассировки лучей, реализованные в компонентах OpenGL, Tachyon, OSPRay и POV-Ray, которые можно включать в конфигурацию программы OVITO (либо отключать).

С учетом изложенного выше можно сказать, что важную роль в теоретических подходах к изучению процесса СВС играют программные пакеты и комплексы программ, создаваемые группами разработчиков. С одной стороны, такие разработчики глубоко погружены в предметную область СВС, с другой стороны, они профессионально владеют технологиями программирования и инструментальными средствами программной инженерии.

Цель исследования, результаты которого представлены в настоящей статье, — использование методологии применения и совершенствования комплекса программных средств вычислительной технологии. Такая технология призвана интегрировать в себе численные методы и методы компьютерного имитационного моделирования микрокинетики СВС в наноразмерных атомных слоисто-блочных структурах (СБС) системы Ti-Al с последующей компьютерной 3D-визуализацией процесса фазо- и структурообразования.

## Постановка задач и подходы к их решению

Процесс создания комплекса программных средств для компьютерного имитационного моделирования микрокинетики СВС в наноразмерных атомных СБС системы Ti-Al с последующей компьютерной 3D-визуализацией процесса фазо- и структурообразования был разделен на перечисленные далее задачи (этапы), с которыми синхронизирована методика моделирования СВС.

Этап 1. *Создание (построение) исходной наноразмерной атомной СБС системы реагентов Ti-Al, характеризующейся шахматноподобным расположением чередующихся блоков.*

Для решения этой задачи используется пакет LAMMPS, на вход которого загружается упомянутый выше "конфигурационный" файл config.txt, предварительно создаваемый исследователем. В нескольких первых командных строках такого файла указываются: единицы измерения некоторых величин (массы, расстояния, времени, скорости, силы, энергии, температуры и т. п.); модель выбранного потенциала (например, EAM); условия поведения частиц (атомов) на границах системы (например, периодические краевые условия). В следующих строках файла config.txt задаются общие размеры исходной атомной системы и размеры каждого региона (слоя или блока). Кроме того, указывается схема расположения регионов и заполнения их кристаллическими ячейками атомов с указанием параметров ячеек (например, один блок с ГПУ-hcp-ячейками для атомов Ti, другой блок с ГЦК-fcc-ячейками для атомов Al).

---

*Этап 2. Моделирование процесса прогрева СБС однородно по всему объему структуры при постоянной начальной температуре  $T_0$  в течение определенного непродолжительного времени для релаксации атомной структуры СБС.*

Моделирование релаксации СБС проводится в пакете LAMMPS запуском симуляции взаимодействия атомов в соответствии с алгоритмом МД последующими командами, записанными в файле config.txt. Такие команды формируются с учетом указанных параметров канонического *NPT*-ансамбля (в нашем случае —  $N = 1\ 028\ 175$  атомов; давление  $P = 1$  Бар; начальная температура  $T_0 = 800$  К). Дополнительно указываются: длительность релаксации (в нашем случае — 0,4 нс) и параметр кинетической энергии для каждого атома системы, который должен вычисляться через указанный временной шаг (в нашем случае — через 0,1 нс) и далее на всех этапах моделирования. В конце каждого временного шага сохраняется на внешнем диске очередной выходной файл Res\_i.dat (на данном этапе  $i = 1, 2, 3, 4$ ). Такой файл содержит записи выходных данных по каждому из  $N$  атомов системы в следующем формате: тип атома (Ti или Al); координаты атома ( $x, y, z$ ); скорости атома ( $v_x, v_y, v_z$ ); действующие на атом силы ( $f_x, f_y, f_z$ );  $E_a$  — кинетическая энергия атома.

*Этап 3. Моделирование процесса инициирования (зажигания) СВС в наноразмерной атомной СБС (после ее релаксации).*

Аналогично этапу 2 в пакете LAMMPS продолжается симуляция процесса взаимодействия атомов в соответствии с алгоритмом МД следующими по списку файла config.txt командами. В этом списке указываются размеры начальной зоны — области атомной системы, которая подвержена линейному закону нагревания от 800 до 1400 К кусочно-ступенчатым способом. Это означает, что на каждом достаточно малом промежутке времени температура поднимается на одну "ступеньку", и в течение этого промежутка действуют условия *NVT*-ансамбля с новым значением температуры. Для оставшейся зоны атомной системы действуют условия *NVE*-ансамбля. Этап инициирования (зажигания) СВС длится 0,1 нс, и выходной файл Res\_5.dat записывается на диск.

*Этап 4. Моделирование процесса СВС в среде Ti-Al в течение заданного времени моделирования.*

Аналогично этапу 3 в пакете LAMMPS продолжается симуляция процесса взаимодействия атомов в соответствии с алгоритмом МД следующими по списку файла config.txt командами, в которых указываются условия *NVE*-ансамбля для всей системы, а также периодические краевые условия для направлений  $Y$  и  $Z$  и свободные условия для направления  $X$ . С шагом по времени 0,1 нс на диск записываются очередные выходные файлы

Res\_i.dat, где  $i = 6, 7, \dots, K$ . Значение параметра  $K$  исследователь определяет в файле config.txt, и оно соответствует заранее планируемой продолжительности  $t_K$  моделируемого процесса СВС, где  $t_K = K/10$  нс. На этом этапе волна горения трансформирует исходную СБС.

*Этап 5. Реализация 3D-визуализации результатов моделирования процесса СВС с помощью пакета OVITO и программных средств авторов статьи.*

Во-первых, в пакет OVITO последовательно загружаются выходные файлы Res\_i.dat, выбранные исследователем для характерных моментов времени процесса СВС (им соответствует определенный набор индексов  $i$ ). С использованием данных о типах всех атомов системы Ti-Al и их координат ( $x, y, z$ ) формируется каждый раз 3D-изображение пространственной структуры распределения всех атомов в системе Ti-Al, либо можно получить 2D-изображение в заданном сечении объема системы Ti-Al. Кроме того, при открытии в интерфейсе вкладки Modify, раскрывается меню Pipeline editor (редактор конвейера обработки данных), в котором необходимо выбрать модификатор Ackland-Jones analysis. Тем самым можно получить 3D- или 2D-изображения распределения типов структур (ГЦК-fcc, ОЦК-bcc, ГПУ-hcp и т. д.) в объеме системы Ti-Al или в заданном сечении этого объема.

Во-вторых, для визуализации результатов моделирования СВС для каждого момента времени (с шагом 0,1 нс) в виде одномерных распределений температуры и плотности вещества вдоль направления волны горения (так называемых профилей температуры и плотности) авторами настоящей статьи ранее был разработан программный модуль T&P-profiles [11–13] на языке C/C++ (компилятор GCC). Идея алгоритма расчета профилей приведена далее.

