

УДК 532.22+536.46

## СОЗДАНИЕ ПОКРЫТИЯ ИЗ ИНТЕРМЕТАЛЛИДА ТИТАН — АЛЮМИНИЙ НА ПЛАСТИНАХ ИЗ ТИТАНА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА ХОЛОДНОГО ГАЗОДИНАМИЧЕСКОГО НАПЫЛЕНИЯ

С. П. Киселев<sup>\*,\*\*</sup>, Н. С. Ряшин<sup>\*</sup>, Е. А. Максимовский<sup>\*\*\*</sup>,  
В. П. Киселев<sup>\*</sup>, С. В. Клинков<sup>\*</sup>, В. Ф. Косарев<sup>\*</sup>,  
А. А. Филиппов<sup>\*</sup>, В. С. Шикалов<sup>\*</sup>

\* Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН,  
630090 Новосибирск, Россия

\*\* Новосибирский государственный технический университет, 630092 Новосибирск, Россия

\*\*\* Институт неорганической химии им. А. В. Николаева СО РАН,  
630090 Новосибирск, Россия

E-mails: kiselev@itam.nsc.ru, ryashin@itam.nsc.ru, eugene@niic.nsc.ru,  
kiselevvp@itam.nsc.ru, klyiii@yandex.ru, vkos@itam.nsc.ru, filippov@itam.nsc.ru,  
v.shikalov@gmail.com

Представлены результаты экспериментального и численного моделирования процесса создания покрытий из интерметаллида титан — алюминий с помощью аддитивного метода. Показано, что процесс создания интерметаллида лимитируется скоростью растворения и диффузией титана в расплаве алюминия. Предложенный метод может быть использован для упрочнения поверхностей пластин из титана при их эксплуатации при высоких температурах и давлении.

Ключевые слова: интерметаллид титан — алюминий, уравнение диффузии, метод молекулярной динамики, расплав алюминия, метод холодного газодинамического напыления, радиальное сопло, сверхзвуковое течение.

DOI: 10.15372/PMTF20180619

**Введение.** Холодное газодинамическое напыление (ХГН) — один из перспективных методов нанесения порошковых покрытий и создания трехмерных объектов. Микрочастицы размером  $10 \div 150$  мкм подаются в сверхзвуковой поток газа, в котором ускоряются до скоростей  $500 \div 1200$  м/с. При столкновении с преградой микрочастицы закрепляются на ней, в результате на преграде формируется низкопористое покрытие [1]. Метод ХГН позволяет наносить покрытия из металлов, сплавов и смесей металлов с керамикой. В настоящее время данная технология применяется при производстве новых материалов, создании защитных, электро- и теплопроводящих покрытий и т. д. В работах [2, 3] метод ХГН с последующим отжигом использовался для получения интерметаллидов Ni–Al и Fe–Al соответственно.

Интерметаллиды Ti–Al обладают рядом востребованных современной промышленностью свойств, таких как высокая твердость, жаропрочность и коррозионная стойкость. Использование аддитивного метода, включающего нанесение методом ХГН покрытия из микрочастиц алюминия и последующий нагрев до температуры, превышающей температуру плавления алюминия, дает возможность упростить технологию производства пластин из интерметаллидов, так как позволяет наносить покрытия на пластины большой площади.

В настоящей работе рассматривается влияние горячего (при температуре  $830 \div 1620$  К) прессования на микроструктуру, фазовый состав и механические свойства пластин интерметаллида Ti–Al.

**1. Постановка задачи экспериментального и численного моделирования создания интерметаллида Ti–Al.** Ниже приводятся методики экспериментов и численных расчетов.

1.1. *Методика эксперимента.* Напыление алюминиевого покрытия на пластину из титана осуществлялось на ХГН-стенде Института теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН (ИТПМ), оснащенном шестиосевым роботом KUKA KR 16-2 (KUKA Roboter GmbH, Германия) для управления соплом. Ускорение микрочастиц алюминия проводилось в коническом сопле с диаметром критического сечения  $d_{cr} = 2,8$  мм и диаметром выходного сечения  $d_{ex} = 6,5$  мм. Давление торможения равно 3 МПа, температура торможения — 470 К, скорость и шаг сканирования — 25 мм/с и 3 мм соответственно, расстояние до преграды — 30 мм. При напылении использовался порошок алюминия марки ASD-1 Al99.2, средний размер микрочастиц составлял  $d \approx 27$  мкм. Размеры микрочастиц порошка контролировались с помощью анализатора LS 13 320 (Beckman Coulter, США). Напыление проводилось на пластину из титанового сплава марки OT4-1 (95 % Ti — 2 % Al — 1,4 % Mn) толщиной 0,95 мм, длиной и шириной 22 мм.

Полученные композитные покрытия подвергались одноосному горячему прессованию в защитной атмосфере аргона с помощью компактного лабораторного пресса Института автоматизации и электротехники СО РАН в графитовой пресс-форме. Квадратный образец с размерами  $10 \times 10$  мм и толщиной приблизительно 2 мм помещался между двумя круглыми пуансонами, проложенными графитовой фольгой. Омический нагрев пресс-формы осуществлялся со скоростью 50 К/мин. Время выдержки при постоянных значениях температуры и давления составило 90 мин, температура выдержки варьировалась ( $T_a = 830, 930, 1030, 1130, 1270, 1620$  К). Среднее давление прессования равно 5 МПа и в процессе нагрева отклонялось на величину порядка  $\pm 1$  МПа. Колебания давления обусловлены плавлением, растеканием алюминиевого покрытия по поверхности титановой пластины и синтезом интерметаллида.

