

## Молекулярно-динамическое исследование структурно-фазовых превращений при СВ-синтезе алюминидов никеля в матричных структурах с однородным составом наночастиц композитной структуры «ядро-оболочка»

В.И. Иордан,<sup>1,\*</sup> И.А. Шмаков<sup>1,†</sup>

<sup>1</sup>Алтайский государственный университет, Институт цифровых технологий, электроники и физики, кафедра вычислительной техники и электроники  
Россия, 656049, Барнаул, пр-т Ленина, д. 61

(Поступила в редакцию 15.08.2024; подписана в печать 21.10.2024)

С использованием программных пакетов LAMMPS и OVITO получены результаты компьютерного моделирования СВ-синтеза алюминидов никеля в модельных матричных структурах с однородным составом композитных наночастиц «ядро-оболочка». Для составов из Ni@Al-наночастиц и Al@Ni-наночастиц исследовались по два варианта межэлементных связей (неконтактирующие и контактирующие между собой наночастицы), для которых приведены карты распознавания интерметаллических фаз, синтезируемых в наночастицах в последовательные моменты времени. В двух структурах с контактирующими наночастицами в процессе СВС изменяется их сферическая форма, а для состава наночастиц Al@Ni обнаружен резкий скачок температуры до температуры перитектического превращения 1669 К. При этом происходит структурный фазовый переход с быстрой кристаллизацией фазы Ni<sub>3</sub>Al из расплава и рекристаллизацией фазы NiAl в фазу Ni<sub>3</sub>Al.

PACS: 61.50.Ks, 61.50.Ah, 65.80.+n, 81.20.Ka

УДК: 538.9, 536.4, 544.4, 620.3

Ключевые слова: СВ-синтез, структурно-фазовые превращения, алюминиды никеля, наночастица «ядро-оболочка», метод молекулярной динамики.

### ВВЕДЕНИЕ

Одной из главных задач современного материаловедения является создание функциональных материалов и покрытий, обладающих заданными физико-химическими свойствами и эффективными эксплуатационными характеристиками. Среди технологических методов создания таких материалов особое место занимает самораспространяющийся высокотемпературный синтез (СВС), для которого характерно значительное тепловыделение в тонком слое, в котором происходит экзотермическая реакция горения реагентов смеси (порошки металлов, тонкие пленки, и т.д.), с последующим распространением волны горения в объеме смеси [1]. На образование конечных продуктов СВ-синтеза влияет множество факторов, например, стехиометрическое соотношение и дисперсность компонентов смеси, начальная температура прогрева смеси и др. Для бинарных гетерогенных систем, таких как Ni–Al и многих других, особенности структурной макрокинетики СВС уже достаточно хорошо изучены [1–3], однако далеко не все факторы и механизмы протекания реакции СВС, приводящие к этим особенностям, нашли свое объяснение в теоретическом аспекте изучения физико-химического взаимодействия реагентов в ходе реакции СВС.

Кинетика горения на макроскопическом уровне гетерогенности диктуется и формируется процессами, происходящими в микрогетерогенной структуре волны го-

рения. Тем самым, многомасштабный характер гетерогенности СВ-синтеза определяется влиянием процессов, происходящих на нано-, микро- и мезоуровнях структурной и функциональной иерархии гетерогенных систем, на процессы, происходящие на ее макроуровне и, тем самым, позволяет точнее предсказывать структуру и свойства конечных продуктов СВС. Другими словами, структурная нано- и микрокинетика СВ-синтеза, развивающаяся в локальных нано- и микрообъемах реакционной среды, во-многом участвует и формирует особенности структурной макрокинетики СВС в макрообразцах реагирующей среды. В последние 15 лет появилось уже немалое количество научных публикаций, посвященных моделированию процесса СВ-синтеза интерметаллических соединений в нанокристаллических композитных структурах. В качестве примеров можно выделить следующие работы по моделированию СВС: в слоистых [4–7] и матричных композитах [8], а также в наночастицах с композитной структурой «ядро-оболочка», например, в работах [9, 10]. В работе [9] варьировались стехиометрические соотношения атомов Ni и Al в наночастицах и размеры наночастиц (от 5 до 10 нм). Кроме того, производился ступенчатый нагрев наночастиц от 0.1 К до 2500 К с шагом в 100 К и удержанием температуры на каждой температурной «ступеньке» в течение 0.5 нс. Такой процесс ступенчатого нагрева подобен процессу «температурного отжига» в управляемом режиме синтеза интерметаллических фаз, а не в режиме самопроизвольно распространяющегося процесса СВС (моделируемого авторами в данной работе).

