

На правах рукописи



Эмурлаева Юлия Юрьевна

**СТРУКТУРА И МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА  
ИНТЕРМЕТАЛЛИДНЫХ СЛОЕВ, ПОЛУЧЕННЫХ ПРИ ОТЖИГЕ  
БИМЕТАЛЛОВ  $Al - Me$  ( $Me = Ti, Zr, Nb, Ta$ )**

Специальность: 2.6.17 – Материаловедение

Автореферат диссертации на соискание ученой степени  
кандидата технических наук

Новосибирск – 2023

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Новосибирский государственный технический университет»

Научный руководитель:

**Батаев Иван Анатольевич**  
доктор технических наук, профессор.

Официальные оппоненты:

**Гладковский Сергей Викторович**  
доктор технических наук, доцент, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт машиноведения имени Э.С. Горкунова Уральского отделения Российской академии наук, лаборатория деформирования и разрушения, заведующий лабораторией.

**Прибытков Геннадий Андреевич**  
доктор технических наук, доцент, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, лаборатория физики консолидации порошковых материалов, главный научный сотрудник.

Ведущая организация:

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

Защита диссертации состоится «09» ноября 2023 года в 14<sup>00</sup> часов на заседании диссертационного совета 24.2.347.03, созданного на базе Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Новосибирский государственный технический университет» по адресу: 630073, г. Новосибирск, пр. К. Маркса, 20, I корпус, конференц-зал.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Новосибирского государственного технического университета, а также на сайте [www.nstu.ru](http://www.nstu.ru)

Автореферат разослан «\_\_» сентября 2023 г.

Ученый секретарь диссертационного совета  
канд. техн. наук, доцент



Андрей Геннадиевич Тюрин

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

### Актуальность темы исследования

На протяжении нескольких десятилетий алюминиды переходных металлов рассматриваются в качестве перспективных материалов для использования в таких высокотехнологичных областях как авиастроение, двигателестроение, традиционная и ядерная энергетика. В частности, значительного прорыва в области авиастроения удалось достичь благодаря разработке технологии производства лопаток турбин из сплавов на основе соединения  $\gamma$ -TiAl.

В настоящее время одна из актуальных, но в то же время сложных задач связана с повышением содержания алюминия в интерметаллидах на его основе. Увеличение содержания этого элемента в алюминиды сопровождается снижением плотности сплавов, повышением их жаростойкости и твёрдости, а также существенным снижением стоимости материалов. С этой точки зрения триалюминиды таких металлов как титан, цирконий, ниобий и тантал являются чрезвычайно перспективными материалами с позиции их промышленного применения. В то же время широкому внедрению в производство препятствует высокая хрупкость анализируемых материалов. По этой причине триалюминиды титана предлагается использовать в виде слоистых металл-интерметаллидных композитов (СМИК), в которых приемлемый уровень пластичности и трещиностойкости обеспечивается присутствием тонких металлических прослоек. Такого рода композиты могут применяться в качестве защитных материалов, эффективно поглощающих энергию удара и взрыва, а также несущих элементов лёгких конструкций, характеризующихся рекордной жёсткостью.

Как правило, СМИК получают путём реакционного синтеза в процессе нагрева под давлением контактирующих друг с другом разнородных металлических заготовок. При нагреве тонких фольг между ними могут быть сформированы слои, состоящие из одного или нескольких интерметаллидов. Большинство опубликованных на сегодняшний день работ в области СМИК связано с изучением структуры и свойств композитов на основе соединения  $TiAl_3$ . Перспективы применения триалюминиды титана в СМИК связаны с его низкой плотностью, высоким модулем упругости (в особенности при пересчёте на вес изделий), повышенной жаропрочностью и жаростойкостью.

Несмотря на большой объем исследований триалюминиды титана, выполняемых на протяжении последних двух десятилетий, ряд важных вопросов в этой области всё ещё остаётся открытым. В частности, не рассмотрены термодинамические аспекты формирования межузельных атомов и вакансий в процессе роста данной фазы, не изучены в полной мере механизмы миграции этих дефектов. Остаются необъясненными причины формирования двух типов текстуры и различных сверхструктур. Недостаточное внимание в современной литературе уделяется анализу СМИК на основе триалюминидов других металлов. При этом триалюминиды таких металлов, как цирконий, ниобий и тантал представляют большой интерес в связи с их привлекательными физическими и механическими свойствами. Задачи, связанные с получением СМИК на основе перечисленных металлов, а также с анализом механизмов их формирования, исследованием структуры и свойств, являются актуальными.

Представленная к защите диссертация направлена на изучение особенностей формирования, структуры и свойств триалюминидов титана, циркония, ниобия и тантала при термической обработке слоистых заготовок (в данном случае – биметаллов).

Полученные в работе результаты позволяют расширить представления о диффузионных процессах, происходящих во время роста исследуемых алюминидов.

Работа выполнялась в Новосибирском государственном техническом университете в соответствии с государственным заданием Министерства образования и науки Российской Федерации (проект *FSUN-2020-0014 (2019-0931)*, «Исследования метастабильных структур, образующихся на поверхностях и границах раздела материалов при экстремальных внешних воздействиях»), а также при финансовой поддержке РФФИ (научный проект № 20-33-90164). При выполнении исследования использовали оборудование Центра коллективного пользования НГТУ «Структура, механические и физические свойства материалов» (№ 13.ЦКП.21.003).

### **Степень разработанности темы исследования**

Разработка технологии получения интерметаллидных композитов и исследование их свойств ведётся в ряде отечественных и зарубежных научных коллективов. В России большой вклад в это направление внесли сотрудники ФГУП ВИАМ, ФГУП НИИ КМ «Прометей», МГТУ им. Н.Э. Баумана, ИМЕТ им. А.А. Байкова, ФГБОУ ВолгГТУ, НИТУ МИСиС, ИСМАН РАН, ИФМ УрО РАН, НИУ БелГУ, ИГиЛ СО РАН и многих других научных организаций.

Для изготовления СМИК были предложены различные сочетания разнородных материалов, в том числе *Fe - Al*, *Ni - Al*, *Ti - Al*, *Cu - Al* и другие. В разработку технологии получения СМИК на основе алюминидов металлов значительный вклад внесли научные коллективы ВолгГТУ, работающие под руководством В.Г. Шморгуна и Л.М. Гуревича. Хорошо известны их работы, связанные с формированием интерметаллидных слоёв при термической обработке слоистых заготовок *Al - Ti*, *Al - Cu*, *Al - Ni*, *Al - Mg* и других двухкомпонентных систем. Проблемы синтеза и исследования механических свойств СМИК системы *Ti - Al<sub>3</sub>Ti - Al* анализировались в совместных исследованиях А.М. Пацелова, Б.А. Гринберг и В.В. Рыбина. Исследования в области композитов на основе триалюминидов титана со структурой типа *D0<sub>22</sub>* и *L1<sub>2</sub>* отражены в работах Д.В. Лазуренко. Большой объем исследований в области анализа структуры и свойств СМИК на основе триалюминидов титана был выполнен научными коллективами, работающими под руководством К.С. Веккио, Ч. Пенгвана, Д.М. Фрончек, П. Жеба, Г. Пауля, Ф. Фодиана и других зарубежных специалистов. Работы перечисленных авторов были использованы при выполнении данной диссертационной работы.

Несмотря на то, что особенности формирования интерметаллидов в процессе нагрева слоистых заготовок изучаются на протяжении нескольких десятилетий, ряд вопросов, касающихся механизмов роста интерметаллидных слоёв, их структуры и свойств, остаётся открытым. Нет экспериментальных данных о процессах зарождения и стадиях роста триалюминидов в слоистых системах с использованием метода синхротронной рентгеновской дифракции *in-situ*, обеспечивающего высокую точность анализа. В литературе отсутствуют сведения об энергии формирования и миграции точечных дефектов в триалюминидов большинства металлов. Ограничены данные о триботехнических характеристиках интерметаллидных слоёв, образующихся при отжиге слоистых-металл интерметаллидных композитов. Практически не обсуждаются особенности формирования текстуры и сверхструктур триалюминидов металлов в слоистых металл-интерметаллидных композитах. Следует отметить также, что основной объем исследований в области синтеза СМИК и анализа их структуры и свойств

получен в приложении к системе  $Al - Ti$ . Количество работ, связанных с изучением СМИК на основе систем  $Al - Zr$ ,  $Al - Nb$  и  $Al - Ta$ , несоизмеримо меньше.

**Цель диссертационной работы** заключается в выявлении механизмов формирования триалюминидов титана, циркония, ниобия и тантала при отжиге биметаллов  $Al - Ti$ ,  $Al - Zr$ ,  $Al - Nb$ ,  $Al - Ta$  и изучении комплекса их механических свойств с использованием современных методов анализа.

Для достижения поставленной цели решались следующие задачи:

1. Исследование особенностей строения интерметаллидных слоёв, сформированных в процессе отжига, с использованием световой и электронной микроскопии, а также дифракционных методов анализа.

2. Анализ кинетики роста интерметаллидных слоёв в процессе термической обработки биметаллов  $Al - Ti$ ,  $Al - Zr$ ,  $Al - Nb$ ,  $Al - Ta$ .

