

УДК 532.22+536.46

## ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСТВОРЕНИЯ ТИТАНА В РАСПЛАВЕ АЛЮМИНИЯ И СИНТЕЗА ИНТЕРМЕТАЛЛИДА

С. П. Киселев<sup>\*,\*\*</sup>, В. П. Киселев<sup>\*</sup>

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

<sup>\*\*</sup> Новосибирский государственный технический университет, 630092 Новосибирск, Россия  
E-mails: kiselev@itam.nsc.ru, kiselevvp@itam.nsc.ru

Представлены результаты численного моделирования методом молекулярной динамики процессов растворения титана в расплаве алюминия и синтеза интерметаллида при постоянных температуре и давлении. Показано, что при растворении титана в окрестности границы кристалл титана — раствор алюминия образуется интерметаллид  $TiAl_3$ . На основе теории слабых растворов построена математическая модель растворения титана в расплаве алюминия. Найдены зависимости коэффициента диффузии, равновесной концентрации титана и скорости растворения от температуры.

Ключевые слова: интерметаллид титан — алюминий, уравнение диффузии, метод молекулярной динамики, расплав алюминия, кристалл титана.

DOI: 10.15372/PMTF20170516

**Введение.** В последнее время в авиационной промышленности широко применяются различные интерметаллиды, в частности  $Ti-Al$ . Интерметаллиды  $Ti-Al$  являются жаропрочными материалами с низкой плотностью, поэтому используются при изготовлении лопаток турбин авиационных двигателей. Разработаны различные методы синтеза интерметаллида  $Ti-Al$  [1–9], включающие создание композита  $Ti-Al$ , его нагрев до высокой температуры и охлаждение. При нагреве происходят взаимная диффузия компонентов  $Ti$  и  $Al$  и синтез интерметаллида  $Ti-Al$ . Если температура нагрева композита меньше температуры плавления алюминия  $T_{Al}^m = 931$  К, то диффузия и реакция синтеза происходят в твердой фазе [1, 2]. Если температура нагрева больше температуры плавления алюминия ( $T > T_{Al}^m$ ), то кристаллический  $Ti$  растворяется в расплаве  $Al$  [3–9] и реакция образования интерметаллида  $Ti-Al$  происходит в жидкой фазе. При охлаждении расплава наблюдается кристаллизация интерметаллида  $Ti-Al$ . Диффузия компонентов является лимитирующим процессом при образовании интерметаллида. Коэффициент диффузии титана в расплаве в случае  $T > T_{Al}^m$  на три-четыре порядка больше коэффициента диффузии титана в твердой фазе алюминия в случае  $T < T_{Al}^m$ . Однако возникновение остаточных напряжений и растрескивание при кристаллизации интерметаллида из расплава ограничивают область применения высокотемпературного метода. Несмотря на то что имеется большое число работ, посвященных исследованию интерметаллидов, механизм их образования изучен недостаточно. Ниже представлены результаты расчета методом молекулярной ди-

намики процессов образования интерметаллида  $\text{TiAl}_3$  в расплаве и его затвердевания при охлаждении. Предложена математическая модель процессов растворения и диффузии титана в расплаве алюминия.

**1. Постановка задачи.** Рассмотрим задачу о растворении кристалла  $\text{Ti}$  в расплаве  $\text{Al}$  и синтезе интерметаллида  $\text{Ti-Al}$  при постоянных давлении и температуре. Численное моделирование на атомном уровне выполняется методом молекулярной динамики (МД) в постановке, аналогичной использованной в [10, 11]. В каждый момент времени по рассчитанным координатам и скоростям атомов находятся распределения концентрации атомов  $\text{Ti}$  в расплаве  $\text{Al}$   $c_{\text{МД}}(z, t)$ . Равновесная концентрация  $c'_*$  и характерная скорость растворения  $v_0$  определяются на основе этих распределений. Кроме того, решается уравнение диффузии, из которого вычисляется концентрация  $\text{Ti}$   $c'(z, t)$ . Коэффициент диффузии  $D$  в уравнении диффузии подбирается таким образом, чтобы распределение  $c'(z, t)$  являлось аппроксимацией распределения  $c_{\text{МД}}(z, t)$ , полученного с использованием метода МД.

**2. Метод молекулярной динамики.** В начальный момент времени атомы  $\text{Ti}$  и  $\text{Al}$  размещались в параллелепипеде высотой  $H$  с квадратным основанием, длина стороны которого равна  $a$  (рис. 1). Атомы  $\text{Ti}$  находились в узлах гексагональной плотноупакованной решетки в нижней части параллелепипеда  $-H/2 < z < -\varepsilon$ ,  $0 < x < a$ ,  $0 < y < a$ . Атомы  $\text{Al}$  находились в узлах гранецентрированной кубической решетки в верхней части параллелепипеда  $\varepsilon < z < H/2$ ,  $0 < x < a$ ,  $0 < y < a$ . Между областями, в которых находились атомы  $\text{Ti}$  и  $\text{Al}$ , имелся зазор размером  $2\varepsilon = 2 \text{ \AA} = 2 \cdot 10^{-10}$  м. В течение всего времени моделирования на нижней границе ( $z = -H/2$ ) были зафиксированы два слоя атомов  $\text{Ti}$  в узлах идеальной гексагональной плотноупакованной решетки, верхняя граница ( $z = H/2$ ) была свободной. На боковых границах ставились условия периодичности, моделирующие бесконечную в поперечном направлении пластину.