Цель данной работы состояла в исследовании структурно-фазовых превращений, происходящих при СВ-синтезе алюминидов никеля в четырех модельных

\* jordan@phys.asu.ru

† ihammers.sia@gmail.com

матричных структурах, каждая из которых характеризуется однородным составом структурных элементов, являющихся одинаковыми наночастицами с композитной структурой «ядро-оболочка» (см. ниже рис. 1). Исследование производилось с использованием средств компьютерного молекулярно-динамического моделирования (МД-моделирования) в виде программных пакетов LAMMPS [11] и OVITO [12] с учетом параллельных вычислений, а также собственных программных разработок авторов статьи [13, 14].

### 1. ОПИСАНИЕ МАТРИЧНЫХ СТРУКТУР И ЭТАПОВ МД-МОДЕЛИРОВАНИЯ СВС

Моделирование СВС с помощью пакета LAMMPS, основанного на методе молекулярной динамики (МД-методе), поддерживает режим параллельных вычислений в рамках архитектуры вычислительной системы SM-MIMD: передача сообщений между узлами вычислительной системы с распределенной памятью производится под управлением интерфейса MPI, а расчёты на каждом узле (с разделяемой памятью) — под управлением интерфейса OpenMP (что позволяет в некоторых случаях дополнительно ускорить вычисления). В качестве межатомного потенциала взаимодействия был выбран потенциал в «модели погружённого атома» (embedded atom model, EAM) от 2009 г. [15].

В работе рассмотрены четыре модельные матричные структуры, каждая из которых характеризуется однородным составом структурных элементов, являющихся одинаковыми сферическими наночастицами с композитной структурой «ядро-оболочка» (см. рис. 1).

На рис. 1 показаны схематические изображения вертикальных плоских сечений четырех матричных структур, в каждой из которых одинаковые наночастицы образуют трехмерную кубическую структуру заполнения объема исследуемого образца материала (в каждой из структур по 27 наночастиц). С учетом периодических граничных условий при моделировании пакетом LAMMPS, на самом деле, образцы матричных структур можно считать неограниченными по размерам (в крайнем случае, можно считать регулярными упорядоченными структурами с очень большими размерами по всем трем осям).

Первые две матричные структуры состоят из *неконтактирующих* между собой наночастиц с композитной структурой «ядро-оболочка». А именно, на первом фрагменте (рис. 1, а) матричная структура состоит из одинаковых наночастиц Ni@Al (в сферическом ядре — кристаллическая решетка из атомов Ni, в сферической оболочке — кристаллическая решетка из атомов Al), а на втором фрагменте (рис. 1, б) — из одинаковых наночастиц Al@Ni (в сферическом ядре — кристаллическая решетка из атомов Al, в сферической оболочке — кристаллическая решетка из атомов Ni).

Исследование структурно-фазовых превращений при СВ-синтезе на примере первых двух модельных мат-

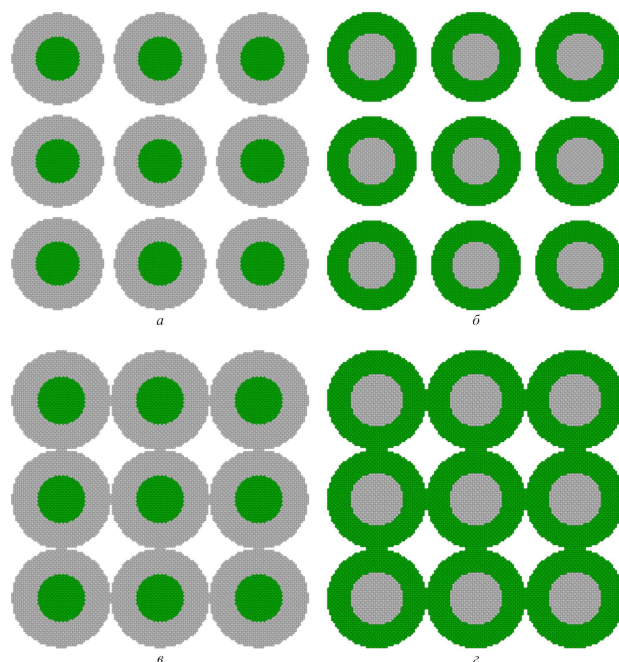


Рис. 1. Схематические изображения вертикальных сечений четырех матричных структур (плоские сечения структур проходят через центры наночастиц); атомы Ni — зеленый цвет, атомы Al — светло-серый оттенок: а и б — структуры с неконтактирующими между собой наночастицами; в и г — структуры с контактирующими между собой наночастицами; а и в — структуры из наночастиц Ni@Al; б и г — структуры из наночастиц Al@Ni

ричных структур заполнения объема реакционной смеси неконтактирующими между собой композитными наночастицами (рис. 1, а, б) может оказаться достаточно полезным и эффективным для изучения кинетики СВС в реакционных высокопористых гетерогенных составах с наноструктурными реагентами (с пористостью более 50%, вплоть до 80–90%), либо, например, в нанотермитах [3].