Разбивая вдоль направления волны горения СВС с малым шагом 4 нм (т. е. вдоль оси  $X$  с ее предельным значением 420 нм) весь объем СБС на домены (параллелепипеды), в каждом из доменов оценивали осредненные температуры и плотности вещества. Длина домена 4 нм по оси  $X$  достаточно мала, а высота доменов (по оси  $Z$ ) совпадает с высотой СБС и равна 16,5 нм. Глубина домена (по оси  $Y$ ) совпадает с глубиной СБС и равна 2,5 нм (достаточно мала). Соответствующие размеры всех доменов одинаковы ( $4 \times 2,5 \times 16,5$  нм) и их объем равен 165 нм<sup>3</sup>. С использованием файлов Res\_i.dat, для каждого домена с помощью циклов вычисляются по два счетчика: первый счетчик фиксирует число атомов первого типа (Ti), центры которых находятся внутри домена; второй счетчик — число атомов второго типа (Al), центры которых также находятся в этом домене. Умножая значения первого счетчика на массу атома Ti и значения второго счетчика на массу атома Al, а затем сумму этих результатов поделив на объем домена (165 нм<sup>3</sup>), полу-

чаем значение плотности вещества домена. Аналогично, суммируя кинетические энергии тех атомов, которые входят в домен, рассчитываем суммарную внутреннюю энергию атомов домена, которая через константу Больцмана позволяет определять осредненную температуру в домене. Две последовательности значений температуры и плотности, соответствующие последовательности  $X$ -координат центров всех доменов, определяют понятия профилей температуры и плотности вещества СВС. Длина каждого из 12 блоков СВС равна 35 нм и на один блок приходится почти 9 доменов. Каждый из профилей содержит по 105 точек (отношение длины 420 нм к длине домена 4 нм).

Вследствие необходимости рассчитывать профили температуры и плотности для каждого момента времени (рассчитываем два семейства профилей), возникла потребность в ускорении расчетов. Для этого была использована утилита командной строки GNU parallel в качестве программной оболочки под управлением ОС GNU/Linux для параллельного выполнения однотипных заданий обработки блоков данных одинакового размера, но с различными значениями в них, для параллельного выполнения набора SIMD-задач (рис. 1).

В памяти вычислительного кластера создается необходимое число копий исполняемого файла T&P-profiles.exe, созданного с использованием GCC-компилиатора языка программирования C/C++, и система GNU parallel с помощью загруженных в нее файлов Res\_i.dat одновременно (параллельно) рассчитывает наборы профилей температуры и плотности.

**Замечание:** профили, приведенные ниже в данной статье, получены авторами с учетом предварительной коррекции алгоритмов расчета профилей и программного модуля T&P-profiles. Суть коррекции состоит в следующем.

В первоначальной версии алгоритмов расчета профилей два счетчика числа атомов двух типов

(атомы первого типа — Ti, атомы второго типа — Al), входящих в анализируемый домен, допускали только целочисленные значения. Таким образом, если центр какого-либо атома, например, первого типа, оказался в анализируемом домене, то только первый счетчик увеличивался на 1. Однако практически для каждого домена имеют место ситуации, когда некоторые атомы расположены своими частями одновременно в двух соседних (смежных) доменах. Это означает, что эти атомы разделены общей гранью (плоскостью) смежных доменов. Поэтому в таких случаях более корректно однотипные счетчики двух смежных доменов одновременно увеличивать на соответствующие им дробные доли объема атома (сумма долей равна 1). Таким образом, оба счетчика числа атомов двух типов, входящих в анализируемый домен, могут оказаться равными вещественным числам с дробной частью. Далее приведены результаты распределения числа атомов по доменам в тестовых примерах для регулярной кристаллической атомной решетки (например, для атомов Ti) при разбиении решетки на последовательность доменов с одинаковыми размерами.

- Для первоначальной версии алгоритмов расчета профилей общее целочисленное число атомов для каждого домена (сумма двух счетчиков для каждого домена), оказывается не постоянным числом, а флуктуация целочисленного числа атомов в доменах находится в диапазоне 0,5...1,2 %.

- Для скорректированного алгоритма, в котором значения счетчиков (следовательно, и их сумма) допускают вещественные значения с дробной частью, флуктуация нецелочисленного количества атомов в доменах менее 0,01 %, т. е. плотность вещества для атомной системы с регулярной решеткой оказывается практически постоянной. При этом при сложении суммы двух счетчиков по всем доменам получается практически целое число (отличие от целого менее 0,01 %), совпадающее с общим числом атомов исходной СВС системы Ti-Al.

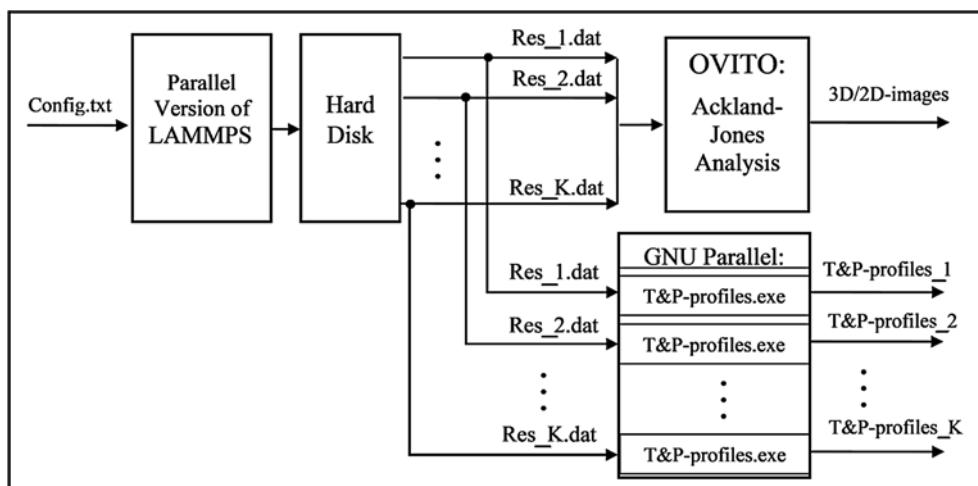


Рис. 1. Структурная схема комплекса программ для моделирования СВС

## **Методика и этапы молекулярно-динамического моделирования СБС в наноразмерных атомных СБС Ti-Al**

В предыдущих публикациях авторы статьи исследовали микрокинетику СБС в наноразмерных атомных слоистых системах Ni-Al [10] и Ti-Al [11]. Структура слоистой системы Ti-Al (рис. 2, *a*, см. вторую сторону обложки) состоит из пяти крупных слоев, содержащих определенное число атомных плоскостей [11].

В слоистой системе Ni—Al при стехиометрии  $N_{\text{Ni}}/N_{\text{Al}} = 3,94$  гетерофазные структуры не возникали [10].

Однако в слоистой системе Ti-Al со стехиометрией  $N_{\text{Ti}}/N_{\text{Al}} = 1,23$  [11] гетерофазные интерметаллидные структуры были обнаружены (рис. 2, *b*, см. вторую сторону обложки). На последней временной диаграмме (маркер 16 ns, рис. 2, *b*, см. вторую сторону обложки), когда волна горения прошла почти до конца системы Ti-Al, отчетливо видны как минимум три гетерофазные структуры с резкими границами. Визуализация временных диаграмм (см. рис. 2, *b*, см. вторую сторону обложки) получена с помощью пакета OVITO.

В данной статье приведены результаты моделирования микрогетерогенного горения в атомной СБС с шахматноподобным чередованием наноразмерных блоков из атомов Ti и Al (рис. 3, см. вторую сторону обложки).