В расчетах высота параллелепипеда принималась равной  $H = 160 \text{ \AA}$ , длина стороны основания  $a = 30 \text{ \AA}$ . Взаимодействие атомов  $\text{Ti}$  и  $\text{Al}$  описывается многочастичным ЕАМ-потенциалом  $V_i(r_{ij})$  (ЕАМ — embedded atom method (метод погруженного атома)) [12]. Расчет атомной конфигурации проводился с помощью NVT-ансамбля [13] в пакете программ LAMMPS [14]. За время  $\Delta t_1$  система атомов  $\text{Ti}$  и  $\text{Al}$  нагревалась до температуры  $T$ , затем выдерживалась при постоянной температуре в течение времени  $\Delta t_2$ , после чего охлаждалась в течение времени  $\Delta t_3$  до комнатной температуры. Поскольку  $\Delta t_1 \ll \Delta t_2$ , до момента начала охлаждения процессы растворения и синтеза интерметаллида происходили при постоянной температуре. При охлаждении наблюдалась кристаллизация образовавшегося интерметаллида  $\text{Ti-Al}$ .

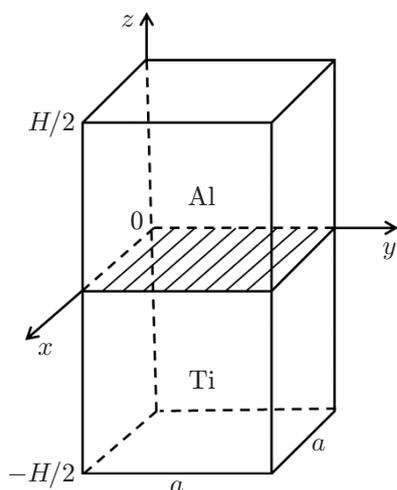


Рис. 1. Область моделирования методом МД в задаче синтеза интерметаллида  $\text{Ti-Al}$

Температура  $T$ , тензор напряжений  $\sigma_{\alpha\beta}$  и давление  $P = -\sigma_{\alpha\alpha}/3$  в параллелепипеде определялись в каждый момент времени  $t$  по рассчитанному распределению координат и скоростей атомов с использованием формул [15]

$$T = \frac{2}{3} \frac{E_k}{kN}, \quad E_k = \frac{1}{2} \sum_i m_i v_i^2, \quad \sigma_{\alpha\beta} = -\frac{1}{V_c} \left( \sum_{i \in V_c} m_i v_i'^\alpha v_i'^\beta + \frac{1}{2} \sum_{i \in V_c} \sum_{j \neq i} f_{ij}^\alpha x_{ij}^\beta \right),$$

$$f_{ij}^\alpha = - \left( \frac{\partial V_i(r_{ij})}{\partial r_{ij}} + \frac{\partial V_j(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \right) \frac{x_{ij}^\alpha}{r_{ij}},$$

где  $x_{ij}^\alpha = x_i^\alpha - x_j^\alpha$ ,  $f_{ij}^\alpha = -f_{ji}^\alpha$  — расстояние между атомами  $i$ ,  $j$  и сила их взаимодействия;  $x_i^\alpha$ ,  $x_j^\alpha$  — декартовы координаты атомов;  $\alpha = 1, 2, 3$ ;  $\beta = 1, 2, 3$ ;  $v_i'^\alpha$ ,  $v_i'^\beta$  — тепловые скорости атомов;  $m_i$  — массы атомов.

Для вычисления распределения концентрации  $c(z_j)$  атомов Ti в образце параллелепипед разбивался на слои толщиной  $h = 4 \text{ \AA}$  с координатами  $z_j = z_1 + h(j-1)$ , где  $z_1 = -74 \text{ \AA}$ . Концентрация атомов Ti вычислялась по формуле

$$c(z_j) = N_{\text{Ti}}(z_j) / (N_{\text{Ti}}(z_j) + N_{\text{Al}}(z_j)),$$

где  $N_{\text{Ti}}(z_j)$ ,  $N_{\text{Al}}(z_j)$  — число атомов Ti и Al, попадающих в слой с координатой  $z_j$ .