Анализ микроструктуры напыленных покрытий и синтезированных материалов проводился с использованием оптического микроскопа Axio Scope.A1, программного пакета Zen Core (Carl Zeiss, Германия) и панорамирования (сшивки) по всей длине пластин. Элементный состав материалов исследовался с помощью сканирующего электронного микроскопа SEM EVO MA 15 (Carl Zeiss, Германия), оснащенного детектором EDS detector X-Max 80 mm<sup>2</sup> (Oxford instruments, Великобритания). Подготовка образцов для анализа проводилась путем ионного травления с помощью прибора Iion+ (Gatan, США). Анализ спектра дифракции обратнорассеянных электронов осуществлялся с помощью электронного микроскопа РЭМ, оснащенного детектором обратнорассеянных электронов и программным пакетом. Фазовый состав анализировался с использованием метода рентгенодифрактометрии с помощью дифрактометра D8 Advance diffractometer (Bruker, США). Для увеличения эффективной площади съемки с помощью алмазного тонкого абразива выполнялся косой срез кромки образца. Микротвердость полученных образцов исследовалась с

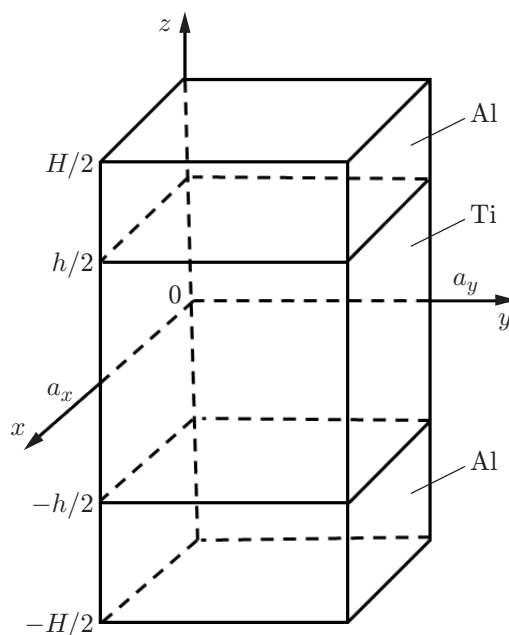


Рис. 1. Область моделирования в задаче синтеза интерметаллида Ti–Al

помощью метода Виккерса на поперечных шлифах покрытий с помощью универсальной машины для механических испытаний UMT-2M (Bruker, США). Измерения проводились эквидистантно от верхней до нижней границы образца вдоль линии, перпендикулярной плоскости пластины.

1.2. *Методика численных расчетов.* Кинетика синтеза интерметаллида Ti–Al при нагреве композита исследовалась с помощью метода молекулярной динамики. Движение атомов описывалось уравнениями Гамильтона, их взаимодействие — многочастичным EAM-потенциалом (embedded atom method) [4]. Численный расчет траекторий атомов выполнялся по явной схеме Верле с использованием пакета LAMMPS [5]. Заметим, что в работах [6, 7] моделирование кинетики синтеза интерметаллида Ti–Al проводилось при постоянном объеме. В отличие от работ [6, 7] в настоящей работе моделирование атомной системы Ti–Al выполнялось при постоянном среднем давлении  $\langle P \rangle = \text{const}$ , при этом использовались уравнения движения атомов в баростате, полученные в работе [8].

Моделировался синтез интерметаллида Ti–Al в нанокompозите, в начальный момент времени состоявшем из нанокристалла титана, расположенного между двумя нанокристаллами алюминия (рис. 1).

Нанокристалл титана представлял собой параллелепипед с размерами  $-h/2 < z < h/2$ , в узлах гексагональной плотноупакованной решетки которого располагались атомы Ti. Атомы Al размещались в двух параллелепипедах с размерами  $-H/2 < z < -h/2$  и  $h/2 < z < H/2$  в узлах гранецентрированной кубической решетки. Поперечные и продольные размеры параллелепипедов равны  $a_x$ ,  $a_y$  (см. рис. 1). Численные расчеты проводились для кристалла нанокompозита с размерами  $H = 160 \text{ \AA}$ ,  $h = 100 \text{ \AA}$ ,  $a_x = 34 \text{ \AA}$ ,  $a_y = 34 \text{ \AA}$ , состоящего из  $N_{\text{Ti}} = 6429$  атомов титана и  $N_{\text{Al}} = 4046$  атомов алюминия. В каждый момент времени рассчитывалась атомная конфигурация системы, включающая скорости и координаты атомов. По формулам, приведенным в работе [7], вычислялись температура  $T$ , давление  $P = -\sigma_{\alpha\alpha}/3$  ( $\sigma_{\alpha\alpha}$  — сумма диагональных компонент тензора напряжений). Для исследования кинетики реакции вычислялись зависимости потенциальной энергии атомов  $\langle U \rangle$  и концентрации атомов титана  $c = n_{\text{Ti}}/(n_{\text{Ti}} + n_{\text{Al}})$  от координаты  $z$  ( $n_{\text{Ti}}$ ,  $n_{\text{Al}}$  — счетная

концентрация атомов титана и алюминия). Для этого наноккомпозит разбивался на слои  $z_k = (k - 1)\Delta h - H/2$  толщиной  $\Delta h = 6 \text{ \AA}$ . Счетная концентрация атомов титана вычислялась по формуле  $n(z_k) = \Delta N / (\Delta h a_x a_y)$ , где  $\Delta N$  — число атомов в слое с координатами  $z_{k-1} < z < z_k$ . Потенциальная энергия атомов в слое вычислялась по формуле

$$\langle U \rangle(z_k) = \frac{1}{\Delta N} \sum_{i=1}^{\Delta N} U_i,$$

где  $U_i$  — потенциальная энергия  $i$ -го атома, вычисленная с помощью многочастичного ЕАМ-потенциала [4]. Средняя потенциальная энергия всей системы атомов  $\langle \tilde{U} \rangle$  определялась по такой же формуле, в которой осреднение выполнялось по полному числу атомов в системе  $\Delta N = N$ . В расчетах термодинамические параметры атомной системы (среднее давление  $\langle P \rangle$  и температура  $T$ ) соответствовали условиям эксперимента. Расчет синтеза интерметаллида из слоистого наноккомпозита Al–Ti–Al проводился в три этапа. Сначала наноккомпозит нагревался до заданной температуры, затем выдерживался при этой температуре до завершения процесса диффузии атомов Ti в расплаве Al, после чего проводилось охлаждение интерметаллида до комнатной температуры.

**2. Результаты эксперимента.** На рис. 2 приведены микрофотографии поперечного сечения пластин интерметаллида Ti–Al, полученных при различных температурах нагрева. Видно, что с увеличением температуры материал покрытия под давлением пуансонов прессы деформируется и перемещается к краям образца. После прессования при температуре  $T = 1270 \text{ К}$  пластина из титанового сплава полностью покрыта продуктами реакции и заключена в двойную капсулу из тонкого слоя светлого пористого материала и слоя более темного и плотного материала, толщина которого сравнима с толщиной исходного алюминиевого покрытия, полученного с помощью ХГН.