В каждом из пяти слоев находятся по 12 блоков длиной 35 нм. Верхний и нижний слои по высоте равны половине высоты каждого из трех внутренних слоев. Таким образом, высота внутреннего слоя равна приблизительно 4,125 нм, а третье измерение у блоков равно 2,5 нм. Другими словами, система Ti-Al в виде СБС состоит из 12 вертикальных штабелей по пять блоков. Размеры каждого штабеля определяются как  $35 \times 2,5 \times 16,5$  нм. В СБС входят 569 600 атомов Ti и 458 575 атомов Al, т. е. общее число атомов  $N = 1\ 028\ 175$ . Стехиометрия состава компонентов определяется отношением  $N_{\text{Ti}}/N_{\text{Al}} = 1,242$ , близким к стехиометрии 1,23 для слоистой структуры Ti-Al [11]. Доля атомов Ti равна 0,554 (55,4 %), доля атомов Al равна 0,446 (44,6 %). Ячейки атомов Ti соответствуют структуре гексагональной плотной упаковки (тип ячеек ГПУ-hcp). ГПУ-ячейки характеризуются параметрами:  $a = 0,29508$  нм и  $c = 0,46855$  нм, где  $a$  — длина ребра основания (правильного шестиугольника);  $c$  — высота ячейки,  $c/a = 1,5879$  [9]. Атомы Al соответствуют структуре гранецентрированных кубических ячеек (тип ячеек ГЦК-fcc). ГЦК-ячейкам соответствует параметр  $a = 0,405$  нм [10].

Методические условия по моделированию СБС в СБС (см. рис. 3) совпадают с условиями для слоистой структуры (см. рис. 2, *a*). Используется

пакет LAMMPS с поддержкой параллельных вычислений и EAM-потенциал [9], методика моделирования предусматривает следующие этапы.

На этапе 1 весь объем СБС прогревался в течение 0,4 нс при температуре 800 К. При этом происходила релаксация атомной структуры с термодинамическими параметрами *NPT*-ансамбля  $N = 1\ 028\ 175$ ,  $P = 1$  Бар,  $T = 800$  К. Кроме того, по всем трем измерениям атомной структуры сохранялись периодические граничные условия в течение 0,4 нс.

На этапе 2 моделирования в течение 0,1 нс в начальной зоне СБС в пределах 50 нм (как показано на рис. 3, см. вторую сторону обложки) проводилось линейное прогревание, начиная с 800 и до 1400 К, с сохранением периодических граничных условий для трех измерений. Прогревание в пределах 50 нм осуществлялось в условиях *NVT*-ансамбля ( $V$  — объем зоны прогревания), а в оставшейся части объема (в пределах 50...420 нм) в течение этих же 0,1 нс соблюдались условия *NVE*-ансамбля. По истечении 0,1 нс в исследуемой структуре фиксировались свободные граничные условия вдоль направления  $X$ , а по направлениям осей  $Y$  и  $Z$  сохранялись периодические условия. В результате этих действий в начальной зоне системы Ti-Al инициировался процесс СБС (процесс воспламенения). В последующее время (этап 3) при соблюдении условий *NVE*-ансамбля во всем объеме системы Ti-Al происходил процесс СБС с дальнейшим распространением волны горения вдоль направления оси  $X$ .

## **Термический анализ и интерпретация гетерофазных интерметаллидных структур в наноразмерной атомной СБС системы Ti-Al**

Перейдем к анализу полученных профилей температуры (рис. 4, см. вторую сторону обложки). Каждый из профилей содержит по 105 точек, соответствующих доменам (отношение длины 420 нм к длине домена 4 нм).

Отношение линейного перемещения фронта волны горения ко времени этого перемещения (рис. 4, см. вторую сторону обложки) определяет оценку скорости движения фронта волны горения в СБС. Скорость движения фронта увеличивается приблизительно с 13 м/с (в пределах первых 12 нс) и до 22 м/с (от 12 до 24 нс). Таким образом, можно сделать вывод, что наблюдается режим разгона волны горения.

С момента воспламенения начальной зоны СБС наблюдаются сверхадиабатические температуры (почти до 2000 К) с последующей релаксацией до 1500 К (по времени около 5...6 нс). После 12 нс отчетливо видно, что в зонах прогрева, в которых еще отсутствует горение, начальная температура 800 К не сохраняется и начинает возрастать (до 1000 К), так как за предыдущее время в зону прогрева поступило существенное количество теплоты.

В конечной зоне прогревания системы Ti-Al к моменту времени 24 нс (и далее) температура очень быстро растет, поэтому зажигание СВС в этой зоне также сопровождается сверхдиабатическими температурами (до 1800 К). После релаксации сверхдиабатического выброса (к 32 нс) в конечной зоне устанавливается температура горения около 1600 К. Это на 100 К выше, чем температура, которая была практически неизменной для подавляющей части объема в предыдущие 24 нс. Более высокое значение 1600 К температуры горения в конечной зоне объясняется более высокой начальной температурой прогревания этой зоны (свыше 1000 вместо 800 К), что и послужило причиной заметного разгона движения фронта волны горения. К тому же, в СВС значение удельной поверхности контакта атомов Ti с атомами Al немного выше аналогичного параметра в слоистой структуре (рис. 2, a, см. вторую сторону обложки), т. е. в СВС диффузия атомов более интенсивна и скорость горения (следовательно, и скорость движения фронта волны горения) возрастает. Физические СВС-эксперименты, проводимые в тонких пленках системы Ni—Al (*nanofoils* [14]), подтверждают высокие скорости движения волны горения (до нескольких м/с).

Изображения, показанные на рис. 5 и 6 (см. третью сторону обложки), получены с помощью программы OVITO [5, 6].

Оценки скорости движения фронта волны горения, полученные на основе анализа изображений, представленных на рис. 5 и 6 (см. третью сторону обложки), практически совпадают с аналогичными оценками скорости фронта, полученными анализом температурных профилей (рис. 4, см. вторую сторону обложки). Кроме того, можно извлечь информацию о процессе взаимной диффузии атомов (рис. 5, см. третью сторону обложки) и о стабильном формировании гетерофазных интерметалличидных структур (рис. 6, см. третью сторону обложки).

На каждом из семи фрагментов рис. 5 видно, что в зонах "догорания" (после прохождения волны горения) СВС практически полностью разрушена (приблизительно к моменту времени 25 нс, см. рис. 5 и 6). Тем не менее, к моменту времени 32 нс на рис. 5 еще заметны локальные сосредоточения атомов Ti (однородного красного цвета).

На фрагментах рис. 6, начиная с 3-го и до последнего 7-го включительно, в тех же зонах, в которых на рис. 5 заметны локальные сосредоточения атомов Ti, отчетливо видны пять гетерофазных структур с резкими границами, внутри которых доминируют точки зеленого цвета и заметны узкие полоски-прожилки с доминированием в них точек красного цвета.

При определении типов элементарных ячеек с помощью пакета OVITO с использованием модификатора Ackland-Jones analysis (см. рис. 6) зеленый цвет точек соответствует ячейкам типа ГЦК-fcc,

красный цвет точек — ячейкам типа ГПУ-hcp, синий цвет точек — ячейкам типа ОЦК-bcc.