**3. Математическая модель растворения и диффузии титана в расплаве алюминия.** Рассмотрим процесс растворения и диффузии Ti в расплаве Al при постоянных давлении  $P$  и температуре  $T$ . Предположим, что постоянная температура в образце поддерживается за счет подвода тепла, которое расходуется на растворение титана в расплаве алюминия. Поток  $J$  растворенных атомов Ti из кристалла в расплав Al в единицу времени через единичную площадь пропорционален разности химических потенциалов атомов Ti в кристалле  $\mu_s$  и расплаве  $\mu'$  и определяется по формуле

$$J = b n_{\text{Ti}}^0 (\mu_s - \mu'), \quad (1)$$

где  $b$  — коэффициент пропорциональности;  $n_{\text{Ti}}^0$  — число атомов Ti в единице объема кристалла Ti. Безразмерная концентрация атомов титана в расплаве алюминия  $c' = n/n_{\text{Al}}^0$  ( $n$  — число атомов Ti в единице объема расплава;  $n_{\text{Al}}^0 = \text{const}$  — число атомов Al в единице объема расплава) определяется из уравнения диффузии

$$\frac{\partial c'}{\partial t} = D \Delta c', \quad (2)$$

где  $D$  — коэффициент диффузии. На границе поверхности кристалла задается поток атомов Ti в расплав. Полагая, что граница является плоской и ориентирована перпендикулярно оси  $z$ , запишем условие непрерывности потока атомов  $J = -D \partial n / \partial z$ , где  $J$  определяется по формуле (1). Переходя к переменной безразмерной концентрации, представим граничное условие в виде

$$J = -D n_{\text{Al}}^0 \frac{\partial c'}{\partial z}. \quad (3)$$

Полагая концентрацию Ti в расплаве малой:  $c' \ll 1$ , определим химический потенциал атомов Ti в расплаве с использованием теории слабых растворов [16] по формуле

$$\mu' = kT \ln c' + \varphi(P, T). \quad (4)$$

В состоянии равновесия поток через поверхность равен нулю:  $J = 0$ , поэтому из формул (1), (4) получаем

$$\mu_s = kT \ln c'_* + \varphi(P, T), \quad (5)$$

где  $c'_*$  — равновесная концентрация атомов Ti в расплаве. Подставляя формулы (4), (5) в (1), имеем

$$J = bn_{\text{Ti}}^0 kT \ln(c'_*/c'). \quad (6)$$

В случае  $(c'_* - c')/c'_* \ll 1$  формула (6) упрощается и принимает вид

$$J = v_0 n_{\text{Ti}}^0 (1 - c'/c'_*), \quad v_0 = bkT, \quad v_0 = J/n_{\text{Ti}}^0|_{c' \rightarrow 0}. \quad (7)$$

Из последнего уравнения (7) следует, что характерная скорость растворения  $v_0$  должна определяться при бесконечно малой концентрации титана  $v_0 = J/n_{\text{Ti}}^0|_{c' \rightarrow 0}$ . Концентрация атомов Ti в расплаве определяется из решения системы уравнений (2), (3), (7). Заметим, что полученная модель справедлива при малых концентрациях  $c' \ll 1$ . Формула (4) получена с точностью до членов порядка  $O(c'^2)$ , поэтому погрешность результатов расчетов, выполненных с помощью уравнений (2), (3), (7), имеет такой же порядок.

Для замыкания системы уравнений (2), (3), (7) необходимо определить зависимости коэффициента диффузии  $D$ , равновесной концентрации  $c'_*$  и скорости растворения  $v_0$  от температуры и давления. Диффузия атомов Ti в расплаве Al происходит за счет термоактивированных скачков, поэтому коэффициент диффузии можно аппроксимировать формулой

$$D = D_0(P) e^{-Q/(RT)}, \quad (8)$$

где  $Q$  — энергия активации;  $R$  — универсальная газовая постоянная. Зависимость предэкспоненциального множителя от давления можно интерполировать по формуле  $D_0 \approx b_0 + b_1 P + b_2 P^2 + \dots$ . Зависимость равновесной концентрации от температуры и давления найдем из уравнения (5), записанного в виде  $kT \ln c'_* = \mu_s - \varphi(P, T) \approx kT \ln c'_0(P) - g_0$ . Умножая левую и правую части этого уравнения на число Авогадро  $N_A$ , получаем

$$c'_* = c'_0(P) e^{-G/(RT)}, \quad (9)$$

где  $G = g_0 N_A$  — энергия активации растворения атома Ti. Зависимость предэкспоненциального множителя от давления в формуле (9) также будем интерполировать функцией, представляемой в виде полинома  $c'_0(P) \approx r_0 + r_1 P + r_2 P^2 + \dots$

Уравнение диффузии (2) численно решается в области  $0 < z < H/2$  по явной схеме второго порядка точности. При  $z = 0$  задается граничное условие (3), соответствующее условию на поверхности кристалл Ti — расплав Al, при  $z = H/2$  — граничное условие  $\partial c'/\partial z = 0$ , соответствующее условию на свободной поверхности расплава. Уравнения (2), (3), (7) записываются в безразмерном виде

$$\frac{\partial c'}{\partial \tilde{t}} = \tilde{D} \frac{\partial^2 c'}{\partial \tilde{z}^2}, \quad \tilde{D} \frac{\partial c'}{\partial \tilde{z}} \Big|_{\tilde{z}=0} = -\tilde{v}_0 \frac{n_{\text{Ti}}^0}{n_{\text{Al}}^0} \left(1 - \frac{c'}{c'_*}\right), \quad \frac{\partial c'}{\partial \tilde{z}} \Big|_{\tilde{z}=H/2} = 0, \quad (10)$$