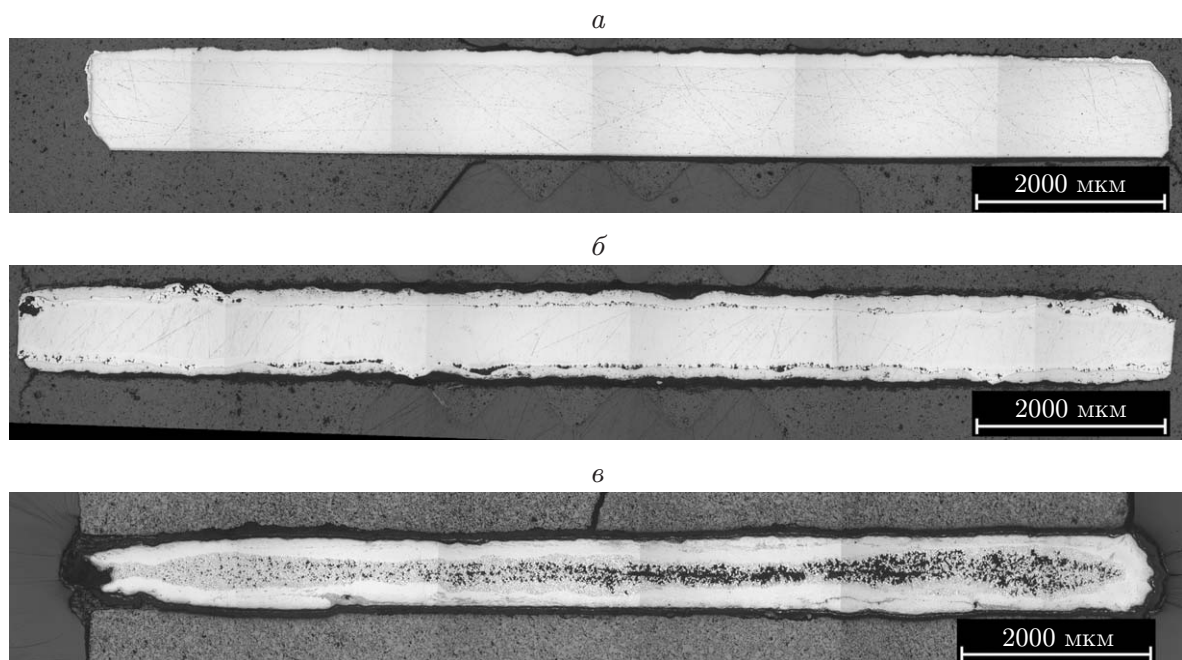


Рис. 2. Фотографии поперечных сечений образцов интерметаллида, синтезированных при различных температурах, полученные с помощью оптического микроскопа:

*a* —  $T = 930 \text{ К}$ , *б* —  $T = 1270 \text{ К}$ , *в* —  $T = 1620 \text{ К}$

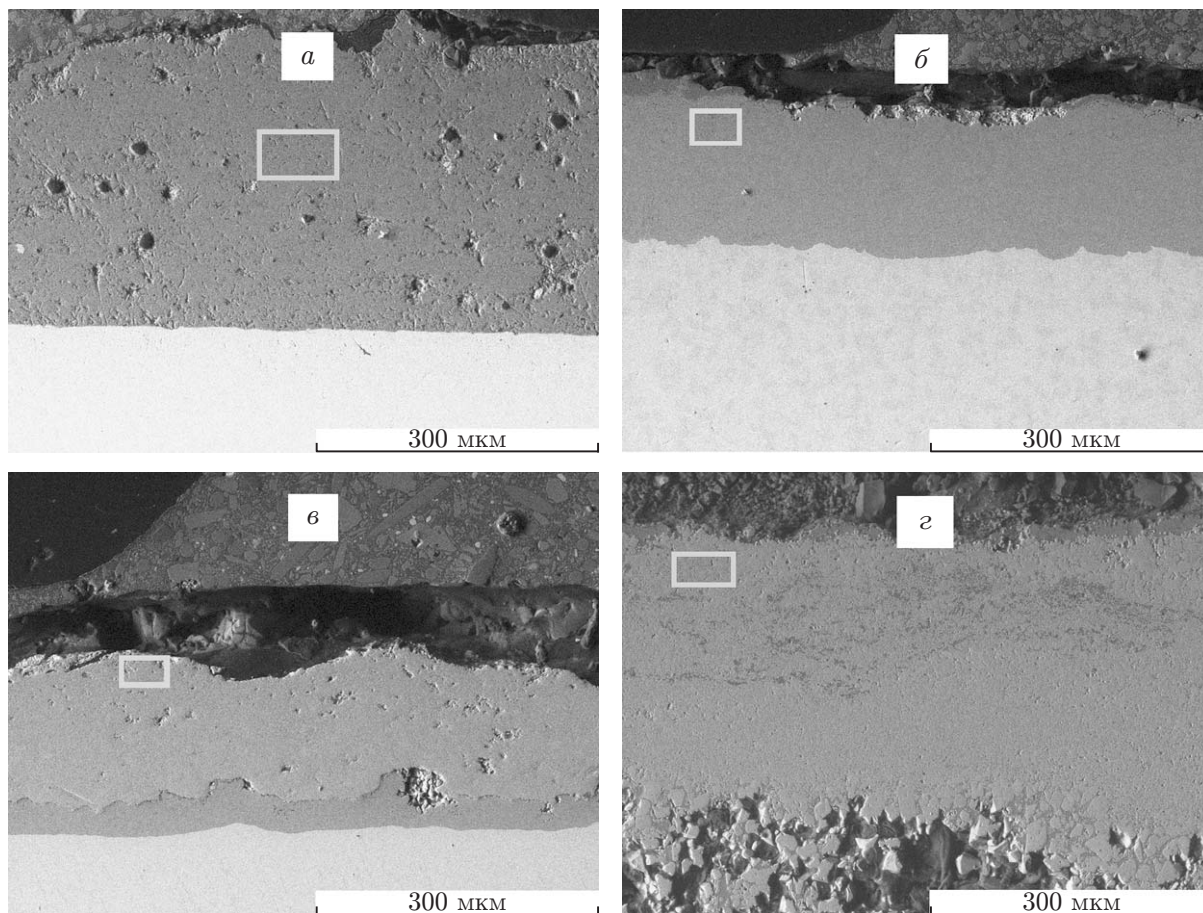


Рис. 3. Фотографии поперечных сечений образцов интерметаллида, синтезированных при различных температурах, полученные с помощью электронного микроскопа SEM EVO MA 15 с детектором EDS:

*a* —  $T = 830$  К, *б* —  $T = 930$  К, *в* —  $T = 1270$  К, *г* —  $T = 1620$  К

Термическая обработка при  $T = 1620$  К приводит к существенному изменению структуры слоистого композита и образованию крупных полостей в его центре, окруженных стенкой, имеющей сложную структуру.