3. Исследование стадийности формирования и особенностей роста интерметаллидных слоёв на межслойных границах композиции  $Al - Ti$  с использованием метода синхротронной рентгеновской дифракции в режиме *in-situ*.

4. Анализ элементарных механизмов диффузии и оценка значений энергии формирования точечных дефектов в соединениях  $TiAl_3$ ,  $ZrAl_3$  и  $NbAl_3$  с использованием теории функционала плотности.

5. Исследование особенностей диффузии атомов алюминия в триалюминиде титана с использованием моделирования методом упругой ленты, кинетического метода Монте-Карло и молекулярной динамики.

6. Исследование методами инструментального индентирования механических свойств соединений  $TiAl_3$ ,  $ZrAl_3$ ,  $TaAl_3$  и  $NbAl_3$  (твёрдость, модуль упругости, трещиностойкость и износостойкость).

### **Научная новизна**

1. С использованием теории функционала плотности определены значения энергии формирования точечных дефектов в триалюминидах титана, циркония и ниобия. Установлено, что наиболее низкое значение энергии формирования вакансий в подрешетке алюминия соответствует соединению  $ZrAl_3$ , что объясняет быстрый рост данного слоя при отжиге биметалла  $Al - Zr$ .

2. Методом упругой ленты определены значения потенциальных барьеров для различных типов скачков атомов в триалюминидах титана, циркония и ниобия. Установлено, что наиболее вероятным диффузионным процессом в данных соединениях является скачок атомов алюминия «на место ближайшего соседа».

3. С использованием метода молекулярной динамики обоснован механизм межзельной диффузии атомов алюминия в соединении  $TiAl_3$ , заключающийся в эстафетном перемещении двойного дефекта в форме гантели от одной цепочки октаэдрических пор интерметаллида к другой.

4. С использованием синхротронной рентгеновской дифракции и теории функционала плотности зафиксирован градиентный характер изменения параметров ячейки фазы  $ZrAl_3$  по толщине прослойки, возникшей в процессе диффузионного отжига. Зафиксировано формирование двух типов текстуры: вблизи границы  $Al - ZrAl_3$  направление  $[001]$  триалюминида циркония ориентировано перпендикулярно межслойной границе, в остальном объеме интерметаллида межслойной границе перпендикулярны направления  $\langle 100 \rangle$ .

5. Установлено, что особенности строения интерметаллидных слоев, возникающих при отжиге биметаллических материалов, обуславливают анизотропию триботехнических свойств интерметаллидов. Объем материала, изношенного индентором, перемещающимся поперек интерметаллидных слоев, меньше по сравнению с его движением параллельно интерметаллидному слою. Характер проявления зафиксированного эффекта определяется степенью проявления текстуры в материале. В триалюминиде титана зафиксировано двукратное различие в уровне износостойкости.

### **Теоретическая и практическая значимость работы**

Теоретическую значимость работы определяет совокупность данных, полученных экспериментальными и расчётными методами, о процессах диффузионного роста интерметаллидов  $TiAl_3$ ,  $ZrAl_3$ ,  $NbAl_3$  и  $TaAl_3$ . Обоснован механизм межузельной диффузии атомов алюминия в соединении  $TiAl_3$ . Определены значения энергии формирования и миграции точечных дефектов в триалюминидах титана, циркония и ниобия.

Практическая значимость диссертационной работы основана на возможности использования результатов исследования при решении задач, связанных с получением металл-интерметаллидных композитов в процессе термической обработки слоистых заготовок из разнородных по составу металлов.

Разработанные в процессе выполнения диссертационной работы программные продукты «Потоковое определение энергии основного состояния вещества с использованием теории функционала плотности» (свидетельство № 2023660574), «Обработка результатов определения энергии основного состояния вещества из первых принципов и вычисление энергии формирования точечных дефектов» (свидетельство № 2023660573), «Моделирование скачков атомов в триалюминидах переходных металлов кинетическим методом Монте-Карло» (свидетельство № 2023660572), «Мультипрофильный спектральный анализ с использованием симметричных алгебраических функциональных зависимостей» (свидетельство № 2022681147) могут быть использованы при исследовании диффузионных процессов в других металл-интерметаллидных системах.

Разработанные при выполнении работы рекомендации переданы в Центральный аэрогидродинамический институт (ЦАГИ) имени профессора Н.Е. Жуковского. Полученные в работе результаты используются в Новосибирском государственном техническом университете при реализации образовательных программ в области материаловедения.

### **Методология и методы исследования**

Слоистые материалы типа «алюминий - металл» были получены в лаборатории взрывных работ и технологий Пекинского технологического института. Соединенные высокоскоростным соударением биметаллические заготовки отжигали в вакуумной печи. Структурные исследования и механические испытания полученных материалов выполняли в ЦКП НГТУ «Структура, механические и физические свойства материалов», оснащенном оборудованием, уровень которого соответствует современным отечественным и зарубежным научным лабораториям в области материаловедения. Для проведения структурных исследований использовали световой микроскоп *Axio Observer Z1m*, растровый электронный микроскоп *Carl Zeiss EVO 50XVP*, растровый электронный микроскоп *Carl Zeiss Sigma 300*, оснащенный детектором *Oxford Instruments HKL Channel 5*. Элементный состав интерметаллидной составляющей определяли с использованием детектора *Oxford Instruments X-Act*. Трансмиссионные

электронномикроскопические исследования были проведены в Центре коллективного пользования Томского государственного университета на приборе *Philips CM-12*. Рентгеноструктурный анализ выполнен на источнике *Petra III* немецкого электронного синхротрона (линия *P07* «Материаловедение высоких энергий») и на накопителе ВЭПП-3 (канал б-А «Прецизионная дифрактометрия», ЦКП СЦСТИ, ИЯФ СО РАН). Для анализа дюрOMETрических свойств отдельных структурных составляющих использовали полуавтоматический микротвердомер *WolpertGroup 402 MVD* и нанотвердомер НаноСкан-3D Стандарт (ФГБНУ ТИСНУМ). Обработку результатов дифракционных экспериментов, вычисление значений энергии основного состояния веществ и формирования дефектов кристаллического строения, а также моделирование диффузионных процессов выполняли с использованием языка программирования *Python* и пакетов *NumPy*, *SciPy*, *Pandas*, *Matplotlib*, *ASE* и *GPAW*.

### **Положения, выносимые на защиту**

1. Слои триалюминидов титана, циркония, ниобия и тантала, возникающие при отжиге биметаллических заготовок, характеризуются градиентным строением, признаками которого являются различие размеров зёрен и текстура различного типа. Особенности градиентного строения определяют анизотропию механических и триботехнических свойств интерметаллидных слоев.

2. Метод непрерывного рентгенофазового анализа с использованием синхротронного излучения дает возможность наиболее точного определения стадий формирования и роста интерметаллидных слоев во время изотермической выдержки биметаллических заготовок и позволяет значительно снизить трудоемкость проведения исследований.

3. Особенности формирования текстуры при росте интерметаллидных слоев обусловлены механизмами диффузии атомов в кристаллических решетках алюминидов. Перескок алюминия «на место ближайшего соседа» является одним из наиболее предпочтительных механизмов диффузии в структурах типа  $DO_{22}$  и  $DO_{23}$ . Диффузия атомов титана, циркония, ниобия по механизму скачков на место ближайшего соседа маловероятна.

4. Результатом присутствия атома алюминия в межузлии триалюминида титана является формирование двойного дефекта типа «гантель». Механизм межузельной диффузии в  $TiAl_3$  заключается в эстафетной передаче данного дефекта от одной цепочки октаэдрических пор к другой, что позволяет объяснить процесс миграции атомов алюминия в триалюминиде титана в направлении  $[001]$ .

### **Степень достоверности и апробация результатов работы**

Экспериментальные исследования проведены с использованием современного аналитического оборудования. Численные значения результатов измерений найдены с применением статистических методов обработки экспериментальных данных. Достоверность выводов, полученных экспериментально, обеспечивалась применением взаимодополняющих методов анализа. Результаты диссертационных исследований не противоречат литературным данным, опубликованным в отечественных и зарубежных источниках.

Основные результаты и положения работы докладывались и обсуждались на VIII международной конференции аспирантов «*Progress through Innovations*», г. Новосибирск, 2019 г.; на всероссийской конференции «Сварка в России - 2019: Современное состояние и перспективы», г. Томск, 2019 г.; на XII международной

научно-практической конференции «Современные проблемы машиностроения», г. Томск, 2019 г.; на всероссийской научной конференции молодых ученых «Наука. Технологии. Инновации», г. Новосибирск, 2020 г.; на международной научно-технической конференции «Современные направления и перспективы развития технологий обработки и оборудования в машиностроении», г. Севастополь, 2021 г.; на семинаре молодых ученых по проблемам алюминидов титана, г. Сиань, Китай, 2021 г.; на международной конференции «*Synchrotron and Free electron laser Radiation: generation and application*», г. Новосибирск, 2022 г.