где  $\tilde{t} = t/\Delta t$ ;  $\tilde{z} = z/L$ ;  $\tilde{v}_0 = v_0 \Delta t/L$ ;  $\tilde{D} = D \Delta t/L^2$ ;  $\Delta t$  — характерное время;  $L = H/2$  — характерная длина;  $n_{\text{Ti}}^0/n_{\text{Al}}^0 \approx 0,95$ . В начальный момент времени в области  $0 < \tilde{z} < 1$  задается условие  $c' = 0$ , соответствующее отсутствию атомов Ti в расплаве в начальный момент. Концентрация  $c'$ , входящая в уравнение диффузии (2), выражается через концентрацию  $c$ , определяемую в расчете методом МД по формуле  $c' = c/(1 + c)$ .

**4. Обсуждение результатов расчетов.** На рис. 2, 3 приведены результаты расчета методом МД параметров, характеризующих процесс синтеза интерметаллида Ti–Al при температуре  $T = 1270$  К. На рис. 2 показаны зависимости температуры  $T$  и давления  $P$  в образце от времени  $t$  в течение всего времени моделирования. На рис. 3, а, б представлены расчетные атомные конфигурации в образце при температуре  $T_1 = 1270$  К и после охлаждения ( $T_2 = 300$  К) соответственно.

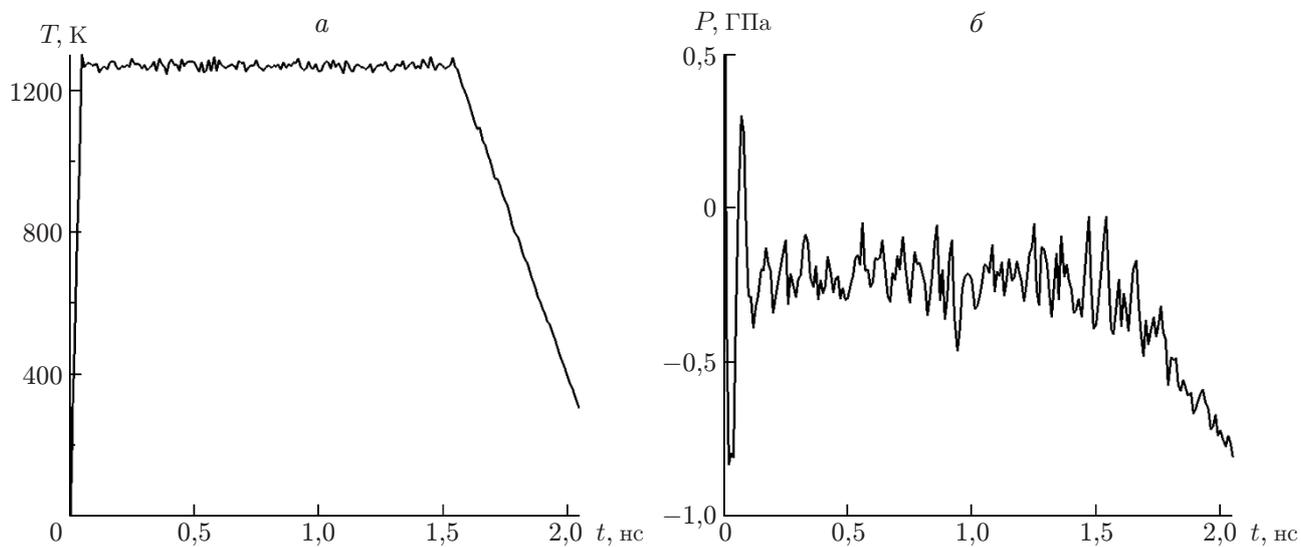


Рис. 2. Расчетные зависимости температуры (*a*) и давления (*б*) от времени, полученные методом МД

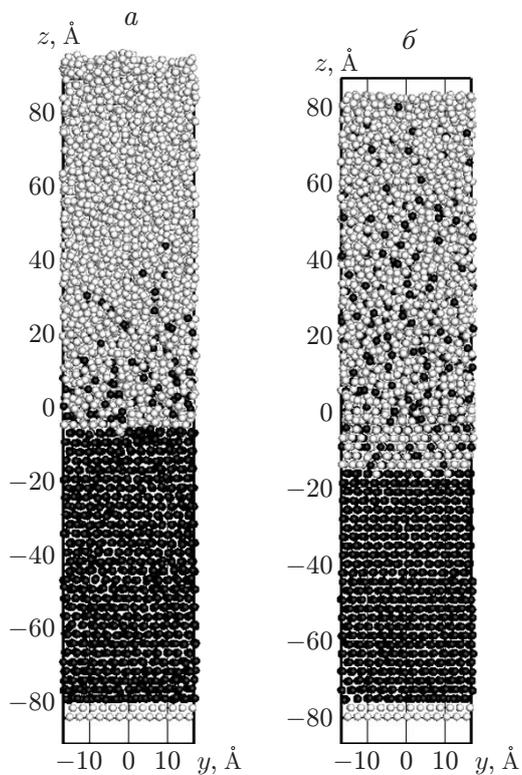


Рис. 3. Рассчитанные методом МД атомные конфигурации в плоскости ( $y, z$ ) в различные моменты времени:

*a* —  $t_1 = 0,28$  нс, *б* —  $t_2 = 2$  нс; черный цвет — атомы Ti, серый цвет — атомы Al

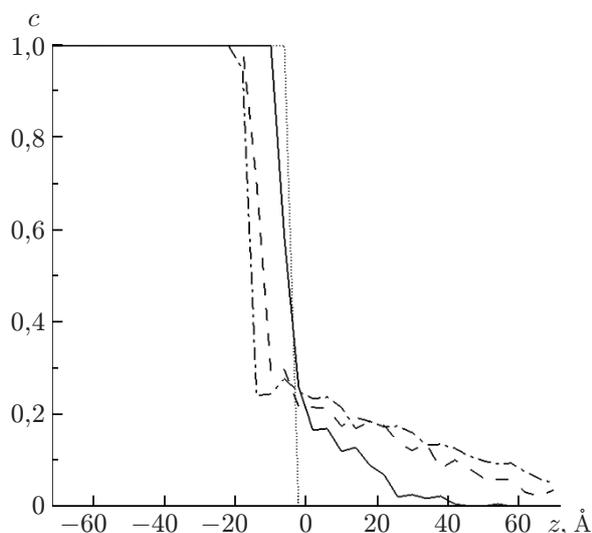


Рис. 4. Зависимости концентрации  $c$  атомов Тi от координаты  $z$  в образце, показанном на рис. 1, полученные методом МД в различные моменты времени  $t_i$ :

пунктирная линия —  $t_0 = 0$ , сплошная —  $t_1 = 0,28$  нс, штриховая —  $t_2 = 1,12$  нс, штрихпунктирная —  $t_3 = 1,68$  нс

Из рис. 2 следует, что в течение основного времени ( $0,05 \text{ нс} < t < 1,55 \text{ нс}$ ) образец Ti–Al находился при постоянной температуре  $T = 1270 \text{ К}$ . Верхняя граница композита являлась свободной, поэтому среднее напряжение вдоль оси  $z$  было равно нулю:  $\sigma_{zz} = 0$ , а среднее давление  $P \approx -0,2 \text{ ГПа}$ . При охлаждении образца ( $1,55 \text{ нс} < t < 2,00 \text{ нс}$ ) в слое  $-18 \text{ \AA} < z < 0$  на границе с кристаллом Ti произошла кристаллизация интерметаллида  $\text{TiAl}_3$ , а в слое  $0 < z < 82 \text{ \AA}$  образовался твердый раствор Ti в Al (см. рис. 3,б). При охлаждении и кристаллизации значительно уменьшился объем образца. Поскольку удельный объем интерметаллида  $\text{TiAl}_3$  меньше удельного объема кристалла Ti, на границе между ними при охлаждении и кристаллизации  $\text{TiAl}_3$  возникли значительные растягивающие напряжения  $P \approx -0,8 \text{ ГПа}$  (см. рис. 2,б). Наличие больших напряжений при кристаллизации интерметаллида  $\text{TiAl}_3$  отмечалось в экспериментах [6, 7]. Для макроскопических образцов эти напряжения приводят к растрескиванию интерметаллида  $\text{TiAl}_3$  на границе с кристаллом Ti.

Как отмечено выше, при нагреве образца до температуры  $T = 1270 \text{ К}$  на границе кристаллического Ti в слое  $-z_{\text{Ti}} < z < 0$  ( $z = -z_{\text{Ti}}$  — координата границы кристалла Ti) образуется интерметаллид  $\text{TiAl}_3$ . Растворение кристаллического Ti происходит в результате диффузии алюминия через слой интерметаллида  $\text{TiAl}_3$  к поверхности титана. Часть растворившихся атомов Ti образуют химическую связь с атомами Al, что приводит к увеличению числа атомов интерметаллида  $\text{TiAl}_3$ . Оставшаяся часть атомов Ti диффундирует через слой интерметаллида  $\text{TiAl}_3$  в расплав Al. В работе [6] сделано предположение, что атомы титана не могут диффундировать через слой интерметаллида  $\text{TiAl}_3$ , однако результаты расчетов методом МД противоречат этому предположению. Наличие атомов титана справа от слоя интерметаллида ( $-z_{\text{Ti}} < z < 0$ ) обусловлено диффузией атомов Ti через слой интерметаллида (рис. 4).

На рис. 4 показаны распределения концентрации  $c(z)$  атомов Ti в расплаве Al, рассчитанные методом МД в случае, когда контактная граница между Ti и Al в начальный момент времени находилась в плоскости  $z = 0$  (см. рис. 1). Из рис. 4 следует, что смещение границы Ti за время  $\Delta t = 0,28 \text{ нс}$  составляет  $\Delta z \approx 5 \text{ \AA}$ . Подставляя эти значения в формулу  $v_0 = \Delta z / \Delta t$ , получаем характерную скорость растворения титана  $v_0 = 1,7 \text{ м/с}$ .