На рис. 3 приведены фотографии поперечных сечений образцов, обработанных при различной температуре нагрева ( $T = 830 \div 1620$  К), полученные с помощью сканирующего электронного микроскопа. Светлые области внизу соответствуют подложке из титана, темные области сверху — различным модификациям интерметаллида  $Ti_n-Al_m$ , образовавшегося в результате реакции синтеза.

На рис. 3 показаны композиты  $Ti_n-Al_m$ , полученные при различных температурах. Методом электронной микроскопии определены атомные концентрации алюминия  $c_{Al}$  и титана  $c_{Ti}$  в областях, выделенных на рис. 3. На рис. 3, *a*  $c_{Al} = 97,81$  %,  $c_{Ti} = 2,19$  % при  $T = 830$  К; на рис. 3, *б*  $c_{Al} = 74,02$  %,  $c_{Ti} = 25,98$  % при  $T = 930$  К; на рис. 3, *в*  $c_{Al} = 21,002$  %,  $c_{Ti} = 79,00$  % при  $T = 1270$  К; на рис. 3, *г*  $c_{Al} = 19,04$  %,  $c_{Ti} = 80,96$  % при  $T = 1620$  К. Следовательно, при температуре, меньшей температуры плавления алюминия, в напыленном слое алюминия (темная область на рис. 3, *a*) атомы титана практически отсутствуют. Малая (2 %) концентрация атомов титана обусловлена тем, что атомы титана могли попасть в область, занятую алюминием, при шлифовании поверхности. При температуре плавления алюминия  $T = 930$  К (см. рис. 2, *a*, 3, *б*) над поверхностью титана (светлая область)

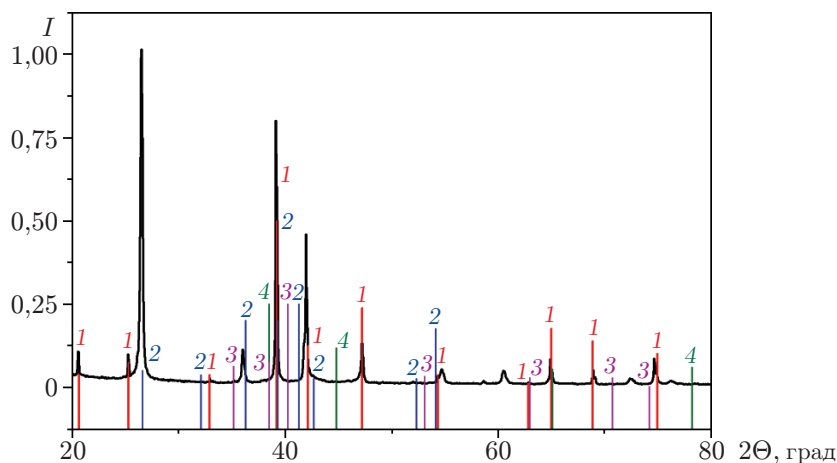


Рис. 4. Рентгеновская диффрактограмма слоистого композита, полученного при температуре  $T = 1270$  К:

1 —  $\text{Ti-Al}_3$ , 2 —  $\text{Ti}_3\text{-Al}$ , 3 —  $\text{Ti}$ , 4 —  $\text{Al}$

образовался слой поликристаллического интерметаллида  $\text{Ti-Al}_3$ . Размеры кристаллитов интерметаллида составляют  $2 \div 20$  мкм. При температуре  $T = 1270$  К (см. рис. 2, б, 3, в) образуется слоистый композит, в котором область, занятая титаном, окружена двумя слоями поликристаллических интерметаллидов  $\text{Ti-Al}_3$  и  $\text{Ti}_3\text{-Al}$ . Непосредственно с поверхностью титана граничит слой интерметаллида  $\text{Ti-Al}_3$ . На внешней границе образца находится интерметаллид  $\text{Ti}_3\text{-Al}$ , граничащий с интерметаллидом  $\text{Ti-Al}_3$ .

На рис. 4 приведена зависимость относительной интенсивности рентгеновского излучения  $I$  от угла  $\Theta$  для рассматриваемого композита, полученного при температуре  $T = 1270$  К, также подтверждающая наличие в нем интерметаллидов  $\text{Ti-Al}_3$  и  $\text{Ti}_3\text{-Al}$ . При температуре  $T = 1620$  К (см. рис. 2, в, 3, г) в центральной области композита образовался пористый материал, состоящий из микрокристаллов различных интерметаллидов и усадочных пор, возникших при охлаждении и кристаллизации интерметаллида. Микрокристаллы образованы интерметаллидами, которые находятся в равновесных и квазиравновесных фазах:  $\text{Ti}_3\text{-Al}$ ,  $\text{Ti}_3\text{-Al}_5$ ,  $\text{Ti}_2\text{-Al}_5$ ,  $\text{Ti-Al}_2$ ,  $\text{Ti-Al}_3$ . Область пористого интерметаллида окружена сплошным интерметаллидом, состоящим из слоев  $\text{Ti}_3\text{-Al}$  и  $\text{Ti}_2\text{-Al}$ .

Методом микроиндентирования измерялась микротвердость полученных композитов. На рис. 5 показаны зависимости микротвердости композитов от поперечной координаты, измеренной вдоль нормали к плоскости подложки. Видно, что микротвердость в зоне образования интерметаллида значительно превышает микротвердость титана и алюминиевого покрытия и достигает значения 14,5 ГПа.