**Личный вклад автора** состоял в формулировании задач, подготовке исходных материалов для экспериментальных исследований, проведении математического моделирования (совместно с профессором кафедры ММ НГТУ Д.В. Лазуренко), выполнении структурных исследований, проведении механических испытаний материалов (совместно с М.Н. Хомяковым, ИЛФ СО РАН), постановке экспериментов с использованием дифракции синхротронного излучения, в том числе в режиме *in-situ* (совместно с З.С. Винокуровым, ИК СО РАН), обобщении и анализе экспериментальных данных, сопоставлении результатов проведенных исследований с известными литературными данными, формулировании выводов по результатам исследований.

#### **Соответствие паспорту заявленной специальности**

Тема и содержание диссертационной работы соответствуют научной специальности 2.6.17 – «Материаловедение» в части пунктов 1, 2, 5 и 8.

#### **Публикации**

По результатам исследований опубликовано 11 печатных научных работ, из них: 4 статьи в журналах, входящих в перечень изданий, рекомендованных ВАК РФ, 7 статей в зарубежных журналах. Зарегистрированы 4 программы для ЭВМ.

#### **Структура и объем работы**

Диссертация состоит из введения, шести разделов, заключения и шести приложений. Работа изложена на 224 страницах, включая 55 рисунков, 28 таблиц и библиографический список из 309 наименований.

### **ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ**

**Во введении** представлена общая характеристика диссертационной работы, обоснована актуальность темы исследования, сформулированы цель и задачи работы, отражены научная новизна, теоретическая и практическая значимость, положения, выносимые на защиту.

**В первом разделе** представлен обзор литературных источников по теме исследования. Подробно рассмотрены методы формирования слоистых металл-интерметаллидных композитов на основе алюминия. Проанализирован вклад алюминидов переходных металлов в формирование механических свойств слоистых композитов.

**Во втором разделе** работы описаны способы получения экспериментальных образцов, а также методы исследования структуры, фазового состава, свойств анализируемых материалов и методы численного моделирования. Композиции «алюминий - интерметаллидный слой - металл  $X$ » (где  $X = Ti, Zr, Nb, Ta$ ) получали, сочетая процесс сварки взрывом листовых заготовок ( $100 \times 100 \times 2$  мм) с последующим отжигом. Сварку взрывом осуществляли по классической схеме с параллельным расположением пластин (на расстоянии 5 мм друг от друга). Применяли взрывчатое вещество (ВВ) с плотностью  $0,9 \text{ г/см}^3$ , скорость детонации которого составляла  $\sim 2200 \text{ м/с}$ .



Толщина слоя ВВ составляла 15 мм. В качестве материала метаемой пластины во всех экспериментах использовали алюминий. Изотермическая выдержка образцов осуществлялась при 570, 590, 610 и 630 °С. Время отжига биметаллов составляло 1, 5, 25 и 100 часов. По окончании отжига на границах соединения пластин были сформированы диффузионные слои, состоящие из интерметаллидов.

Структуру полученных в работе материалов изучали с использованием методов световой металлографии, растровой и просвечивающей электронной микроскопии, дифракции синхротронного рентгеновского излучения. Элементный состав интерметаллидной составляющей изучали методом микрорентгеноспектрального анализа. Для измерения твердости и модуля упругости зон перемешивания, возникших на границах сваренных взрывом пластин, а также материала интерметаллидных прослоек, сформированных в процессе диффузионного отжига, использовали метод инструментального индентирования. Триботехнические испытания интерметаллидных прослоек проводили по схеме циклического истирания с использованием нанотвердомера. Трещиностойкость интерметаллидов оценивали по методу Палмквиста.

Анализ диффузионных процессов в интерметаллидах проводили методами молекулярной динамики и теории функционала плотности (ТФП). Для оценки величины активационного барьера процесса перескока атома из одной позиции в другую использовали метод упругой ленты.

**В третьем разделе** работы представлены результаты исследований структуры биметаллов *Al - Ti*, *Al - Zr*, *Al - Nb* и *Al - Ta* в состоянии после сварки взрывом и после отжига. Представлена информация о зёрненной структуре интерметаллидных слоев, их элементном и фазовом составе, формировании в них кристаллографической текстуры и сверхструктуры, приводится оценка кинетики их роста.

Во всех сваренных взрывом биметаллах на межслойных границах наблюдалось формирование зон перемешивания, представляющих собой неоднородные смеси материалов, существенно отличающихся друг от друга по химическому составу (рисунок 1). Вблизи межслойных границ материал металлических пластин претерпевает интенсивную пластическую деформацию, результатом которой является измельчение зёрненно-субзёрненных построений (рисунок 2).

При отжиге сваренного взрывом композита *Al - Ti* формируются две модификации триалюминида титана –  $TiAl_3$  со структурой типа  $D0_{22}$  и сверхструктура на его основе ( $Ti_8Al_{24}$ ). Объёмная доля триалюминида титана типа  $Ti_8Al_{24}$  повышается по мере приближения к границе раздела *Ti* - интерметаллид. В ряде

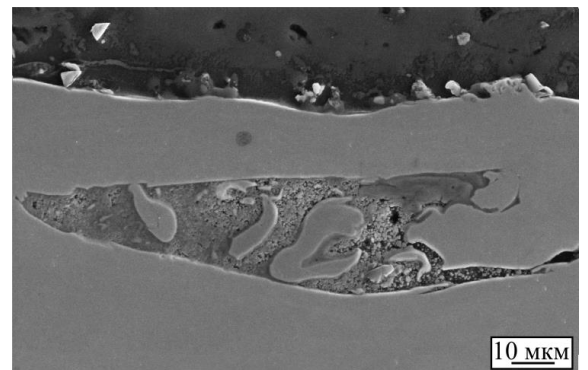


Рисунок 1 – Зоны перемешивания материалов в биметалле *Al - Nb*, выбранные для проведения микрорентгеноспектрального анализа

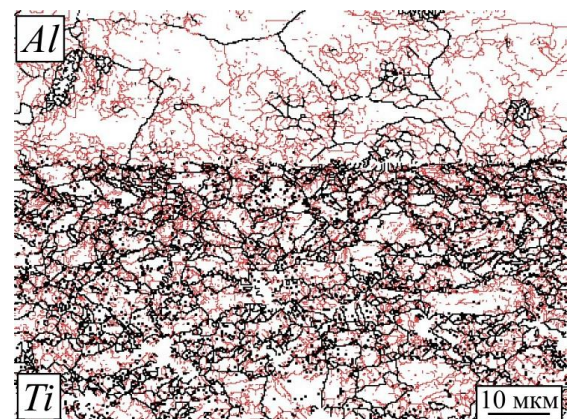


Рисунок 2 – ДОРЭ-анализ соединения *Al - Ti*. Идентифицированы высокоугловые и малоугловые границы (малоугловые границы ( $\sim 1^\circ \dots 10^\circ$ ) выделены красным цветом)

работ, выполненных другими научными коллективами, отмечалось, что сверхструктура  $Ti_8Al_{24}$  является одной из множества возможных длиннопериодных структур в соединениях  $Ti_{1+x}Al_{3-x}$ . Таким образом, в работе было высказано предположение, что её образование вблизи границы титан - интерметаллид обусловлено недостатком в этой зоне алюминия для построения триалюминид титана со структурой типа  $D0_{22}$ .

Исследуя методом дифракции синхротронного рентгеновского излучения (в режиме *in-situ*) особенности образования интерметаллидного слоя при отжиге многослойной заготовки  $Al - Ti$ , выявлены стадии зарождения и роста триалюминид титана (рисунок 3). Появление слабых дифракционных максимумов триалюминид титана зафиксировано на стадии нагрева при температуре  $\sim 590$  °C (через 16 минут после начала эксперимента). Рост интерметаллидного слоя во время изотермической выдержки при 640 °C можно разделить на три этапа. Длительность первого этапа, характеризующегося малой скоростью роста, составляет  $\sim 100$  минут. Второй этап продолжительностью  $\sim 60$  минут сопровождается быстрым ростом всех дифракционных максимумов триалюминид титана. Третий этап наступает после достижения критической толщины, когда скорость роста контролируется диффузией атомов через промежуточный интерметаллидный слой.