Для определения равновесной концентрации проводился расчет методом МД при других начальных размерах кристаллов Ti и Al. Граница между кристаллами Ti и Al была смещена вверх относительно ее положения на рис. 1 на величину  $\delta z = 50 \text{ \AA}$ . В началь-

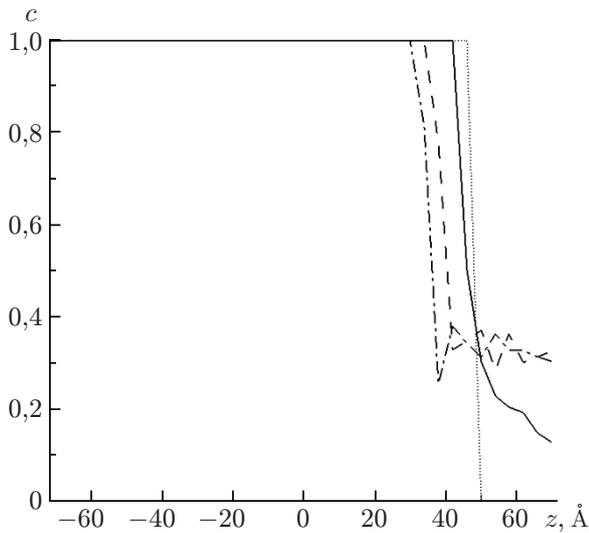


Рис. 5

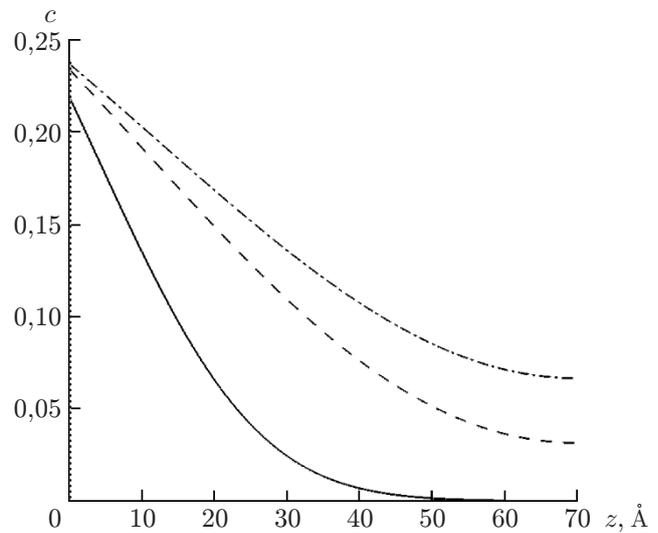


Рис. 6

Рис. 5. Зависимости концентрации  $c$  атомов Ti от координаты  $z$  в образце, в котором контактная граница между Ti и Al в начальный момент времени находилась в плоскости  $z = 50 \text{ \AA}$ , полученные методом МД в различные моменты времени  $t_i$ : пунктирная линия —  $t_0 = 0$ , сплошная —  $t_1 = 0,38 \text{ нс}$ , штриховая —  $t_2 = 1,78 \text{ нс}$ , штрихпунктирная —  $t_3 = 2,47 \text{ нс}$

Рис. 6. Зависимости концентрации  $c$  атомов Ti от координаты  $z$ , полученные при численном решении уравнения диффузии в различные моменты времени  $t_i$ : пунктирная линия (ось ординат) —  $t_0 = 0$ , сплошная —  $t_1 = 0,28 \text{ нс}$ , штриховая —  $t_2 = 1,12 \text{ нс}$ , штрихпунктирная —  $t_3 = 1,68 \text{ нс}$

ный момент времени толщина слоя Ti была равна  $\Delta z_{\text{Ti}} = 130 \text{ \AA}$ , толщина слоя Al —  $\Delta z_{\text{Al}} = 30 \text{ \AA}$ . Уменьшение толщины слоя Al позволило рассчитать равновесное распределение атомов Ti при той же температуре за достаточно малый промежуток времени. Результаты расчета  $c(z, t)$  для этого случая показаны на рис. 5. Равновесное распределение концентрации титана в расплаве  $c_* \approx 0,34$  достигалось в момент времени  $t = 2,47 \text{ нс}$  (см. рис. 5).

Полученные значения  $v_0 = 1,7 \text{ м/с}$  и  $c_* \approx 0,34$  использовались при решении уравнения диффузии (10). Это уравнение решалось в области  $0 < z < 70 \text{ \AA}$  при  $D = 0,62 \cdot 10^{-8} \text{ м}^2/\text{с}$ ,  $c'_* = c_*/(1 + c_*) = 0,25$ ,  $v_0 = 1,7 \text{ м/с}$ . Коэффициент диффузии в уравнении (10)  $D = 0,62 \cdot 10^{-8} \text{ м}^2/\text{с}$  был подобран таким образом, чтобы обеспечивалась наилучшая аппроксимация полученного методом МД распределения концентрации численным решением уравнения диффузии. В начальный момент времени концентрация атомов Ti в области  $0 < z < 70 \text{ \AA}$  была равна нулю:  $c(z, 0) = 0$ . На рис. 6 показаны распределения концентрации  $c(z, t_i)$  атомов Ti в расплаве Al, рассчитанные с помощью уравнения диффузии (10), в различные моменты времени  $t_i$ . Из рис. 4, 6 следует, что распределения концентрации  $c(z, t_i)$ , рассчитанные различными методами в одни и те же моменты времени  $t_i$  в области  $0 < z < 70 \text{ \AA}$ , хорошо согласуются.