**3. Результаты численного моделирования.** На рис. 6 показаны вычисленные атомные конфигурации в характерные моменты времени: после быстрого нагрева нанокompозита до температуры  $T = 1270$  К; по окончании реакции синтеза интерметаллида при температуре  $T = 1270$  К; после охлаждения нанокompозита до температуры  $T = 300$  К.

На рис. 7, а приведена зависимость температуры нанокompозита от времени  $t$ . Нагрев нанокompозита до температуры  $T = 1270$  К заканчивается в момент времени  $t_1 = 0,1$  нс. Затем до момента времени  $t_2 = 2,58$  нс температура остается постоянной. Охлаждение нанокompозита проводится в течение  $\Delta t = 0,53$  нс и заканчивается в момент  $t_3 = 3,11$  нс.

На рис. 7, б показана зависимость средней потенциальной энергии атомов в нанокompозите от времени  $\langle \tilde{U} \rangle(t)$ . Видно, что при нагреве нанокompозита средняя потенциальная энергия атомов увеличивается от значения  $\langle \tilde{U} \rangle(0) = -4,23$  эВ/атом до значения

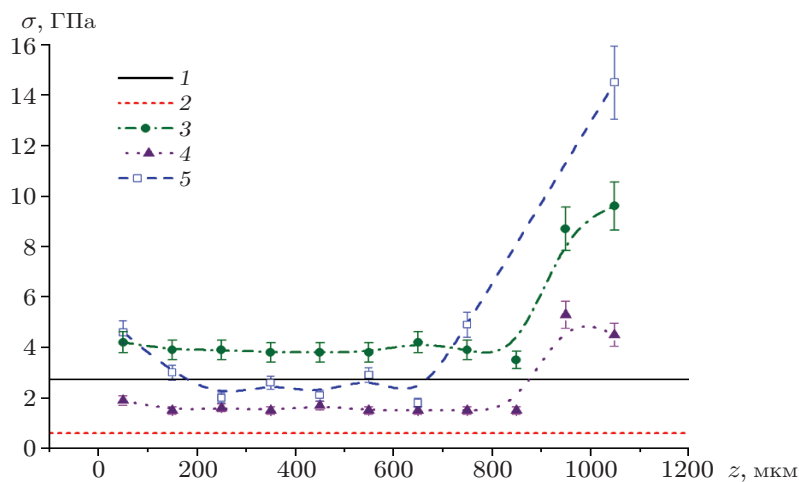


Рис. 5. Зависимости микротвердости образцов из Ti (1), Al (2) и интерметаллидов Ti-Al, полученных при различных температурах (3-5), от поперечной координаты:

3 —  $T = 930$  К, 4 —  $T = 1030$  К, 5 —  $T = 1270$  К

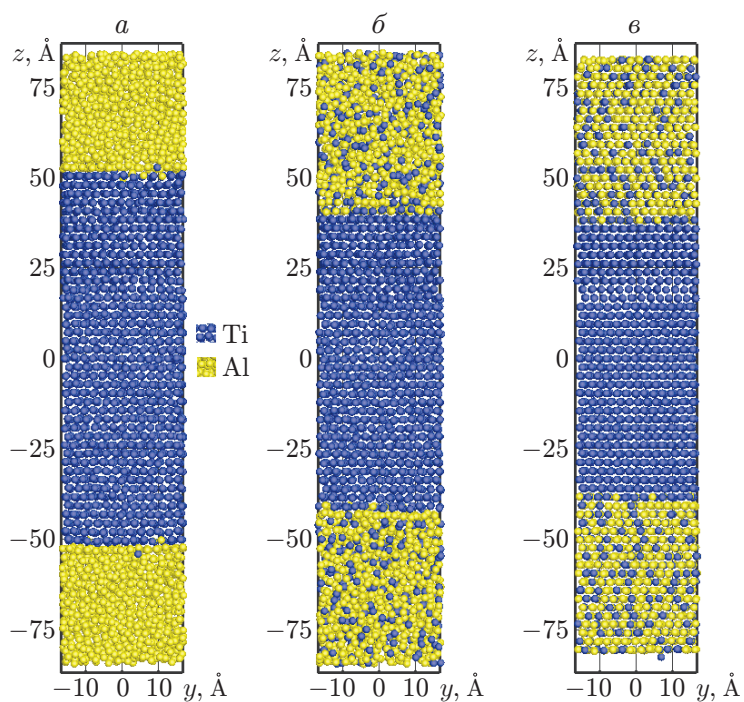


Рис. 6. Атомные конфигурации Al и Ti в различные моменты времени:

$a$  —  $t_1 = 0,10$  нс,  $б$  —  $t_2 = 2,58$  нс,  $в$  —  $t_3 = 3,11$  нс

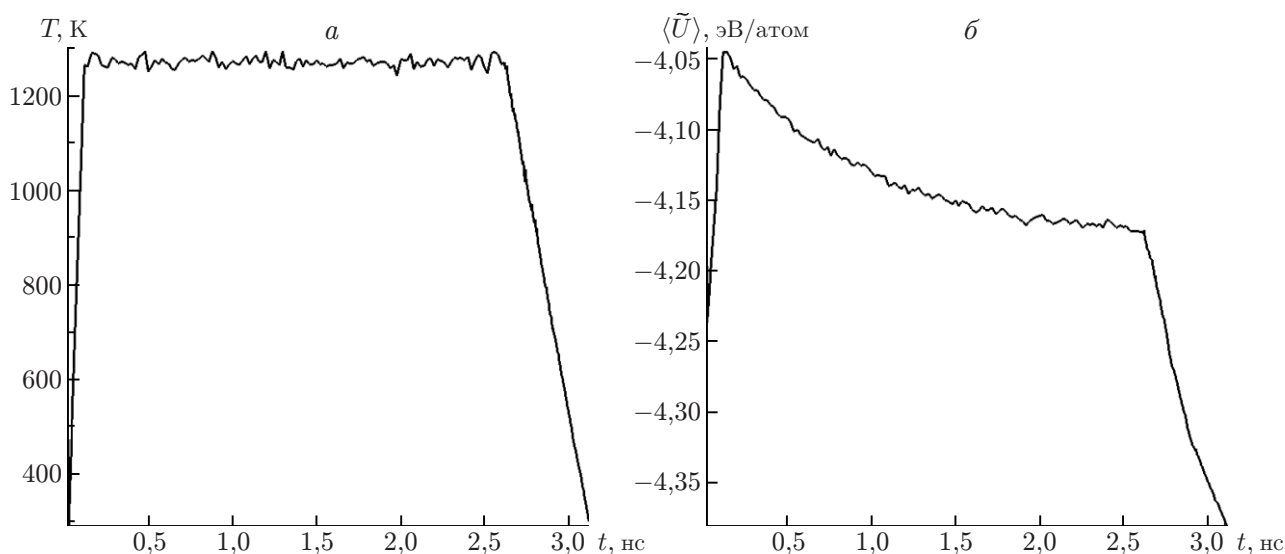


Рис. 7. Зависимости температуры  $T$  (а) и средней внутренней энергии  $\langle \tilde{U} \rangle$  (б) от времени при температуре  $T = 1270$  К

$\langle \tilde{U} \rangle(t_1) = -4,05$  эВ/атом. После окончания нагрева алюминий находится в расплавленном состоянии. Нанокристалл титана, окруженный расплавом алюминия, на протяжении всего времени реакции находится в кристаллическом состоянии (см. рис. 6,б). На рис. 6,б видно, что при температуре  $T = 1270$  К кристалл титана растворяется в расплаве алюминия и происходит диффузия атомов титана в расплав алюминия. Растворенные атомы титана взаимодействуют с атомами алюминия в расплаве, в результате чего образуется интерметаллид Ti–Al<sub>3</sub>. Во время реакции, при которой образуется интерметаллид, потенциальная энергия атомов в расплаве уменьшается (см. рис. 7,б). По мере приближения значения концентрации титана к равновесному распределению скорость изменения потенциальной энергии стремится к нулю, что соответствует завершению реакции. После завершения реакции средняя потенциальная энергия атомов стремится к постоянному значению  $\langle \tilde{U} \rangle(t_2) = -4,17$  эВ/атом. Следовательно, синтез интерметаллида в данной системе лимитируется скоростью растворения и диффузией атомов титана в расплаве алюминия.

На рис. 8,а показана зависимость концентрации  $c$  атомов титана от поперечной координаты  $z$  в различные моменты времени. Линиями 1, 5 показаны распределения концентрации титана в нанокompозите до начала нагрева ( $t_0 = 0,02$  нс) и после охлаждения ( $t_3 = 3,11$  нс). Линией 4 на рис. 8,а показано распределение концентрации перед началом охлаждения ( $t_2 = 2,58$  нс). Видно, что после нагрева происходит растворение титана и диффузия атомов титана в расплав алюминия. Постепенно скорость растворения уменьшается и стремится к нулю в момент  $t_2 = 2,58$  нс. В расплаве алюминия устанавливается равновесная концентрация атомов титана  $c_* \approx 0,25$ , что соответствует расплавленному интерметаллиду Ti–Al<sub>3</sub>. При охлаждении происходит кристаллизация нанокompозита (см. рис. 6,в), однако распределение концентрации титана  $c(z)$  в процессе охлаждения не меняется (см. рис. 8,а). В результате после охлаждения образуется композит, состоящий из нанокристалла титана, который находится между двумя нанокристаллами интерметаллида Ti–Al<sub>3</sub> (см. рис. 6,в).

На рис. 8,б показана зависимость потенциальной энергии атомов  $\langle U \rangle$  от поперечной координаты  $z$  в различные моменты времени. Линиями 1, 5 показаны распределения  $\langle U \rangle(z)$  в нанокompозите перед нагревом ( $t_0 = 0,02$  нс) и после охлаждения ( $t_3 = 3,11$  нс), линией 4 — распределение  $\langle U \rangle(z)$  перед началом охлаждения ( $t_2 = 2,58$  нс). Видно, что после



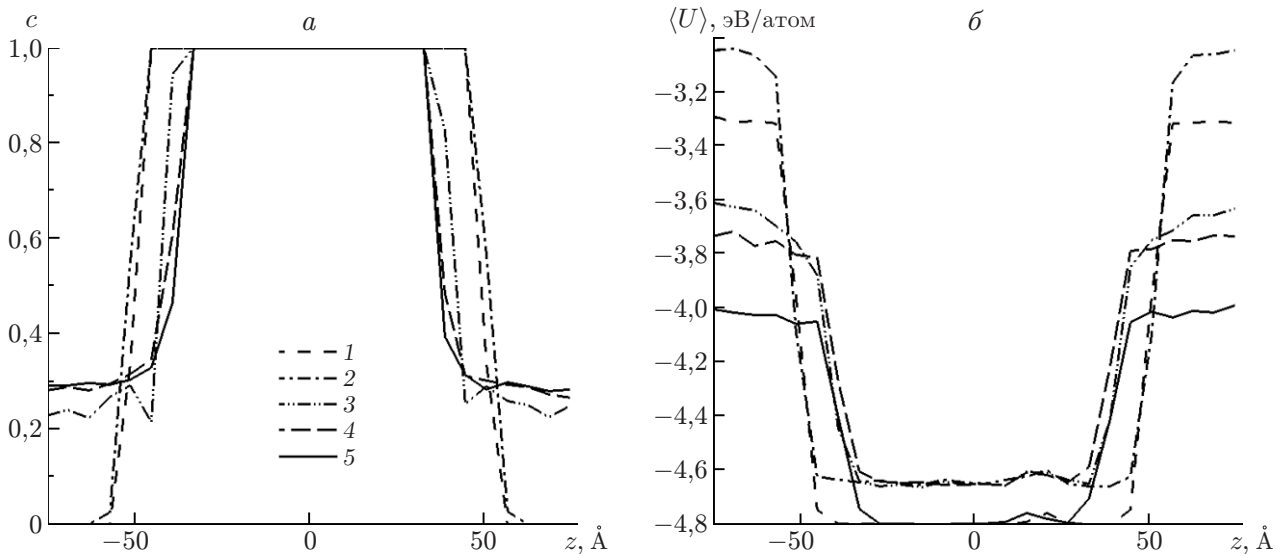


Рис. 8. Зависимости концентрации  $c$  (а) и внутренней энергии  $\langle U \rangle$  (б) от координаты  $z$  при  $T = 1270$  К в различные моменты времени  $t$ :  
 1 —  $t = 0,02$  нс, 2 —  $t = 0,12$  нс, 3 —  $t = 0,58$  нс, 4 —  $t = 2,58$  нс, 5 —  $t = 3,11$  нс