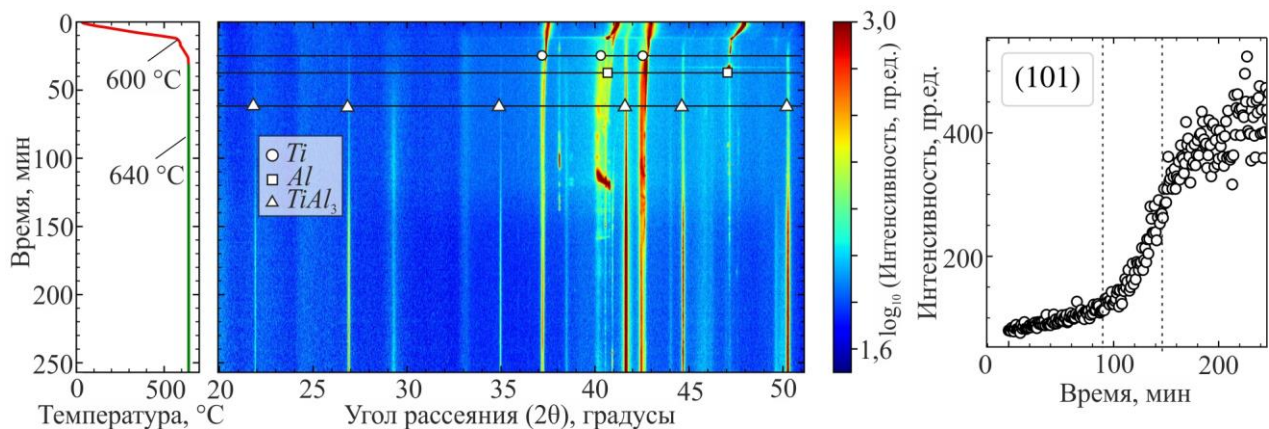


Рисунок 3 – Множество дифракционных картин, зафиксированных с использованием синхротронного излучения и представленных в виде цветной диаграммы в координатах «время –  $2\theta$ », и изменение интенсивности дифракционного максимума (101) триалюминид титана

В процессе отжига биметалла  $Al - Zr$  на межслойной границе формируется только фаза  $ZrAl_3$  ( $I4/mmm$ ) со структурой типа  $D0_{23}$ . Используя дифракцию синхротронного рентгеновского излучения и моделирование методом ТФП было установлено, что параметры элементарной ячейки и полной энергии триалюминид циркония немонотонно изменяются по толщине интерметаллидного слоя (рисунок 4). Участки триалюминид циркония, возникшие в начальные моменты времени и подвергнутые термическому воздействию в течение более длительного промежутка времени, характеризуются пониженной полной энергией, что объясняется протеканием

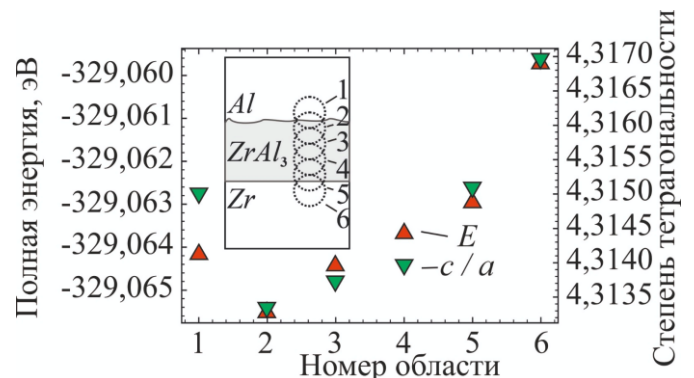


Рисунок 4 – Значения полной энергии ( $E$ ) и степени тетрагональности кристаллической решетки  $ZrAl_3$  ( $c/a$ )

релаксационных процессов (ростом зёрен и аннигиляцией дефектов кристаллического строения).

С использованием высокочувствительного метода рентгенофазовых исследований, основанного на дифракции синхротронного рентгеновского излучения, установлено, что после отжига заготовок  $Al - Nb$  и  $Al - Ta$  образуются фазы  $NbAl_3$  и  $TaAl_3$  (структура типа  $DO_{22}$ ). Иных соединений при отжиге данных биметаллов зафиксировано не было.

Особое внимание в работе уделялось формированию текстуры интерметаллидных слоёв. Данная задача решалась методом дифракции обратно-рассеянных электронов. Среди всех исследованных соединений наиболее явно выраженная текстура характерна для триалюминида титана. Из рисунка 5 следует, что в слое  $TiAl_3$  формируется текстура двух типов. Вблизи границы  $Ti - TiAl_3$  интерметаллидный слой растёт таким образом, что направление  $[001]$  ориентируется перпендикулярно пластинам алюминия и титана. Вблизи границы  $Al - TiAl_3$  перпендикулярными пластинам металлов являются направления семейства  $\langle 100 \rangle$  фазы  $TiAl_3$ . Для диффузионного слоя  $ZrAl_3$  также характерны два типа текстуры: направление  $[001]$  зёрен триалюминида циркония ориентировано перпендикулярно пластинам непрореагировавших металлов вблизи границы  $Al - ZrAl_3$ . В остальном объёме перпендикулярным металлическим пластинам является совокупность направлений  $\langle 100 \rangle$ . В интерметаллидах, соответствующих системам  $Al - Nb$  и  $Al - Ta$  (рисунок 6) явно выраженной текстуры не обнаружено.

При отжиге биметаллов  $Al - Nb$  и  $Al - Ta$

диффузионные процессы протекают медленно. При этом наиболее активные преобразования зафиксированы в пределах сильно деформированных зон и зон перемешивания материалов. Таким образом, объём зон, находящихся после сварки взрывом в неравновесном состоянии, играет важную роль в формировании интерметаллидов.

Анализ кинетики диффузионных процессов, происходящих во время отжига биметалла  $Al - Ti$ , показал, что стадия роста слоя  $TiAl_3$ , контролируемая химической реакцией, расширяется при более низких значениях температуры нагрева материала. Методом линейного регрессионного анализа определены значения энергии активации роста реакционных слоёв в сваренных взрывом биметаллах  $Al - Ti$  и  $Al - Zr$  (21,8 и 128,1 кДж/моль соответственно). При продолжительном отжиге интегральный коэффициент диффузии при температуре 630 °C в соединении  $TiAl_3$  равен  $1,3 \times 10^{-14}$  м<sup>2</sup>/с, а для соединения  $ZrAl_3$  его величина составляет  $3,1 \times 10^{-14}$  м<sup>2</sup>/с.

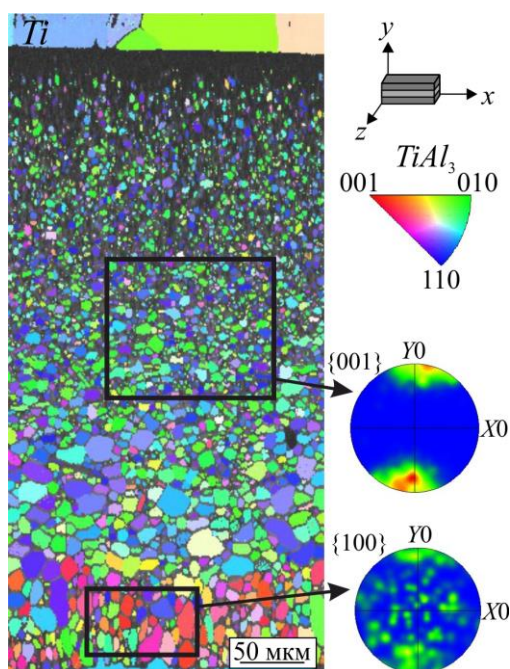


Рисунок 5 – IPF-карта, характеризующая распределение ориентировок зёрен в соединении  $TiAl_3$

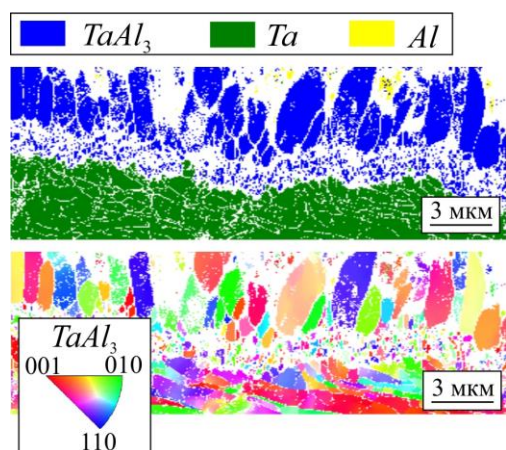


Рисунок 6 – Идентификация фаз на границе  $TaAl_3 - Ta$  и карта кристаллографических ориентировок (ДОРЭ анализ)

На основании проведенных исследований установлено, что в триалюминиде титана атомы алюминия диффундируют существенно быстрее атомов титана. Так, коэффициент диффузии алюминия больше коэффициента диффузии титана в 26 раз при температуре 570 °С и в 15 раз при температуре 630 °С. Установлено, что при температуре 630 °С и времени отжига 100 часов коэффициенты диффузии  $Al$  и  $Ti$  в соединении  $TiAl_3$  равны  $9,8 \times 10^{-15} \text{ м}^2/\text{с}$  и  $0,7 \times 10^{-15} \text{ м}^2/\text{с}$  соответственно.

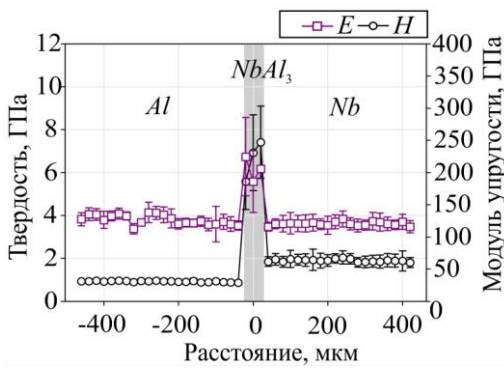
В четвертом разделе диссертационной работы представлены результаты анализа микромеханических свойств биметаллов до и после отжига. Зафиксированный экспериментально рост твердости вблизи межслойных границ сваренных взрывом заготовок связан с наклепом материалов, обусловленным их высокоскоростным соударением. Зоны перемешивания материалов характеризуются явно выраженной неоднородностью механических свойств. Существенные различия свойств связаны, в первую очередь, с локальной неоднородностью химического и фазового составов материала.