С течением времени зоны с размещением блоков Ti и Al в СВС сокращаются и сохраняются лишь в тех местах, до которых волна горения еще не дошла. Блокам красного цвета (см. рис. 6) соответствуют блоки атомов Ti в состоянии фазы  $\alpha$ -Ti (тип ячеек ГПУ-hcp), а блокам зеленого цвета — решетки атомов Al (тип ячеек ГЦК-fcc).

В пяти гетерофазных структурах (см. рис. 6) зеленым точкам (ячейкам ГЦК-fcc) не могут соответствовать скопления атомов Al, так как на рис. 5 в соответствующих им местах отсутствуют зоны с доминированием зеленого цвета, соответствующего атомам Al (т. е. на рис. 5 зеленые точки рассеяны равномерно так же, как и вне пяти гетерофазных структур). Необходимо отметить, что ячейкам типа ГЦК-fcc структурно близки гранецентрированные тетрагонально-искаженные ячейки (обозначим их как ячейки типа ГЦТ-fct), соответствующие интерметаллической  $\gamma$ -фазе TiAl. По этой причине в пяти гетерофазных структурах доминирует  $\gamma$ -фаза TiAl (см. рис. 6 — зеленые точки в гетерофазных структурах). Узким прожилкам темно-красного цвета (тип ячеек ГПУ-hcp) в пяти гетерофазных структурах соответствуют сосредоточения фазы  $\alpha$ -Ti. Сопоставляя между собой температурные профили (см. рис. 4) с образующимися гетерофазными структурами (см. рис. 6) для одного и того же момента времени, можно видеть, что гетерофазные структуры формируются при температуре, превышающей 1400 К, т. е. превышающей температуру перитектического распада интерметаллида  $Ti_3Al$ . Другими словами, для стехиометрии  $N_{Ti}/N_{Al} = 1,242$  в предвоспламенительной зоне (см. рис. 4, температуры 1100...1400 К) согласно равновесной диаграмме состояния для системы Ti-Al [15] формируется двухфазная область  $Ti_3Al + TiAl$ , и с повышением температуры горения (свыше 1400 К) фаза  $Ti_3Al$  перитектически распадается и нарастает количество фазы TiAl.

В подтверждение анализа, выполненного на основе пакета OVITO, можно указать на выводы, которые вытекают из анализа равновесной диаграммы состояния для системы Ti-Al [15]: при температурах 1470...1600 К (см. рис. 4, маркер 32 нс) для стехиометрии  $N_{Ti}/N_{Al} = 1,242$  в системе Ti-Al [15] должны формироваться две двухфазные области:  $\alpha$ -Ti + + TiAl (при температурах меньше 1513 К) и  $\beta$ -Ti + + TiAl (при температурах выше 1513 К). Фазе  $\beta$ -Ti соответствуют ячейки типа ОЦК-bcc (им на рис. 6 соответствуют синие точки, которые частично наблюдаются и в пяти гетерофазных структурах). Вне гетерофазных структур точек синего цвета еще больше, поэтому можно утверждать о присутствии фазы  $\beta$ -Ti в определенной степени по всему объему реагирующей системы.

Как видно на рис. 2, б (для слоистой системы Ti-Al) и рис. 6 (для СБС Ti-Al), вне гетерофазных структур в обоих случаях наблюдается смесь различных цветов (красный, синий, зеленый, желтый и белый), соответствующая неупорядоченной смеси различных структур и интерметаллических фаз (кроме фаз TiAl,  $\alpha$ -Ti,  $\beta$ -Ti и  $Ti_3Al$  присутствует и фаза  $TiAl_3$ ). Значения плотностей фаз  $\alpha$ -Ti,  $Ti_3Al$  и TiAl существенно выше значений плотности фазы  $TiAl_3$  и смеси вещества, распределенного вне гетерофазных структур. Этот факт, который следует из анализа рис. 5 и 6 (на основе пакета OVITO), подтверждается другим методом анализа, основанного на построении профилей плотности вещества (рис. 7, см. третью сторону обложки) вдоль направления распространения волны горения СВС (оси X).

Метод расчета и анализа профилей плотности был апробирован авторами ранее в работе [11] и в последующих публикациях, включая [12, 13].

После прохождения волны горения через СВС (после 25 нс), на последнем профиле плотности (маркеры 32 нс, см. рис. 7) наблюдаются пять пиков плотности, соответствующих расположению гетерофазных структур на рис. 6. Кроме того, эффективная ширина пиков плотности (около 25 нм) практически совпадает с шириной гетерофазных интерметаллических структур (согласно рис. 6), т. е. согласуются оценки размеров гетерофазных структур, полученных двумя разными методами (визуализация OVITO и профили плотности).

Рисунки 5, 6 и 7 (см. третью сторону обложки) главным образом способствовали анализу процесса структурообразования в реагирующей системе Ti-Al. Однако после 25 нс прореагировавшая система Ti-Al переходит в состояние так называемой зоны догорания и эволюция ее структуры и фазообразования на этом не заканчивается.

Отметим, что в реальном процессе СВС состояние догорания по времени длится достаточно долго (в пределах нескольких десятков секунд, а не наносекунд), продолжаясь даже и при остывании СВС-системы. Это означает, что на второй стадии СВС продолжаются вторичные физико-химические превращения, определяющие состав и структуру конечных продуктов СВС (интерметаллидов титана).

В нашем случае процесс моделирования вторую стадию процессов СВС не охватывает. Причина в том, что в таком случае затрачиваемое на моделирование второй стадии время оказалось бы в миллиард раз больше, чем затраченные нескольких суток на моделирование первой стадии процесса СВС (с модельным временем 32 нс). Далее продолжим анализ локальных особенностей в образованных гетерофазных интерметаллических структурах (рис. 8 и 9, см. четвертую сторону обложки).

Возникновение гетерофазных интерметаллических структур (см. рис. 6) и подструктур (см. рис. 8 и 9) внутри этих гетерофазных структур в условиях температурно-силовых воздействий на атомы связано с проявлением всплесков давления, внутренних дефектов и движением дислокаций в локальных структурах атомной системы Ti-Al.

На рис. 8 (см. четвертую сторону обложки) показаны 3D-снимки (в увеличенном масштабе) двух различных распределений атомов для одной и той же гетерофазной структуры, которая отражена первой (слева) на последнем фрагменте рис. 6 (маркер 32 нс, см. третью сторону обложки).

На рис. 9 (см. четвертую сторону обложки) отражены нижние половины этих двух 3D-снимков рис. 8 с дополнительным увеличением масштаба визуализации. Сопоставляя полосу с доминированием окрашенных в красный цвет атомов (рис. 9, б) с соответствующей ей полосой фрагмента на рис. 9, а, видно, что в правой части имеется монолитный блок из атомов Ti на фрагменте рис. 9, а, так же, как и на фрагменте рис. 9, б окрашенных в красный цвет с принадлежностью к структурам ГПУ-hcp типа. Монолитный блок атомов Ti соответствует фазе  $\alpha$ -Ti. Левее него в этой же полосе согласно фрагменту рис. 9, а явно выражен результат растворения блока атомов Ti атомами Al. Согласно фрагменту на рис. 9, б здесь с учетом доминирования красного цвета возможно только одно интерметаллическое соединение со структурами типа ГПУ-hcp — это фаза  $Ti_3Al$ .