охлаждения средняя потенциальная энергия атомов в нанокристалле титана, находящемся в области  $-45 \text{ \AA} < z < 45 \text{ \AA}$ , равна начальной потенциальной энергии:  $\langle U \rangle(t_3) = \langle U \rangle(t_0)$ . В двух других областях ( $-75 \text{ \AA} < z < -45 \text{ \AA}$ ,  $45 \text{ \AA} < z < 75 \text{ \AA}$ ) образовался интерметаллид Ti-Al<sub>3</sub>, в котором средняя потенциальная энергия атомов уменьшилась на величину  $\Delta \langle U \rangle = \langle U \rangle(t_3) - \langle U \rangle(t_0) \approx -0,7$  эВ/атом.

Следует отметить, что величина уменьшения потенциальной энергии атомов в нанокристалле титана и интерметаллиде при охлаждении нанокompозита различна:  $\Delta \langle U_{\text{Ti}} \rangle = \langle U_{\text{Ti}} \rangle(t_3) - \langle U_{\text{Ti}} \rangle(t_2) \approx -0,15$  эВ/атом,  $\Delta \langle U_{\text{Ti-Al}_3} \rangle = \langle U_{\text{Ti-Al}_3} \rangle(t_3) - \langle U_{\text{Ti-Al}_3} \rangle(t_2) \approx -0,25$  эВ/атом. Возможно, это различие обусловлено дополнительным уменьшением потенциальной энергии на величину  $\Delta \langle U_c \rangle \approx -0,1$  эВ/атом вследствие кристаллизации в интерметаллиде Ti-Al<sub>3</sub> при охлаждении. Для проверки данного предположения выполнен расчет для случая более быстрого охлаждения нанокompозита (время охлаждения  $\Delta t = 0,33$  нс, остальные параметры расчета не менялись). На рис. 9 приведены атомная конфигурация нанокompозита после охлаждения в течение времени  $\Delta t = 0,33$  нс и зависимость потенциальной энергии атомов от поперечной координаты  $\langle U \rangle(z)$  в различные моменты времени.

На рис. 9,а видно, что кристаллизация произошла в части области, на расстоянии  $\Delta z = 20 \text{ \AA}$  от границы нанокристалла титана, в остальной части области интерметаллид находится в аморфном состоянии. Как показано в [6], волна кристаллизации возникает вблизи зародыша кристаллизации, роль которого в данном случае выполнял нанокристалл титана. За время  $\Delta t = 0,33$  нс волна кристаллизации распространилась на расстояние  $\Delta z = 20 \text{ \AA}$  и остановилась в сечениях  $z_{1,2} = \pm 60 \text{ \AA}$ . На рис. 9,б видно, что после завершения охлаждения ( $t_3 = 2,91$  нс) в сечениях  $z_{1,2} = \pm 60 \text{ \AA}$  потенциальная энергия испытывает скачок  $\Delta \langle U_c \rangle \approx -0,1$  эВ/атом, обусловленный уменьшением потенциальной энергии атомов при кристаллизации.

Температура нанокompозита оказывает существенное влияние на процесс синтеза интерметаллида. Для оценки влияния температуры выполнены расчеты синтеза интерметаллида Ti-Al при температуре  $T = 1500$  К, близкой к температуре плавления кристалла титана. На рис. 10 приведены результаты численного моделирования процесса образования

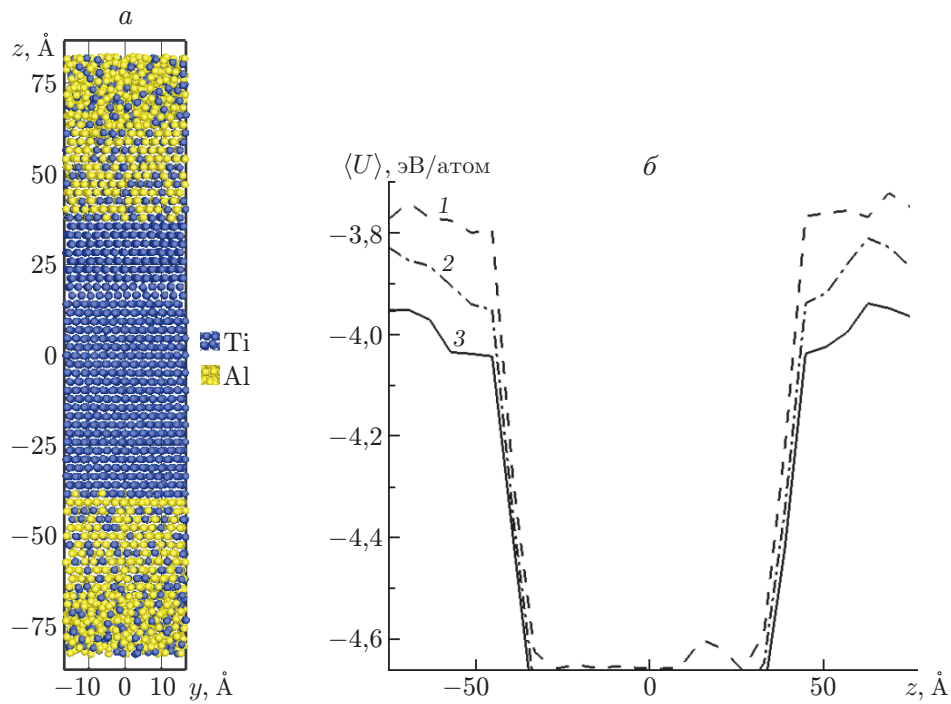


Рис. 9. Атомная конфигурация нанокompозита Ti-Al<sub>3</sub>, синтезированного при температуре  $T = 1270$  К, после охлаждения в момент времени  $t_3 = 2,91$  нс (а) и зависимость потенциальной энергии атомов  $\langle U \rangle$  от координаты  $z$  в различные моменты времени  $t$  (б):  
 1 —  $t = 2,62$  нс, 2 —  $t = 2,73$  нс, 3 —  $t = 2,91$  нс