Для всех интерметаллидных прослоек, возникших в композитах, анализируемых в данной работе, характерно градиентное изменение показателей твердости. При

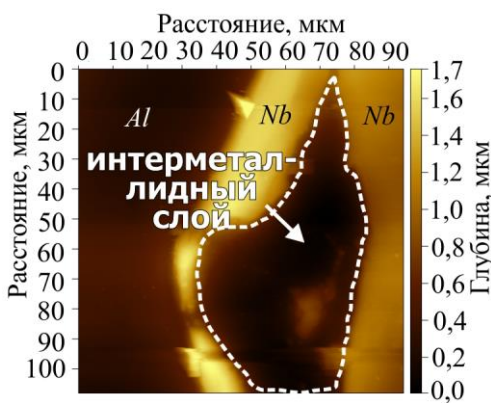
исследовании интерметаллидных слоев  $TiAl_3$  и  $ZrAl_3$  установлено, что в направлении от середины слоев к границам  $TiAl_3 - Ti$  и  $ZrAl_3 - Zr$  микротвердость материалов возрастает, что связано с существенным измельчением зеренной структуры вблизи пластин титана и циркония. Твердость соединений  $TiAl_3$  и  $ZrAl_3$  в этих зонах составляет 7...7,6 и 7,6...9 ГПа, а модуль упругости – 170 и 175 ГПа соответственно.

Триалюминиды, формирующиеся в биметаллах  $Al - Nb$  и  $Al - Ta$ , не образуют широких сплошных слоев при отжиге по указанным режимам (рисунок 7), что затрудняет определение их механических свойств. По данным проведенных измерений твердость соединений  $NbAl_3$  и  $TaAl_3$  составляет 5,6...7,4 и  $6,7 \pm 0,8$  ГПа, а модуль упругости –  $205,3 \pm 37,6$  и  $197,4 \pm 10,4$  ГПа соответственно. Значения модуля упругости интерметаллидов, зафиксированные методом инструментального наноиндентирования, соответствуют теоретическим данным.

Трещиностойкость исследуемых в работе интерметаллидов оценивали методом Палмквиста. Установлено, что для алюминидов, возникших при отжиге биметаллов  $Al - Ti$  и  $Al - Zr$ , трещиностойкость составляет 1,83 и 1,46  $\text{МПа} \times \sqrt{\text{м}}$  соответственно. В присутствии дефектов сплошности трещиностойкость интерметаллидов, сформированных при отжиге биметаллических заготовок, снижается до  $1 \text{ МПа} \times \sqrt{\text{м}}$ .



а



б

Рисунок 7 – Значения твердости и модуля упругости интерметаллидного слоя, возникшего в процессе отжига биметалла  $Al - Nb$  в течение 100 часов при 610 °С. а – результаты анализа отожженного биметалла; б – типичное изображение отожженного образца, полученное методом сканирующей зондовой микроскопии

При испытании интерметаллидных слоев  $TiAl_3$  на изнашивание зафиксирована анизотропия триботехнических свойств. Объем материала, изношенного индентором, перемещающимся поперек интерметаллидных слоев, примерно в два раза меньше по сравнению с его движением параллельно интерметаллидному слою (рисунок 8). Анизотропия триботехнических свойств исследуемого материала является следствием кристаллографической текстуры, формирующейся в процессе роста интерметаллидного слоя.

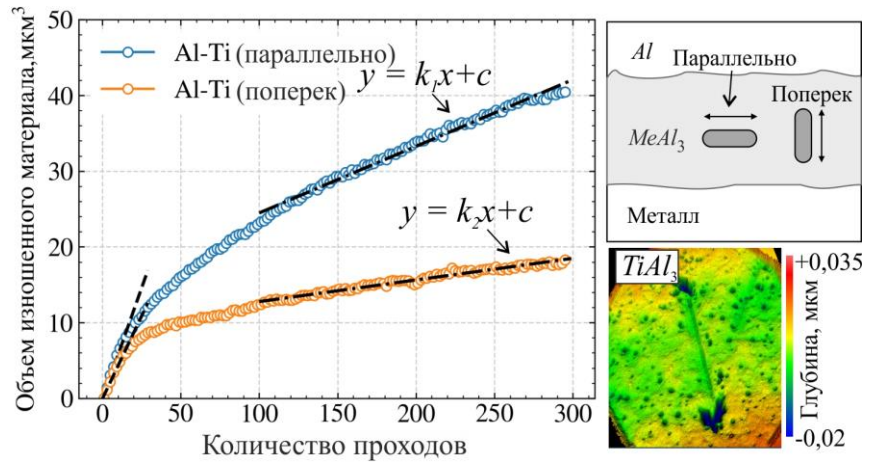


Рисунок 8 – Результаты триботехнических испытаний слоя  $TiAl_3$

В пятом разделе описываются особенности формирования точечных дефектов и механизмы диффузии в исследуемых в работе триалюминиде, выявленные с использованием расчётных методов. Для обоснования механизмов миграции атомов в растущих интерметаллидных слоях использовались как анализ особенностей кристаллических структур (ближайшее окружение разных атомов, длина межатомных связей и т.д.) (рисунок 9), так и методы, основанные на математическом моделировании.

Принципиальное влияние на скорость протекания диффузионных процессов оказывает энергия формирования точечных дефектов – вакансий, межузельных атомов и антиструктурных дефектов. Экспериментальные методы оценки энергии формирования точечного дефекта являются чрезвычайно трудоёмкими. По этой причине отмеченный показатель оценивали по результатам квантово-химического моделирования. С использованием теории функционала плотности показано, что наименьшая энергия формирования характерна для вакансий, расположенных на позициях  $Al1$  ( $V_{Al1}$ ). При этом энергия формирования вакансий на месте  $Al1$  в соединении  $ZrAl_3$  ( $D0_{23}$ ) существенно ниже, чем в фазах  $TiAl_3$  и  $NbAl_3$  ( $D0_{22}$ ). Низкая энергия формирования вакансий в триалюминиде циркония является фактором, позволяющим объяснить быстрый рост данного слоя при отжиге сваренных взрывом заготовок.

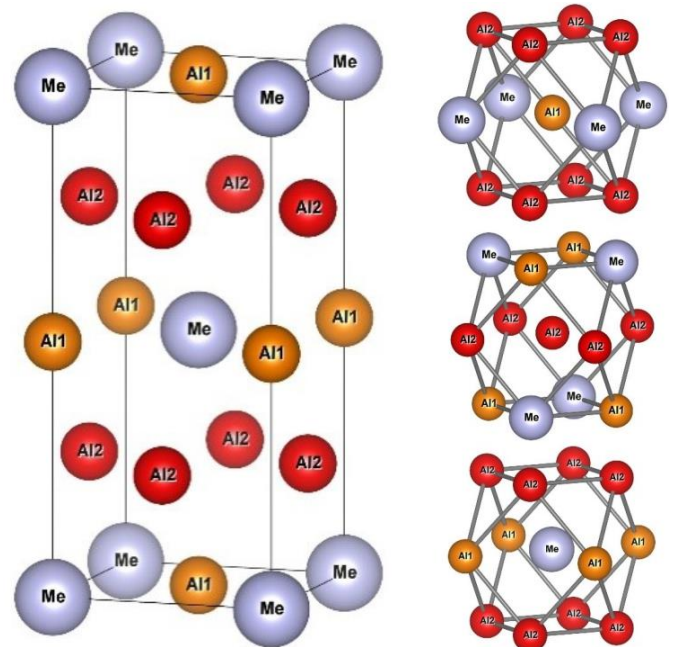


Рисунок 9 – Кристаллическая структура  $D0_{22}$  и локальное окружение различных атомов

Скорость протекания диффузионных процессов в значительной степени определяется вероятностью обмена местами вакансии и точечного дефекта, которая, в

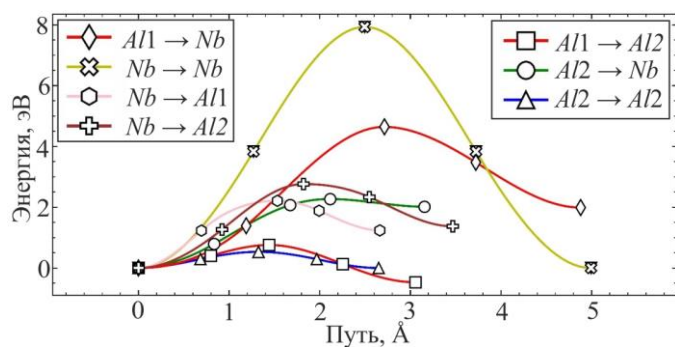


Рисунок 10 – Активационные барьеры некоторых типичных скачков атомов в соединении  $NbAl_3$ , рассчитанные с использованием метода упругой ленты

являются более энергозатратными. Таким образом, несмотря на то что алюминий образует «пронизывающую» подрешетку и имеет возможность диффундировать по вакансионному механизму в любом направлении, частота скачков в направлениях, параллельных (001), будет существенно выше, чем скачков в направлениях, ориентированных перпендикулярно этим плоскостям. Результаты расчетов свидетельствуют о том, что скачки на место следующего ближайшего соседа настолько энергозатратны, что такой механизм миграции атомов можно практически полностью исключить из рассмотрения. Данный факт имеет особое значение при анализе процесса диффузии титана, циркония и ниобия в соответствующих триалюминидов. Фактически диффузия этих атомов путем перескоков внутри своей собственной подрешетки невозможна и для реализации процесса необходимо рассматривать другие механизмы.