Кроме того, в монолитном блоке фазы  $\alpha$ -Ti (см. рис. 9, а) наблюдается двумерный дефект — вертикальная плоскость двойникования, перпендикулярная к плоскости снимка, разделяющая два зерна (двух двойников) с симметричной пространственной переориентацией их кристаллических решеток. Атомы, помеченные синим цветом на рис. 9, б, как уже отмечалось выше, соответствуют типу ячеек ОЦК-bcc и указывают на рассеянное распределение фазы  $\beta$ -Ti в гетерофазной интерметаллической структуре (ГФИС). Скопления же атомов, помеченных зеленым цветом (см. рис. 9, б), на что обращалось внимание ранее, соответствуют типу ячеек ГЦК-fcc (и указывают на доминирование фазы TiAl в ГФИС).

## Заключение

Продемонстрирована целесообразность применения программных пакетов LAMMPS и OVITO для МД-моделирования и визуализации процесса СВС в наноразмерной СБС с шахматноподобным расположением блоков из атомов Ti и Al. Показана эффективность разработанного авторами программного модуля для расчета профилей температуры

и плотности вещества, позволивших осуществлять температурный анализ микрокинетики СВС и распознавать образующиеся интерметаллические фазы.

Вычислительные эксперименты с использованием метода МД-моделирования СВС позволили обнаружить в процессе фазо- и структурообразования гетерофазные интерметаллидные структуры, связанные с проявлением всплесков давления, внутренних дефектов и движением дислокаций в условиях температурно-силовых воздействий на атомные блоки системы Ti-Al. Внутри гетерофазных интерметаллидных структур в ГПУ-прослойках обнаружен двумерный дефект — плоскость двойникования, разделяющая два зерна (двух двойников) с различающейся пространственной ориентацией их решеток.

Параллельные вычисления с использованием пакета LAMMPS в версии языка C++ совместно с интерфейсом MPI выполнялись на кластере ограниченной вычислительной мощности из 15 ПК (с четырехядерными процессорами) с возможностью распараллеливать вычисления в каждом вычислительном эксперименте на 60 параллельных потоков для атомной системы Ti-Al с достаточно большим общим числом атомов (1 028 175 атомов) по отношению к вычислительной мощности использованного кластера. При этих условиях была достигнута следующая оценка производительности моделирования процесса СВС: за сутки непрерывного времени расчетов на кластере из 15 ПК моделировался процесс СВС длительностью почти 2 нс реального времени.

### Список литературы

1. 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. DOI: 10.17073/1997-308X-2015-1-55-61.

2. Аванесян Т. Ч. Особенности высокотемпературного окисления и микродугового оксидирования сплавов на основе  $\gamma$ -TiAl: дис. ... канд. хим. наук.: 05.17.03. М., 2014. 159 с.

3. Мержанов А. Г. Твердопламменное горение. Черноголовка: ИСМАН, 2000. 224 с.

4. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // J. Comp. Phys. 1995. No. 117. P. 1–19. DOI: 10.1006/jcph.1995.1039.

5. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO — the Open Visualization Tool // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. 2010. Vol. 18, Iss. 1. Article ID 015012. DOI: 10.1088/0965-0393/18/1/015012.

6. Ackland G. J., Jones A. P. Applications of local crystal structure measures in experiment and simulation // Phys. Rev. B. 2006. Vol. 73, Iss. 5. Article ID 054104. DOI: 10.1103/PhysRevB.73.054104.

7. Verlet L. Computer "experiments" on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules // Phys. Rev. 1967. Vol. 159, No. 1. P. 98–103. DOI: 10.1103/PhysRev.159.98.

8. Verlet L. Computer "experiments" on classical fluids. II. Equilibrium correlation functions // Phys. Rev. 1968. Vol. 165, No. 1. P. 201–214. DOI: 10.1103/PhysRev.165.201.

9. Zope R. R., Mishin Y. Interatomic Potentials for Atomistic Simulations of the Ti-Al System // Phys. Rev. B. 2003. Vol. 68, Iss. 2. Article ID 024102. DOI: 10.1103/PhysRevB.68.024102.

10. Шмаков И. А., Иордан В. И., Соколова И. Е. Компьютерное моделирование СВ-синтеза алюминида никеля методом молекулярной динамики в пакете LAMMPS с использованием параллельных вычислений // Высокопроизводительные вычислительные системы и технологии. 2018. Том 2, № 1. С. 48–54.

11. Jordan V. I., 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. Vol. 1281. Article ID 012030. DOI: 10.1088/1742-6596/1281/1/012030.

12. Jordan V. I., Shmakov I. A. 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. Vol. 1304. P. 43–61. DOI: 10.1007/978-3-030-66895-2\_4.

13. Jordan V. I., Shmakov I. A. Method for Intermetallide Spatial 3D-Distribution Recognition in the Cubic Ni@Al "Core-Shell" Nanoparticle based on Computer MD-Simulation of SHS // Communications in Computer and Information Science. 2022. Vol. 1526. P. 101–120. DOI: 10.1007/978-3-030-94141-3\_9.

14. Turlo V., Politano O., Baras F. Microstructure evolution and self-propagating reactions in Ni–Al nanofoils: an atomic-scale description // J. Alloys and Compd. 2017. Vol. 708. P. 989–998. DOI: 10.1016/j.jallcom.2017.03.051.

15. Григоренко Г. М., Костин В. А., Григоренко С. Г. Расчет равновесных диаграмм состояния и фазовых превращений титановых сплавов системы титан–алюминий // Современная электрометаллургия. 2018. № 3. С. 39–44. DOI: 10.15407/sem2018.03.06.

# 3D Visualization of Heterophase Intermetallic Structures Based on Computer Simulation of SHS in a Nanosized Ti-Al Layered-Block Structure

V. I. Jordan, PhD, Associate Professor<sup>1</sup>, Leading Mathematician<sup>2</sup>, jordan@phys.asu.ru,  
I. A. Shmakov, Senior Lecturer<sup>1</sup>, ihammers.sia@gmail.com,

Corresponding author:

Vladimir I. Jordan, PhD, Associate Professor<sup>1</sup>, Leading Mathematician<sup>2</sup>, jordan@phys.asu.ru

<sup>1</sup> Altai State University, Barnaul, 656049, Russian Federation

<sup>2</sup> Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics, SB RAS, Novosibirsk, 630090, Russian Federation

Received on July 27, 2022

Accepted on September 22, 2022

The paper presents the results of thermal and microstructural analysis of the SHS of intermetallic compounds in a nanosized atomic layer-block structure of Ti-Al, obtained using the freely available software packages LAMMPS and OVITO, as well as using the software of the authors of the paper. Using the LAMMPS package in the version of parallel computing, the software implementation of which is based on the "molecular dynamics" method, the SHS process is simulated. For 3D visualization of simulation results, the OVITO package is used. Among the results of microstructural analysis, noteworthy is the appearance of stable heterophase intermetallic structures during the SHS reaction, which were confirmed using the OVITO package and the software module developed by the authors for calculating a set of matter density profiles of the SHS-product. In heterophase intermetallic structures, it was possible to detect local features in the form of layered quasi-coherent intermetallic interlayers with the presence of two-dimensional defects in crystal lattices — twinning planes delimiting pairs of grains (twins) with symmetrical lattice reorientation.