Для определения зависимостей коэффициента диффузии, равновесной концентрации и характерной скорости растворения титана от температуры проведены численные расчеты при  $T_i = 1110, 1310, 1410, 1610 \text{ К}$ . На рис. 7,а точками показаны зависимости  $\ln D + 18,4$  и  $\ln c'_*$  от  $1/T_i$ , полученные в расчетах методом МД при различных зна-

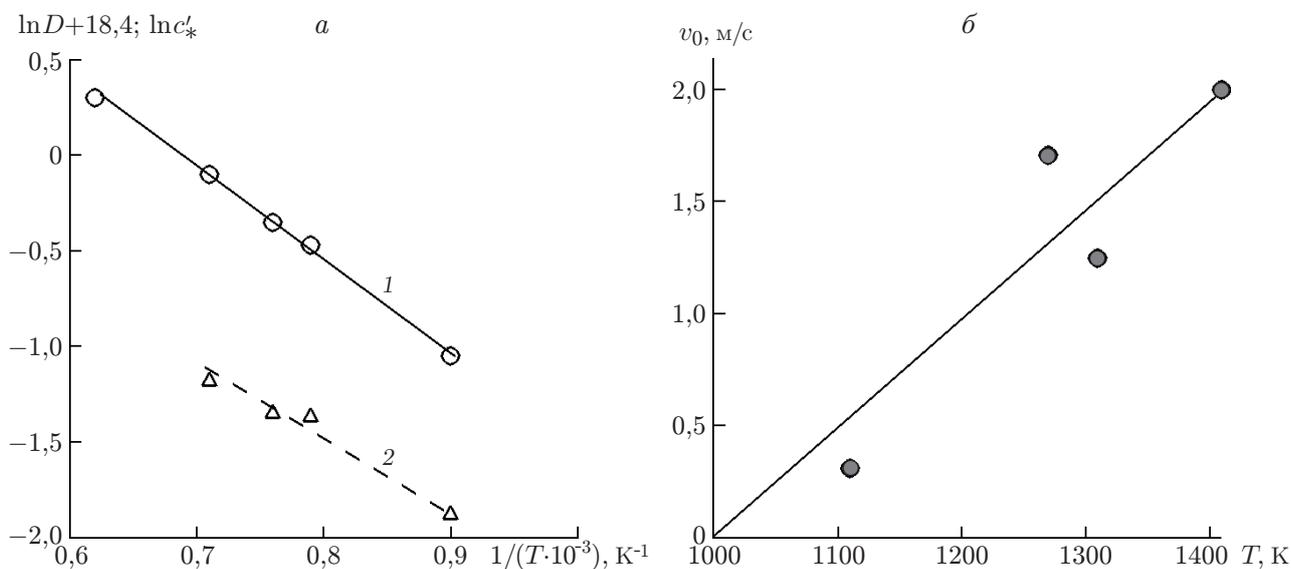


Рис. 7. Зависимости коэффициента диффузии  $\ln D + 18,4$ , равновесной концентрации  $\ln c'_*$  (а) и характерной скорости растворения  $v_0$  (б) от температуры: точки — результаты расчетов, линии — результаты аппроксимации; 1 — коэффициент диффузии, 2 — равновесная концентрация

чениях температуры  $T_i$ . Логарифмируя формулы (8), (9), получаем уравнения прямых  $\ln D + 18,4 = \ln D_0 - Q/(RT)$  и  $\ln c'_* = \ln c'_0 - G/(RT)$ , которые хорошо аппроксимируют результаты расчетов. С использованием данных, приведенных на рис. 7,а, находим значения предэкспоненциальных множителей и энергий активации для формулы (8):  $D_0 = 1,5 \cdot 10^{-8} \text{ м}^2/\text{с}$ ,  $Q \approx 38,8 \text{ кДж/моль}$  и формулы (9):  $c'_0 \approx 0,5$ ,  $G \approx 37,4 \text{ кДж/моль}$ . При температуре  $T_{\text{Ti}}^m = 1610 \text{ К}$  происходит плавление кристалла Ti.

Для определения зависимости предэкспоненциальных множителей в формулах (8), (9) от давления методом МД проведены численные расчеты параметров процесса синтеза интерметаллида при средних давлениях в образце  $P_1 = -5 \text{ МПа}$  и  $P_2 = 5 \text{ МПа}$ . Показано, что предэкспоненциальные множители в формулах (8), (9) слабо зависят от давления, поэтому в интервале давлений  $-5 \text{ МПа} \leq P \leq 5 \text{ МПа}$  их можно считать постоянными:  $D_0 = 1,5 \cdot 10^{-8} \text{ м}^2/\text{с}$ ,  $c'_0 \approx 0,5$ .