В соответствии с проведенными расчетами энергия формирования межузельного атома в триалюминидов достаточно велика. Следует отметить также, что энергия формирования дефекта в виде атома алюминия, расположенного в межузлии, значительно ниже, чем энергия формирования дефекта с атомом металла (то есть титаном, ниобием или цирконием) в аналогичных межузлиях.

Энергия формирования дефекта ( $E^f$ ) в виде атома алюминия, замещающего атом металла  $E^f[Al_{Me}]$  (где  $Me = Ti, Nb, Zr$ ) во всех рассматриваемых соединениях существенно выше, чем значения энергии дефекта в виде атома металла  $Me$ , находящегося в любой позиции алюминия ( $E^f[Me_{Al}]$ ). Следует отметить, что величины  $E^f[Ti_{Al1}]$  и  $E^f[Ti_{Al2}]$  существенно ниже, чем значения энергии формирования аналогичных дефектов в триалюминидов ниобия и циркония.

Статистические закономерности миграции атомов алюминия в триалюминидов титана по вакансионному механизму оценивались с использованием кинетического метода Монте-Карло (КМК). Были выявлены следующие особенности. Во-первых, на каждые 10000 тысяч скачков атомов среднее количество скачков типа  $Al2 \rightarrow V_{Al1}$  и  $Al1 \rightarrow V_{Al2}$  составляет лишь 7,3 и 6,8 штук соответственно (рисунок 11). Полученные значения друг другу очень близки, несмотря на то что энергетические барьеры и константы скоростей данных процессов заметно отличаются. Так, при 903 К (630 °С) константа скорости для перемещения типа  $Al1 \rightarrow V_{Al2}$  в 25 раз меньше, чем для перемещения  $Al2 \rightarrow V_{Al1}$ . Однако, поскольку позиция  $Al1$  окружена лишь атомами  $Al2$ , то каждое перемещение  $Al2 \rightarrow V_{Al1}$  в итоге заканчивается перемещением  $Al1 \rightarrow V_{Al2}$ . Во-вторых, основную часть перемещений (в среднем 9985,8 из 10000) составляют скачки типа  $Al2 \rightarrow V_{Al2}$ , т.е. перемещения в направлениях, параллельных плоскости

свою очередь, зависит от величины потенциального барьера такого процесса. Для численной оценки энергии потенциального барьера в работе использовался метод упругой ленты (рисунок 10). Установлено, что перескок алюминия на место ближайшего соседа является наименее энергозатратным процессом. Согласно проведенным расчетам, наименьшая энергия активации характерна для скачков типа  $Al2 \rightarrow V_{Al2}$ . Перемещения  $Al1 \rightarrow V_{Al2}$  и  $Al2 \rightarrow V_{Al1}$

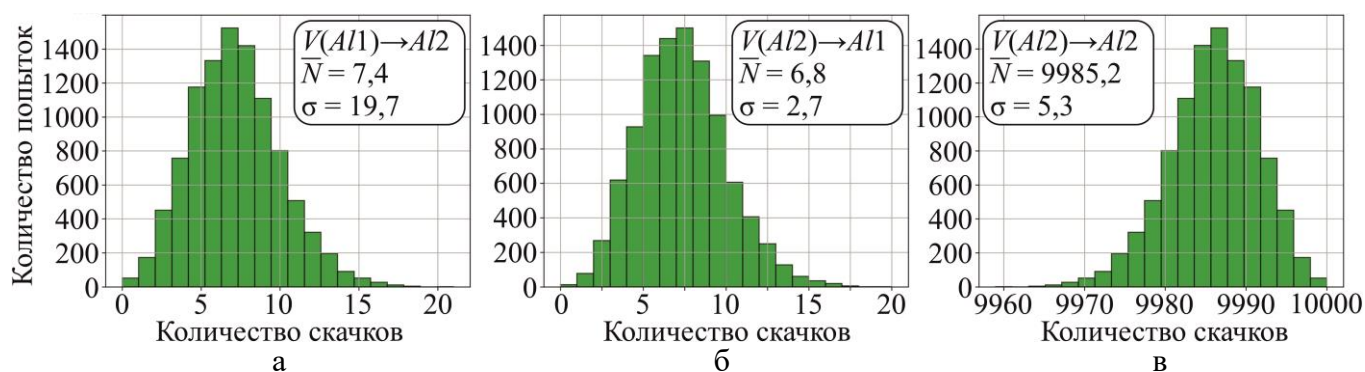


Рисунок 11 – Гистограммы частот различных типов перемещений вакансий в  $TiAl_3$ , полученные с использованием КММК-моделирования

(001) (рисунок 11 в). Таким образом, диффузия алюминия в  $TiAl_3$  по вакансионному механизму крайне анизотропна. В-третьих, несмотря на существенную разницу (более, чем в 1000 раз) в количестве скачков в направлениях, параллельных и перпендикулярных плоскостям (001), среднеквадратичное смещение вакансии от начальной позиции в направлениях вдоль осей  $a$  или  $b$  элементарной ячейки отличается от смещения вдоль оси  $c$  всего в 24 раза.

Расчётное значение коэффициента самодиффузии алюминия в решётке триалюминида титана составляет  $\sim 5 \times 10^{-16} \text{ м}^2/\text{с}$ , что примерно на два порядка ниже значений, зафиксированных экспериментальными методами в разделе 3. Вероятно, это обусловлено реализацией в триалюминиде титана дополнительных механизмов диффузии этого элемента.

Метод упругой ленты, как и кинетический метод Монте-Карло, плохо подходят для анализа межузельного механизма диффузии. Особенности реализации данного механизма в триалюминиде титана исследовались с использованием метода молекулярной динамики. Установлено, что скачки алюминия по межузельному механизму, как правило, осуществляются в направлении [001]. Движение атомов алюминия в данном направлении затрудняется атомами титана. Анализ результатов молекулярно-динамического моделирования позволил предложить механизм, позволяющий межузельным атомам алюминия обходить атомы титана и продолжать двигаться вдоль направления [001] (рисунок 12).

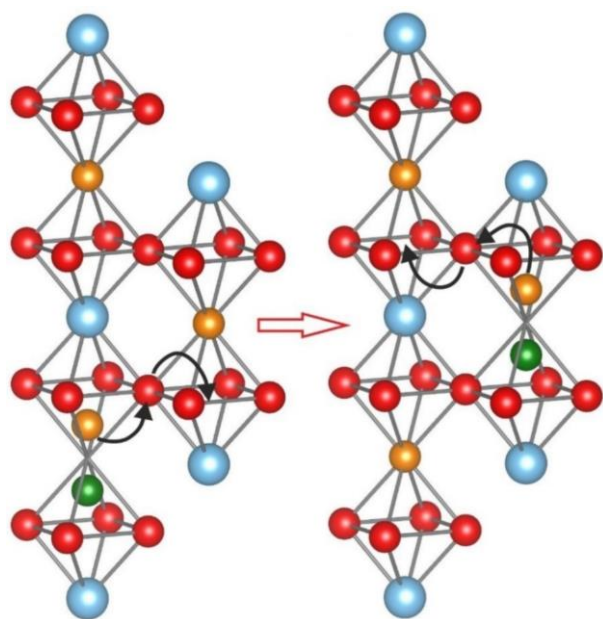


Рисунок 12 – Перемещение атома внедрения в структуре интерметаллида

узельным атомам алюминия обходить атомы титана и продолжать двигаться вдоль направления [001] (рисунок 12). На первом этапе дополнительный атом алюминия, попадающий в октаэдрическую пору, приводит к формированию двойного дефекта в виде гантели, как. Далее, один из атомов, входящих в «гантель», выталкивает атом алюминия  $A11$  в октаэдрическое межузелье, находящееся в соседней цепочке и сам занимает его позицию. При этом конфигурация атомов в первом межузелье выравнивается. На следующем этапе двойной дефект в виде гантели формируется в соседней цепочке пор. Через какое-то время один из атомов, входящих в цепочку, выталкивает атом алюминия, находя-

щийся в позиции  $Al1$ , и приводит к формированию двойного дефекта в исходной цепочке октаэдрических пор. Таким образом, миграцию алюминия по октаэдрическим пустотам в структуре соединения  $TiAl_3$  в направлении  $[001]$  можно представить в виде перемещения двойного дефекта от одной цепочки к другой. Образование дефекта типа «гантели» рационально с энергетической точки зрения, т.к. позволяет уменьшить упругую деформацию системы за счет более эффективного использования объема пустот.