**Keywords:** SH-synthesis, molecular dynamics method, Ti-Al reagent system, unit cell, layered block structure (LBS), temperature profile, density profile, heterophase intermetallic structure, lattice defect, twinning, parallel computing, LAMMPS and OVITO packages

For citation:

**Jordan V. I., Shmakov I. A.** 3D Visualization of Heterophase Intermetallic Structures Based on Computer Simulation of SHS in a Nanosized Ti-Al Layered-Block Structure, *Programmnaya Ingeneria*, 2022, vol. 13, no. 10, pp. 515–524

DOI: 10.17587/prin.13.515-524

## References

1. Pyachin S. A., Ershova T. B., Burkov A. A., Vlasova N. M., Komarova V. S. Using titanium aluminides to create electrospark coatings, *Izvestiya vuzov. Powder metallurgy and functional coatings*, 2015, no. 1, pp. 55–61. DOI: 10.17073/1997-308X-2015-1-55-61 (in Russian).
2. Avanesyan T. Ch. Features of high-temperature oxidation and microarc oxidation of alloys based on  $\gamma$ -TiAl, Diss. ... Ph.D.: 05.17.03. Moscow, 2014, 159 p. (in Russian).
3. Merzhanov A. G. *Solid-Flame Combustion*, Chernogolovka, Izd. ISMAN Publisher, 2000, 224 p. (in Russian).
4. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics, *J. Comp. Phys.*, 1995, no. 117, pp. 1–19. DOI: 10.1006/jcph.1995.1039.
5. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO — the Open Visualization Tool, *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 2010, vol. 18, iss. 1, article ID 015012. DOI: 10.1088/0965-0393/18/1/015012.
6. Ackland G. J., Jones A. P. Applications of local crystal structure measures in experiment and simulation, *Phys. Rev. B*, 2006, vol. 73, iss. 5, article ID 054104. DOI: 10.1103/PhysRevB.73.054104.
7. Verlet L. Computer "experiments" on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard-Jones molecules, *Phys. Rev.*, 1967, vol. 159, no. 1, pp. 98–103. DOI: 10.1103/PhysRev.159.98.
8. Verlet L. Computer "experiments" on classical fluids. II. Equilibrium correlation functions, *Phys. Rev.*, 1968, vol. 165, no. 1, pp. 201–214. DOI: 10.1103/PhysRev.165.201.
9. Zope R. R., Mishin Y. Interatomic Potentials for Atomistic Simulations of the Ti-Al System, *Phys. Rev. B*, 2003, vol. 68, iss. 2, article ID 024102. DOI: 10.1103/PhysRevB.68.024102.
10. Shmakov I. A., Jordan V. I., Sokolova I. E. 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*, 2018, vol. 2, no. 1, pp. 48–54 (in Russian).
11. Jordan V. I., 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, vol. 1281, article ID 012030. DOI: 10.1088/1742-6596/1281/1/012030.
12. Jordan V. I., Shmakov I. A. 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, vol. 1304, pp. 43–61. DOI: 10.1007/978-3-030-66895-2\_4.
13. Jordan V. I., Shmakov I. A. Method for Intermetallide Spatial 3D-Distribution Recognition in the Cubic Ni-Al "Core-Shell" Nanoparticle based on Computer MD-Simulation of SHS, *Communications in Computer and Information Science*, 2022, vol. 1526, pp. 101–120. DOI: 10.1007/978-3-030-94141-3\_9.
14. Turlo V., Politano O., Baras F. Microstructure evolution and self-propagating reactions in Ni-Al nanofoils: an atomic-scale description, *J. Alloys and Compd.*, 2017, vol. 708, pp. 989–998. DOI: 10.1016/j.jallcom.2017.03.051.
15. Grigorenko G. M., Kostin V. A., Grigorenko S. G. Calculation of equilibrium state diagrams and phase transformations of titanium alloys of the titanium-aluminum system, *Modern Electrometallurgy*, 2018, no. 3, pp. 39–44. DOI: 10.15407/sem2018.03.06 (in Russian).

ООО "Издательство "Новые технологии". 107076, Москва, ул. Матросская Тишина, д. 23, стр. 2  
Технический редактор Е. М. Патрушева. Корректор А. В. Чугунова.

Сдано в набор 14.10.2022 г. Подписано в печать 21.11.2022 г. Формат 60×88 1/8. Заказ Р11021  
Цена свободная.

Оригинал-макет ООО "Адвансед солюшнз". Отпечатано в ООО "Адвансед солюшнз".  
119071, г. Москва, Ленинский пр-т, д. 19, стр. 1. Сайт: [www.aov.ru](http://www.aov.ru)

Рисунки к статье В. И. Иордана, И. А. Шмакова

## «3D-ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ГЕТЕРОФАЗНЫХ ИНТЕРМЕТАЛЛИДНЫХ СТРУКТУР НА ОСНОВЕ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ СВС В НАНОРАЗМЕРНОЙ СЛОИСТО-БЛОЧНОЙ СТРУКТУРЕ Ti-Al»

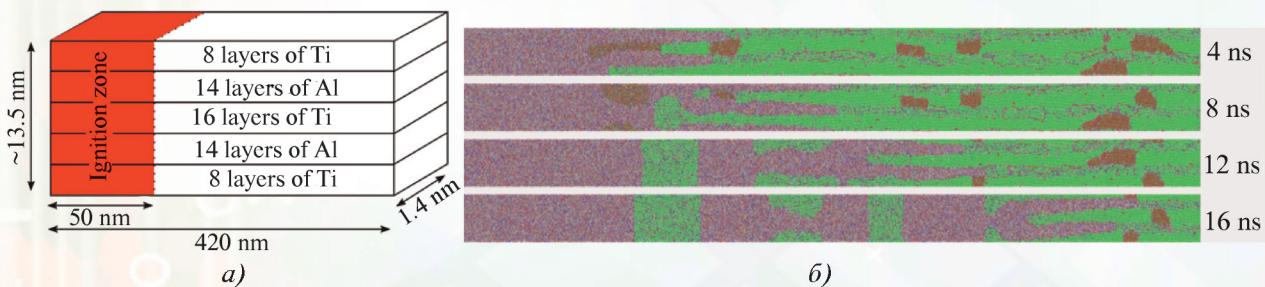


Рис. 2. Структура слоистой атомной системы Ti-Al (а) и временные диаграммы распределения интерметаллических фаз (б) [11]