Расчитанные значения характерной скорости растворения  $v_0$ , показанные точками на рис. 7,б, можно аппроксимировать линейной функцией температуры  $v_0 = VT$ , где  $B = 5 \cdot 10^{-3} \text{ м}/(\text{К} \cdot \text{с})$ , что согласуется со второй формулой в (7). Значительный разброс расчетных значений  $v_0$  относительно прямой линии может быть обусловлен погрешностью, возникающей при определении  $v_0$  в численных расчетах при малой, но конечной концентрации  $c \approx 0,2$  (см. рис. 4). Как отмечено выше, из третьего уравнения в (7) следует, что характерная скорость растворения должна определяться при бесконечно малой концентрации Ti  $c \rightarrow 0$ .

**Закключение.** Проведенное методом молекулярной динамики численное моделирование позволило уточнить физические механизмы процессов растворения титана в расплаве алюминия и синтеза интерметаллида. При растворении титана в окрестности границы кристалл титана — раствор образуется интерметаллид  $\text{TiAl}_3$ . Процесс растворения происходит за счет диффузии атомов алюминия через слой интерметаллида. Однако часть растворенных атомов титана вступает в химическую связь с атомами алюминия и образует интерметаллид, другая часть диффундирует сквозь слой интерметаллида в расплав алюминия. Полученные в работе результаты численных расчетов согласуются с данны-

ми экспериментов. На основе теории слабых растворов построена математическая модель растворения титана в расплаве алюминия. Определены зависимости коэффициента диффузии, равновесной концентрации и скорости растворения от температуры.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. **Xu L., Cui Y. L., Hao Y. L., Yang R.** Growth of intermetallic layer in multi-laminated Ti/Al diffusion couples // *Material Sci. Engng. A*. 2006. V. 435/436. P. 638–647.
2. **Bataev I. A., Bataev A. A., Mali V. I., et al.** Nucleation and growth of titanium aluminide in an explosion — welded laminate composite // *Phys. Metals Metallography*. 2012. V. 113, N 10. P. 947–956.
3. **Kiselev S. P., Ryashin N. S.** Ti–Al intermetallic compounds synthesis in coatings deposited by cold spraying // *AIP Conf. Proc.* 2016. V. 1770. P. 030093-1–030093-4.
4. **Киселев С. П., Ряшин Н. С., Полухин А. А.** Процессы диффузии при отжиге алюминиевых покрытий ХГН на титане // Тез. докл. 3-й Междунар. конф. “Неизотермические явления и процессы: от теории теплового взрыва к структурной макрокинетике: К 85-летию акад. А. Г. Мержанова”, Черногловка, 28–29 нояб. 2016 г. Черногловка: ООО “МЭТР и К”, 2016. С. 105–106.
5. **Krai J., Ferdinandy M., Diko P.** Formation of TiAl<sub>3</sub> layer on titanium alloys // *Material Sci. Engng. A*. 1991. V. 140. P. 749–785.
6. **Khoshhal R., Soltanieh M., Mirjalili M.** Formation and growth of titanium aluminide layer at the surface of titanium sheets immersed in molten aluminum // *Iranian J. Materials Sci. Engng.* 2010. V. 7, N 1. P. 24–31.
7. **Sujata M., Bhargava S., Sangal S.** Microstructural features of TiAl<sub>3</sub> base compounds formed by reaction synthesis // *Materials Design*. 2011. V. 32, iss. 1. P. 207–216.
8. **Гуревич Л. М.** Механизмы структурообразования при взаимодействии титана с расплавом алюминия // *Изв. Волгогр. гос. ун-та. Сер. Пробл. материаловедения, сварки и прочности в машиностроении*. 2013. Вып. 7, № 6. С. 6–13.
9. **Кошелев К. Б.** Исследование процессов структурообразования и саморазогрева в бинарной порошковой смеси Ti–Al в режиме статического теплового взрыва на основе диаграммы состояния // *Изв. Том. политехн. ун-та*. 2008. Т. 312, № 2. С. 44–47.
10. **Киселев С. П.** Численное моделирование кинетики синтеза интерметаллида Ti–Al методом молекулярной динамики // *Физ. мезомеханика*. 2016. Т. 19, № 3. С. 47–57.
11. **Киселев С. П.** Моделирование кристаллизации наночастицы Ti–Al методом молекулярной динамики // *Докл. АН*. 2016. Т. 466, № 4. С. 406–408.
12. **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.
13. **Nose S. J.** Unified formulation of the constant temperature molecular dynamics methods // *J. Chem. Phys.* 1984. V. 81. P. 511–519.
14. **Plimpton S. J.** Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // *J. Comput. Phys.* 1995. V. 117. P. 1–19.
15. **Киселев С. П.** Метод молекулярной динамики в механике деформированного твердого тела // *ПМТФ*. 2014. Т. 55, № 3. С. 113–139.
16. **Ландау Л. Д.** Статистическая физика / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. М.: Наука, 1976. Ч. 1.