**Шестой раздел** работы посвящен применению анализируемых материалов. Практическое использование результатов, полученных сваркой взрывом разнородных материалов и последующим отжигом сформированных заготовок, рационально при разработке слоистых металл-интерметаллидных композитов для авиа- и ракетостроения, энергетики, нефтехимической промышленности. Обоснованные в работе представления о явлениях, сопутствующих процессам диффузии в интерметаллидах, имеют не только фундаментальное, но также и прикладное значение. Применяя расчетные методы, можно существенно сократить процесс разработки алюминидов, модифицированных дополнительными элементами. С целью проведения расчетов энергии формирования точечных дефектов, моделирования диффузионных процессов, а также проведения профильного анализа, были разработаны четыре программы для электронно-вычислительных машин (свидетельства о государственной регистрации № 2022681147, 2023660574, 2023660573, 2023660572).

Результаты экспериментальных исследований композитов переданы в Центральный аэрогидродинамический институт имени профессора Н.Е. Жуковского. Материалы диссертационной работы используются в учебном процессе НГТУ при реализации курсов, связанных с созданием композитных материалов, исследованием процессов диффузии, применением методов рентгеновского анализа.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

При выполнении диссертационной работы проведен анализ структуры, фазового состава, а также механизмов роста интерметаллидных слоев, возникающих при термической обработке сваренных взрывом биметаллических заготовок из технически чистого алюминия в сочетании с титаном, цирконием, ниобием и танталом. Проведена оценка твердости и трещиностойкости полученных в работе интерметаллидов, изучено их поведение в условиях сухого трения скольжения. Основные выводы по работе заключаются в следующем:

1. В процессе отжига биметаллических соединений типа  $Al - X$ , где ( $X = Ti, Zr, Nb, Ta$ ) получены интерметаллидные слои в виде триалюминидов металлов. Используя методы структурного анализа исследованы особенности их зарождения и последующего роста. Методами математического моделирования изучены особенности формирования и миграции точечных дефектов в анализируемых триалюминидных соединениях.

2. С использованием высокочувствительного метода рентгенофазовых исследований, основанного на дифракции синхротронного излучения, выявлен фазовый состав интерметаллидных слоев, возникших при отжиге сваренных взрывом биметаллов. Интерметаллиды, образованные при отжиге заготовок  $Al - Nb$  и  $Al - Ta$ , идентифицированы как алюминиды  $NbAl_3$  и  $TaAl_3$  (структура типа  $D0_{22}$ ). Иных соединений при отжиге данных биметаллов зафиксировано не было. Результатом отжига биметалла  $Al - Zr$  является только фаза  $ZrAl_3$  со структурой типа  $D0_{23}$ . Структурно-фазовые



исследования отожжённого композита  $Al - Zr$  показали, что значения периодов кристаллической решетки соединения  $ZrAl_3$  изменяются по толщине интерметаллидного слоя. Участки фазы  $ZrAl_3$ , возникшие в начальные моменты времени и подвергнутые термическому воздействию в течение более длительного промежутка времени характеризуются пониженной энергией основного состояния, что может быть связано с развитием релаксационных процессов (ростом зёрен и аннигиляцией дефектов кристаллического строения).

3. Отжиг сваренного взрывом композита  $Al - Ti$  сопровождается формированием двух модификаций триалюминид титана –  $TiAl_3$  (структура типа  $D0_{22}$  и сверхструктура на его основе  $Ti_8Al_{24}$ , которую следует рассматривать как одну из длиннопериодных структур в соединениях  $Ti_{1+x}Al_{3-x}$ ). Образование сверхструктуры может быть обусловлено недостатком алюминия для построения стехиометрического триалюминид титана. Согласно данным рентгенофазового анализа, объёмная доля соединения  $Ti_8Al_{24}$  повышается по мере приближения к границе раздела  $Ti$  - интерметаллид. При отжиге биметаллов  $Al - Zr$ ,  $Al - Ta$ ,  $Al - Nb$  других типов интерметаллидов кроме  $ZrAl_3$ ,  $TaAl_3$  и  $NbAl_3$  не зафиксировано.

4. Исследования интерметаллидного слоя, формирующегося при отжиге биметалла  $Al - Ti$ , методом дифракции синхротронного рентгеновского излучения в режиме *in-situ* позволили выявить момент зарождения и стадии роста триалюминид титана. Появление дифракционных максимумов триалюминид титана зафиксировано при температуре  $\sim 590$  °C (через 16 минут после начала нагрева). Рост интерметаллидного слоя в процессе изотермической выдержки при 640 °C может быть разделен на три этапа. Для первого этапа длительностью  $\sim 100$  минут характерна малая скорость роста интерметаллида. Второй этап отличается быстрым ростом всех дифракционных максимумов триалюминид титана и длится  $\sim 60$  минут. Скорость роста интерметаллида на третьем этапе контролируется диффузией атомов через промежуточный интерметаллидный слой при достижении им критической толщины.

5. С использованием метода дифракции обратно рассеянных электронов изучены особенности формирования текстуры в интерметаллидном слое, образующемся при отжиге биметалла  $Al - Ti$ . В триалюминиде титана зафиксирована волокнистая текстура двух типов, обусловленная анизотропией процесса диффузии. Вблизи границы  $Ti - TiAl_3$  возникает волокнистая текстура с направлением  $[001]$  интерметаллидной фазы, перпендикулярным межслойной границе биметалла. Второй тип волокнистой текстуры  $\langle 100 \rangle$  зафиксирован вблизи границы  $Al - TiAl_3$ . Для диффузионного слоя  $ZrAl_3$  характерны два типа текстуры: в направлении  $[001]$  вблизи границы  $Al - ZrAl_3$  и в направлениях  $\langle 100 \rangle$  в остальном объеме интерметаллида. Оба типа текстуры могли быть сформированы в процессе роста интерметаллидной прослойки. В интерметаллидах, возникших при отжиге биметаллических образцов  $Al - Nb$  и  $Al - Ta$ , текстура не обнаружена.

6. Методом линейного регрессионного анализа определены значения энергии активации роста реакционных слоев в сваренных взрывом биметаллах  $Al - Ti$  и  $Al - Zr$  (21,8 и 128,1 кДж/моль соответственно). Интегральный коэффициент взаимной диффузии, определенный по результатам отжига длительностью 100 часов при 630 °C равен  $1,29 \times 10^{-14}$  м<sup>2</sup>/с для  $TiAl_3$  и  $3,14 \times 10^{-14}$  м<sup>2</sup>/с для  $ZrAl_3$ . Коэффициент самодиффузии атомов алюминия в соединении  $TiAl_3$  больше, чем атомов титана в 26 раз при отжиге в течение 100 часов при 570 °C. При повышении температуры отжига

до 630 °С коэффициенты самодиффузии различаются в 15 раз ( $9,838 \times 10^{-15}$  м<sup>2</sup>/с и  $0,674 \times 10^{-15}$  м<sup>2</sup>/с для *Al* и *Ti* соответственно).

7. Максимальный уровень микротвердости в интерметаллидных слоях, возникших в процессе продолжительного отжига биметаллических заготовок *Al - Ti* и *Al - Zr* (7,6 и 9 ГПа соответственно), зафиксирован вблизи границ раздела *TiAl<sub>3</sub> - Ti* и *ZrAl<sub>3</sub> - Zr*. Рост микротвердости триалюминидов титана и циркония обусловлен существенным измельчением их зеренной структуры вблизи пластин титана и циркония. Модуль упругости соединений *TiAl<sub>3</sub>* и *ZrAl<sub>3</sub>* составляет 170 и 175 ГПа соответственно. Твёрдость соединений *NbAl<sub>3</sub>* и *TaAl<sub>3</sub>* достигает 7,4 и 6,7 ГПа, а модуль упругости – 205 и 197 ГПа соответственно.

8. Используя метод Палмквиста проведены испытания на трещиностойкость интерметаллидных слоёв, образующихся при отжиге сваренных взрывом заготовок. Трещиностойкость триалюминидов титана и циркония составляет  $1,83 \text{ МПа} \times \sqrt{\text{м}}$  и  $1,46 \text{ МПа} \times \sqrt{\text{м}}$  соответственно. В присутствии дефектов сплошности величина этого параметра снижается до  $1 \text{ МПа} \times \sqrt{\text{м}}$ . С целью снижения степени охрупчивания целесообразно проведение дополнительных исследований по выбору рациональных подходов к проблеме модифицирования материалов.

9. Результаты испытаний на изнашивание свидетельствуют о проявлении анизотропии триботехнических свойств интерметаллидных слоев *TiAl<sub>3</sub>*. Объем материала, изношенного индентором, перемещающимся поперек интерметаллидных слоев, примерно в два раза меньше по сравнению с его движением параллельно интерметаллидному слою. Анизотропия триботехнических свойств исследуемого материала является следствием кристаллографической текстуры, формирующейся в процессе роста интерметаллидного слоя.

10. Используя моделирование диффузионных процессов методом ТФП, определены значения энергии формирования точечных дефектов в триалюминиде титана, ниобия и циркония. Фактором, позволяющим объяснить быстрый рост триалюминид циркония, является высокая концентрация вакансий, содержащихся в этой фазе. С использованием метода упругой ленты рассчитаны значения энергии потенциальных барьеров для различных типов скачков атомов в триалюминиде *TiAl<sub>3</sub>*, *NbAl<sub>3</sub>* и *ZrAl<sub>3</sub>*. Показано, что перескок алюминия «на место ближайшего соседа» является одним из наиболее предпочтительных механизмов диффузии.