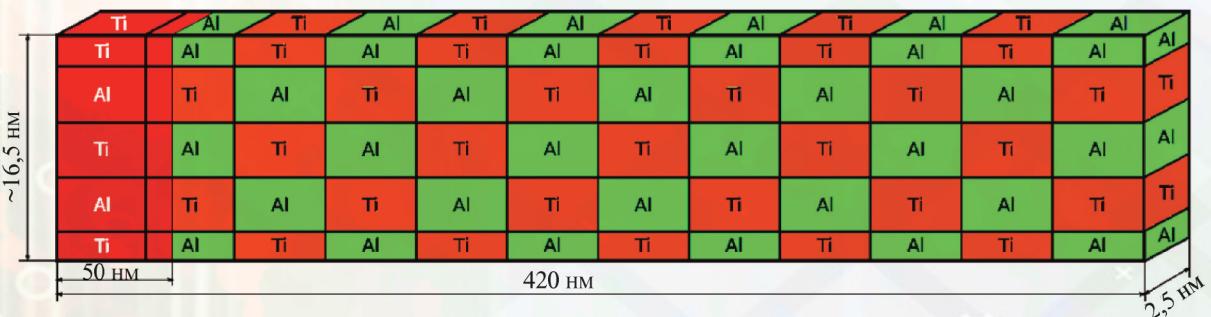


Рис. 3. Структурная схема наноразмерной атомной слоисто-блочной системы Ti-Al

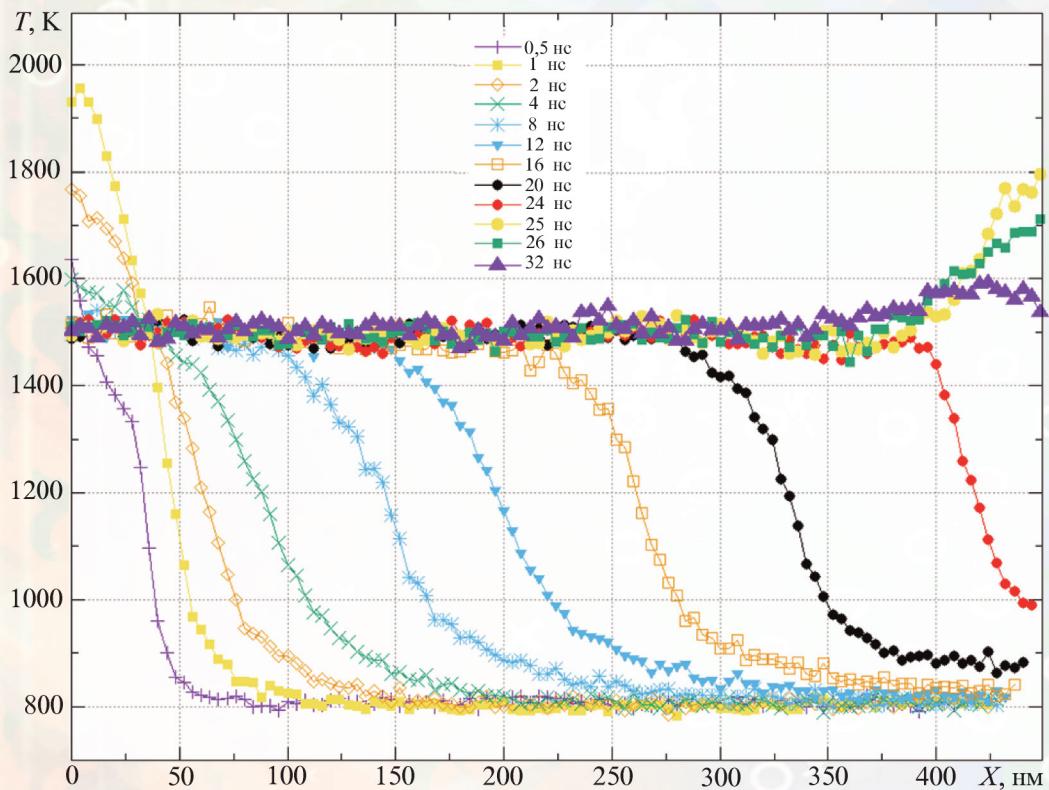


Рис. 4. Температурные профили, соответствующие последовательности моментов времени при продвижении волны горения в СВС системы Ti-Al

Рисунки к статье В. И. Иордана, И. А. Шмакова  
«3D-ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ГЕТЕРОФАЗНЫХ ИНТЕРМЕТАЛЛИДНЫХ СТРУКТУР  
НА ОСНОВЕ КОМПЬЮТЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ СВС  
В НАНОРАЗМЕРНОЙ СЛОИСТО-БЛОЧНОЙ СТРУКТУРЕ Ti-Al»

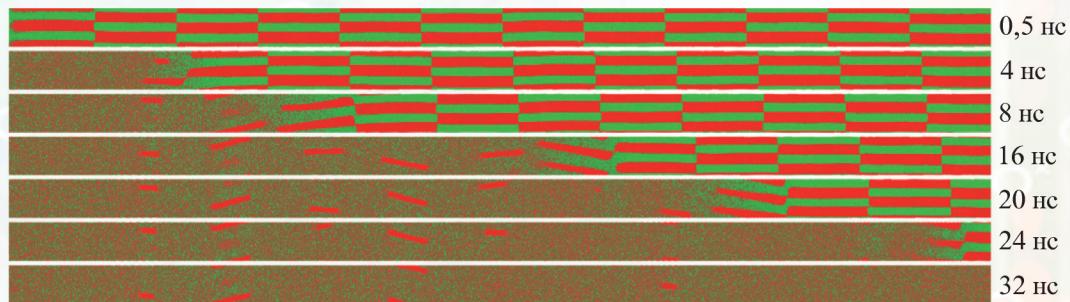


Рис. 5. Снимки с распределением атомов Ti (красные точки) и атомов Al (зеленые точки) в сечении СБС, соответствующие последовательным моментам времени продвижения волны горения

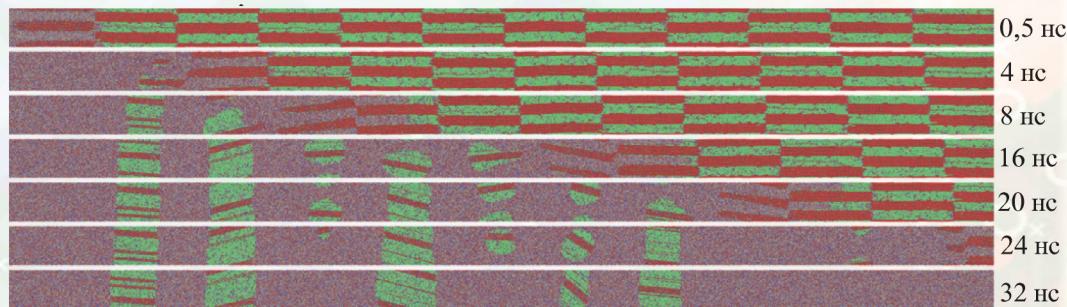


Рис. 6. Снимки с распределением различных типов элементарных ячеек в сечении СБС в последовательные моменты времени: зеленые точки – тип ГЦК-фес; синие точки – тип ОЦК-бес; красные точки – тип ГПУ-хер; желтые точки – тип ісо; белые точки – другие типы