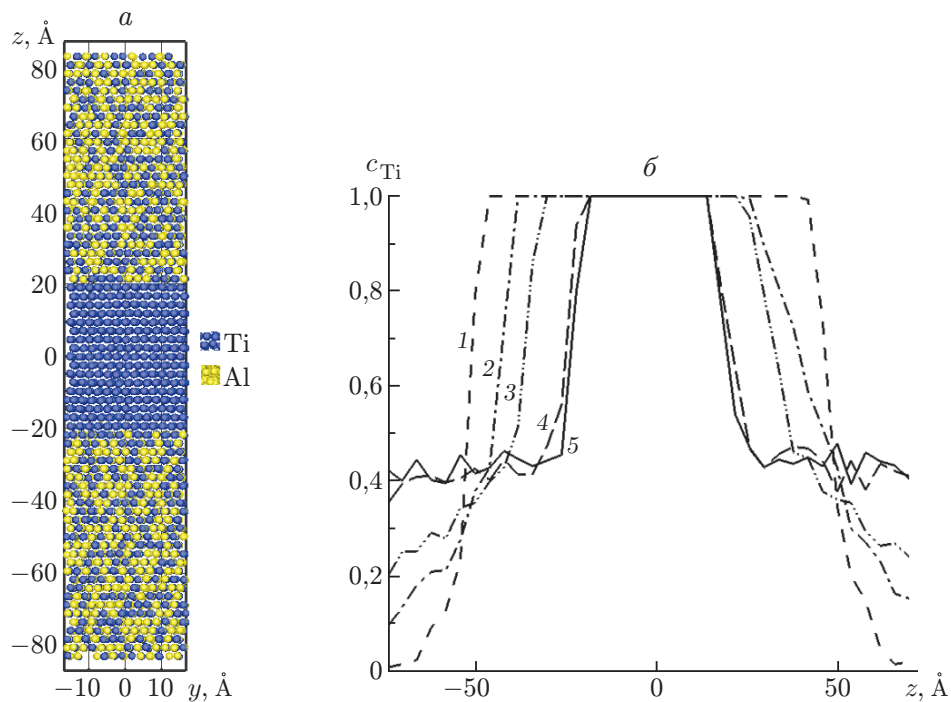


Рис. 10. Атомная конфигурация нанокompозита Al-Ti-Al, синтезированного при температуре  $T = 1500$  К, в момент времени  $t_3 = 2,8$  нс (а) и зависимость концентрации  $c_{Ti}$  от координаты  $z$  в различные моменты времени  $t$  (б):  
 1 —  $t = 0,3$  нс, 2 —  $t = 0,44$  нс, 3 —  $t = 0,64$  нс, 4 —  $t = 1,84$  нс, 5 —  $t = 2,24$  нс

интерметаллидов Ti–Al при температуре  $T = 1500$  К и среднем давлении  $\langle P \rangle = 5$  МПа. Сравнение рис. 6–8, 10 показывает, что в этом случае процесс образования интерметаллида Ti–Al происходил качественно так же, как при температуре  $T = 1270$  К. Основное отличие состоит в том, что при  $T = 1500$  К происходит более интенсивное растворение титана в алюминии. Это приводит к увеличению равновесной концентрации титана в расплаве до значения  $c_* \approx 0,42$  (см. рис. 10, б). В результате синтеза в расплаве образуется интерметаллид, атомная структура которого близка к структуре в фазе Ti–Al.

**Заключение.** В работе предложен аддитивный метод получения интерметаллида типа Ti–Al, включающий два этапа: нанесение на пластину из титана методом холодного газодинамического напыления покрытия из микрочастиц алюминия и нагрев этого слоистого композита в печи при температуре, превышающей температуру плавления алюминия. На втором этапе происходит синтез интерметаллида, в результате которого образуется слоистый композит, состоящий из слоев различных фаз интерметаллидов типа Ti<sub>3</sub>–Al, Ti–Al<sub>3</sub>, Ti–Al. Показано, что структура и фазовый состав слоев интерметаллида зависят от температуры, при которой происходит синтез интерметаллида. Анализ результатов расчетов позволяет описать кинетику образования интерметаллида типа Ti–Al. Показано, что на процесс образования интерметаллида оказывают влияние скорость растворения титана в алюминии и диффузия атомов титана в расплаве алюминия. Результаты проведенных исследований могут быть использованы при разработке технологии получения покрытий из интерметаллидов типа Ti–Al с использованием метода холодного газодинамического напыления.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. **Papyrin A.** Cold spray technology / A. Papyrin, V. Kosarev, S. Klinkov, A. Alkhimov, V. Fomin. Amsterdam: Elsevier Sci., 2007.
2. **Lee H. Y., Jung S. H., Lee S. Y., Ko K. H.** Alloying of cold-spray Al–Ni composite coating by post-annealing // Appl. Surf. Sci. 2007. V. 253. P. 3496–3502.
3. **Wang H.-T., Li C.-J., Yang G.-J., Li C.-X.** Cold spraying of Fe/Al powder mixture: Coating characteristics and influence of heat treatment on the phase structure // Appl. Surface Sci. 2008. V. 255. P. 2538–2544.
4. **Zope R. R., Mishin Y.** Interatomic potentials for atomistic simulations of the Ti–Al system // Phys. Rev. B. 2003. V. 68. P. 024102-1–024102-14.
5. **Plimpton S. J.** Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // J. Comput. Phys. 1995. V. 117. P. 1–19.
6. **Киселев С. П.** Моделирование кристаллизации наночастицы Ti–Al методом молекулярной динамики // Докл. АН. 2016. Т. 466, № 4. С. 406–408.
7. **Kiselev S. P., Zhirov E. V.** Molecular-dynamics simulation of the synthesis of intermetallic Ti–Al // Intermetallics. 2014. V. 49. P. 106–114.
8. **Parinello M., Rahman A.** Polymorphic transitions in single crystal: A new molecular dynamics method // J. Appl. Phys. 1981. V. 52, N 12. P. 7182–7190.

*Поступила в редакцию 26/II 2018 г.*