11. Сопоставление результатов моделирования диффузионных процессов кинетическим методом Монте-Карло с данными экспериментальных исследований свидетельствует о проявлении в триалюминиде титана наряду с механизмом скачка на вакантное место ближайшего соседа иных вариантов диффузии атомов алюминия. С использованием метода молекулярной динамики изучен процесс межузельной диффузии алюминия в решётке триалюминиде титана. В соответствии с проведенными расчетами, внедрение атома алюминия в межузельное пространство триалюминиде титана приводит к образованию в октаэдрических порах двойного дефекта в форме гантели. Межузельная диффузия алюминия в триалюминиде титана может рассматриваться как эстафетное перемещение двойного дефекта от одной цепочки октаэдрических пор к другой. Формирование в слое триалюминиде титана волокнистой текстуры [001] объясняется межузельным механизмом диффузии алюминия.

12. Результаты экспериментальных исследований композиционных материалов, упрочненных интерметаллидными прослойками, переданы в ЦАГИ имени профессора Н.Е. Жуковского. С целью проведения расчетов параметров диффузии, а также выполнения профильного анализа дифрактограмм разработаны четыре программы для электронно-вычислительных машин. Полученные в работе результаты используются в учебном процессе НГТУ при реализации курсов «Композиционные материалы», «Диффузия в металлах и сплавах» и «Применение дифракции синхротронного излучения в материаловедении».

### **Рекомендации и перспективы дальнейшей разработки темы**

Представленные в диссертационной работе результаты исследований позволяют рекомендовать разработанные материалы для производства легких конструкций в разных отраслях промышленности. В качестве перспективного направления для дальнейшего развития темы исследования имеет смысл рассматривать получение многослойных металл-интерметаллидных композитов на основе алюминия с модифицированной структурой интерметаллидов. Следует ожидать, что изменение кристаллического строения фаз, образующихся в процессе диффузионного отжига, позволит снизить анизотропию свойств и получать СММК материалы с более благоприятным сочетанием механических и эксплуатационных свойств.

### **Список основных научных публикаций по теме диссертации:**

#### Статьи в рецензируемых научных изданиях, входящих в список ВАК

1. Эмурлаева Ю. Ю. Структура и фазовый состав термически обработанного биметалла *Al - Zr* / Ю.Ю. Эмурлаева, М.Н. Хомяков, Н.С. Александрова, К.И. Эмурлаев, И.А. Батаев // *Металловедение и термическая обработка металлов*. – 2023. – № 7. – С. 49-58.

2. Эмурлаева Ю. Ю. Оценка энергии формирования вакансий в ОЦК-, ГЦК- и ГПУ-металлах с использованием теории функционала плотности / Ю.Ю. Эмурлаева, Д. В. Лазуренко, З. Б. Батаева, И. Ю. Петров, Г. Д. Довженко, Л. Д. Макагон, М.Н. Хомяков, К.И. Эмурлаев, И.А. Батаев // *Обработка металлов (технология, оборудование, инструменты)*. – 2023. – № 2(25). – С. 104-116.

3. Эмурлаева Ю. Ю. Особенности роста интерметаллидных фаз в процессе отжига никель-алюминиевых композитов / Ю. Ю. Эмурлаева, П. А. Рябинкина, Д. В. Лазуренко, А. А. Батаев // *Металловедение и термическая обработка металлов*. – 2021. – № 12 (798). – С. 27-34.

4. Батаев И. А. Большие пластические деформации и высокие скорости охлаждения на границе свариваемых взрывом материалов / И. А. Батаев, И. В. Иванов, Ю. Н. Малютина, Ю. Ю. Эмурлаева, К. И. Эмурлаев // *Металловедение и термическая обработка металлов*. – 2018. – № 10 (760). – С. 60-65.

#### Статьи в рецензируемых научных изданиях, индексируемых в базах данных Web of Science / Scopus

5. *Emurlaeva Y. Y. Structural Transformations at the Interface of Explosively Welded Al and Ti: Experimental Research and Numerical Simulation / Y. Y. Emurlaeva, N. S. Alexandrova, K. I. Emurlaev // Key Engineering Materials*. – 2022. – Vol. 910: *Modern Trends in Manufacturing Technologies and Equipment (ICMTMTE - 2021): 5 inter. conf., Sevastopol, 6-10 Sept. 2021*. – P. 1056-1062.

6. *Ogneva T. S. Effect of sintering pressure and temperature on structure and properties of Ni-Al metal-intermetallic composites produced by SPS / T. S. Ogneva, I. A. Bataev, V. I. Mali, D. V. Lazurenko, A. I. Popelyukh, Y. Y. Emurlaeva, A. A. Bataev, S. Tanaka, K. D. Egoshin [et al.]. // Materials Characterization*. – 2021. – Vol. 180. – Art. 111415 (12p.).

7. **Emurlaeva Y. Y.** *On the texture and superstructure formation in Ti–TiAl<sub>3</sub>–Al MIL composites* / **Y. Y. Emurlaeva, I. V. Ivanov, D. V. Lazurenko, T. S. Ogneva, P. Chen, Q. Zhou, A. A. Bataev, A. A. Ruktuev, S. Tanaka, I. A. Bataev** // *Intermetallics*. – 2021. – Vol. 135. – Art. 107231 (12 p.).

8. **Emurlaeva Y. Y.** *SPH simulation of plastic deformation in high velocity impact welding process of 6061-T6 alloy plates* / **Y. Y. Emurlaeva, I. A. Bataev, N. S. Aleksandrova** // *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. – 2020. – Vol. 795: *International Conference on Mechanical Engineering and Modern Technologies (MEMT2019), Tomsk, 28 Oct. - 1 Nov. 2019*. – Art. 012003 (7 p.).

9. **Emurlaeva Y. Y.** *Welding window: Comparison of Deribas' and Wittman's approaches and SPH simulation results [Electronic resource]* / **Y. Y. Emurlaeva, I. A. Bataev, Q. Zhou, D. V. Lazurenko, I. V. Ivanov, P. A. Riabinkina, S. Tanaka, P. Chen** // *Metals*. – 2019. – Vol. 9, iss. 12. – Art. 1323 (17 p.).

10. **Emurlaeva Y. Y.** *Estimation of cooling process at different zones of explosively welded composites by numerical simulation* / **Y. Y. Emurlaeva, I. V. Ivanov, E. I. Tkachenko, E. A. Rudenya, I. A. Bataev** // *AIP Conference Proceedings*. – 2018. – Vol. 2051. – Art. 020074 (4 p.).

11. **Emurlaeva Y. Y.** *Joining of thin plates by high velocity impact welding: Experimental study and SPH simulation* / **Y. Y. Emurlaeva, I. A. Bataev, S. Tanaka, I. V. Ivanov, E. I. Tkachenko** // *AIP Conference Proceedings*. – 2018. – Vol. 2051. – Art. 020073 (4 p.).

#### Программы для ЭВМ:

1. Свидетельство 2022681147. Мультипрофильный спектральный анализ с использованием симметричных алгебраических функциональных зависимостей: программа для ЭВМ / Эмурлаев К. И., Иванов И. В., Эмурлаева Ю. Ю.; правообладатель ФГБОУ ВО «Новосибирский государственный технический университет». № 2022681018; заявл. 10.11.2022; опубл. 10.11.2022, Бюл. № 11. 5 Кб.

2. Свидетельство 2023660572. Моделирование скачков атомов в триалюминиде переходных металлов кинетическим методом Монте-Карло: программа для ЭВМ / Эмурлаева Ю. Ю., Батаев И. А.; правообладатель ФГБОУ ВО «Новосибирский государственный технический университет». № 2023660051; заявл. 23.05.2023; опубл. 23.05.2023, Бюл. № 6. 5 Кб.

3. Свидетельство 2023660573. Обработка результатов определения энергии основного состояния вещества из первых принципов и вычисление энергии формирования точечных дефектов: программа для ЭВМ / Эмурлаева Ю. Ю., Александрова Н. С., Эмурлаев К. И.; правообладатель ФГБОУ ВО «Новосибирский государственный технический университет». № 2023660052; заявл. 23.05.2023; опубл. 23.05.2023, Бюл. № 6. 5 Кб.

4. Свидетельство 2023660574. Поточное определение энергии основного состояния вещества с использованием теории функционала плотности: программа для ЭВМ / Эмурлаева Ю. Ю., Александрова Н. С., Эмурлаев К. И.; правообладатель ФГБОУ ВО «Новосибирский государственный технический университет». № 2023660053; заявл. 23.05.2023; опубл. 23.05.2023, Бюл. № 6. 5 Кб.

Отпечатано в типографии Новосибирского  
государственного технического университета  
630073, г. Новосибирск, пр. К. Маркса, 20,  
Тел./факс: (383)346-08-57

формат 60x84 1/16, объем 1,25 п.л., тираж 100 экз.  
заказ № 2269 подписано в печать 19.07.2023 г.