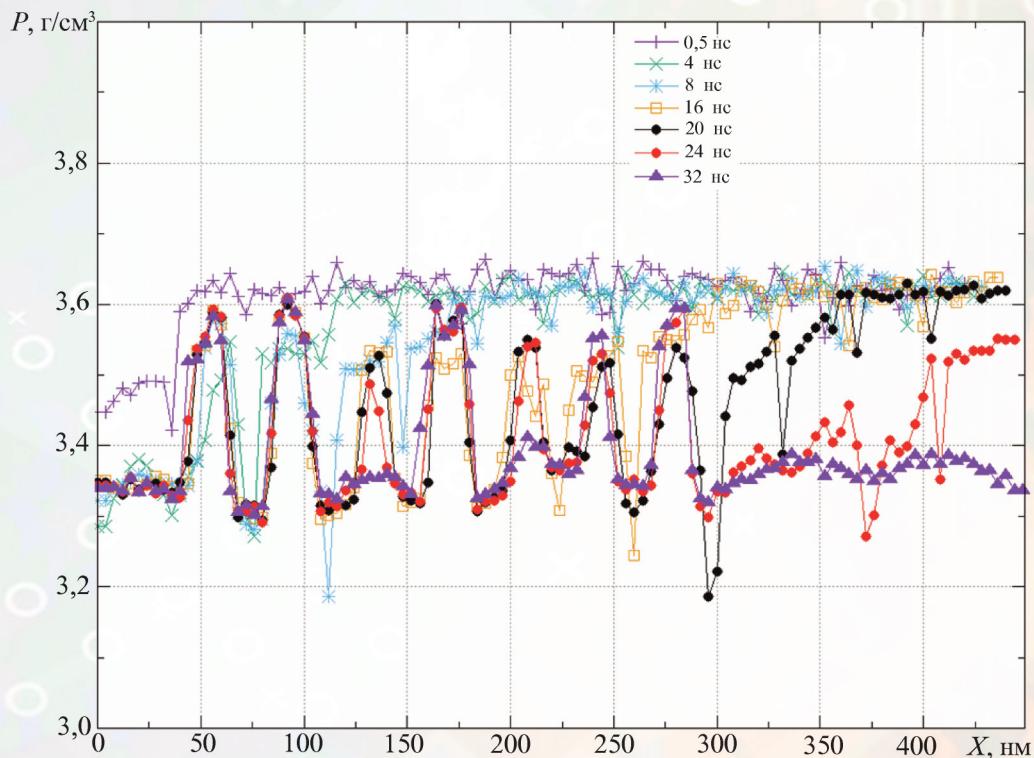
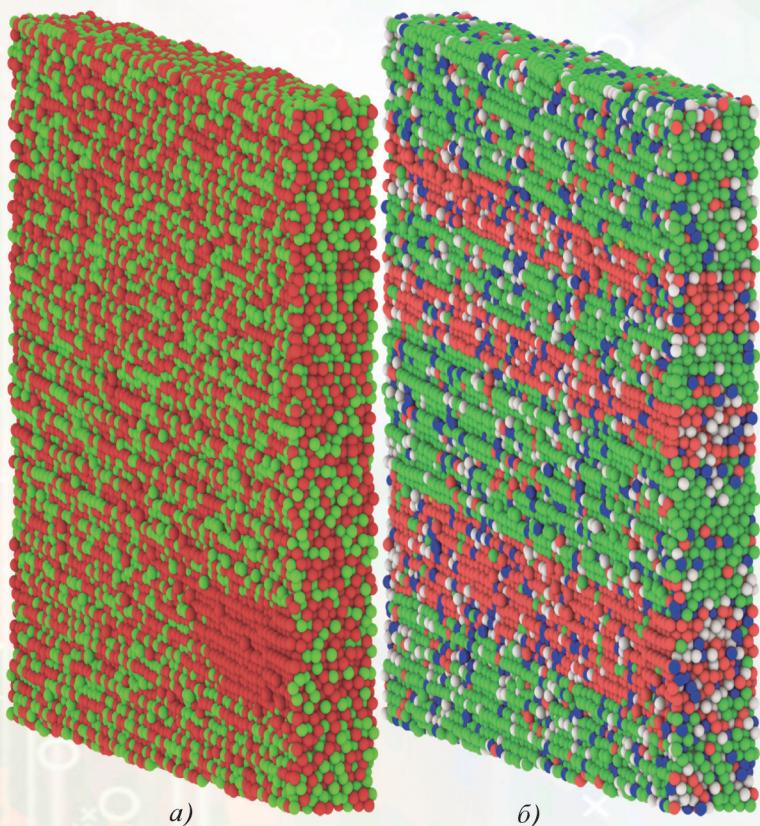


Рис. 7. Профили плотности вещества, соответствующие последовательности моментов времени при продвижении волны горения в СБС системы Ti-Al



Рисунки к статье  
В. И. Иордана, И. А. Шмакова  
«3D-ВИЗУАЛИЗАЦИЯ  
ГЕТЕРОФАЗНЫХ  
ИНТЕРМЕТАЛЛИДНЫХ  
СТРУКТУР НА ОСНОВЕ  
КОМПЬЮТЕРНОГО  
МОДЕЛИРОВАНИЯ СВС  
В НАНОРАЗМЕРНОЙ  
СЛОИСТО-БЛОЧНОЙ  
СТРУКТУРЕ Ti-Al»

Рис. 8. Соответствующие друг другу 3D-снимки гетерофазной структуры с объемными распределениями:

а – объемное распределение атомов Ti (красные шары) и атомов Al (зеленые шары);  
б – объемное распределение различных типов элементарных ячеек (ГЦК-fcc – зеленые шары; ОЦК-bcc – синие шары; ГПУ-hcp – красные шары; другой тип – белые шары)

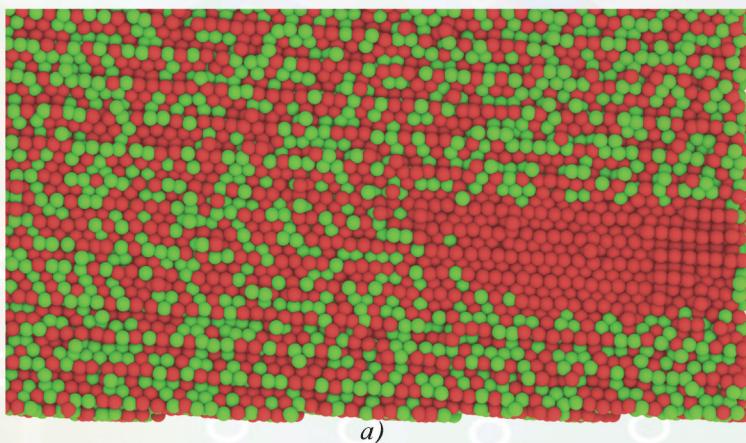


Рис. 9. Соответствующие друг другу 3D-снимки нижней половины гетерофазной структуры, отображенной на рис. 8:

а – объемное распределение атомов Ti (красные шары) и атомов Al (зеленые шары);  
б – объемное распределение различных типов элементарных ячеек (ГЦК-fcc – зеленые шары; ОЦК-bcc – синие шары; ГПУ-hcp – красные шары; другой тип – белые шары)