Следующие две матричные структуры с *контактирующими* между собой наночастицами (рис. 1, в, г) подобны простой кубической решетке с коэффициентом заполнения порядка 0.524 (иначе говоря, с пористостью 47.6%). Т.е., их нельзя считать, с одной стороны, высокопористыми упаковками наночастиц, а с другой стороны, они не являются плотноупакованными структурами заполнения объема (их можно отнести к составам со средней степени пористости). Как уже сказано выше, первые две матричные структуры с неконтактирующими между собой наночастицами характеризуются большей пористостью (высокопористые — более 50%).

Выше уже были приведены пояснения к структурным обозначениям наночастиц Ni@Al и Al@Ni, в которых первый элемент обозначения указывает на принадлежность решетки атомов данного типа ядру наночастицы, второй указывает на принадлежность решетки атомов данного типа оболочке наночастицы. Кри-

сталлическая структура элементарных ячеек для Ni и Al одна и та же — это гранецентрированная кубическая решетка (ГЦК), однако значения параметра решетки различаются между собой. Для решетки атомов Al параметр решетки  $a = 0.405$  нм [15]; для решетки атомов Ni параметр  $a = 0.3524$  нм [15].

Методика и этапы моделирования СВС для всех четырех исследуемых структур аналогичны между собой, различаются лишь количества атомов (в их ядрах и оболочках). Для одной наночастицы Ni@Al (рис. 1, а, в) общее количество атомов составило  $N = 31351$  ( $N_{Ni} = 5281$ ,  $N_{Al} = 26070$ , стехиометрическое соотношение атомов  $N_{Ni}/N_{Al} = 0.202$ ). Для одной наночастицы Al@Ni (рис. 1, б, г) общее количество атомов составило  $N = 33165$  ( $N_{Al} = 3511$ ,  $N_{Ni} = 29624$ , стехиометрическое соотношение атомов  $N_{Al}/N_{Ni} = 0.1185$ ). В начальном состоянии диаметры наночастиц во всех случаях были одинаковыми и равными по 10 нм.

На первом этапе моделирования (на этапе «минимизации») во всех случаях (рис. 1, а, б, в, г) температура прогрева частиц устанавливалась на уровне 600 К. Длительность этапа составила 1.2 пс или 600 итераций (обычно задают из диапазона от 500 до 1500 итераций; одна итерация компьютерного эксперимента по времени равна 0.002 пс).

На втором этапе (на этапе «релаксации») в течении 0.4 нс с фиксированными термодинамическими параметрами канонического NPT-ансамбля (давление  $P = 1$  Бар, температура  $T = 600$  К и количества атомов  $N$  для наночастиц, соответственно, 31351 и 33165) сохранялись периодические граничные условия по всем трём измерениям. Для всех структур на всех этапах моделирования сохраняются периодические граничные условия.

На следующем (на третьем) этапе моделирования инициируется процесс «зажигания» СВС в течении 0.1 нс. Т.е. производится быстрый линейный нагрев всего образца с 600 до 1200 К (для каждой структуры), при этом используется канонический NVT-ансамбль, где  $V$  — объем области нагрева. Затем на четвертом этапе (после 0.5 нс от начала моделирования) развивается процесс СВС, сопровождающийся распространением волны горения в объемах исследуемых структур. При этом для исследуемых структур сохраняются условия NVE-ансамбля ( $E$  — полная энергия атомов исследуемой системы).

## 2. АНАЛИЗ СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В МАТРИЧНЫХ СТРУКТУРАХ С НЕКОНТАКТИРУЮЩИМИ МЕЖДУ СОБОЙ НАНОЧАСТИЦАМИ

Для структуры (рис. 1, а) с использованием неконтактирующих между собой наночастиц Ni@Al стехиометрия равна  $N_{Ni}/N_{Al} = 0.202$  (на один атом Ni приходится пять атомов Al). К началу 2-й нс (после 0.5 нс

от начала зажигания СВС) температура, вычисленная осреднением по всему объему наночастицы, достигает значений порядка 1570–1575 К (рис. 2, а), что существенно выше точки плавления алюминия (933 К). Поэтому весь алюминий переходит в жидкое состояние и за это короткое время происходит полное растворение за счет взаимной диффузии атомов Ni (первоначально находящихся в ядре наночастицы) и атомов Al (первоначально находящегося в оболочке), так как по стехиометрии, как уже говорилось выше, на один атом Ni приходится пять атомов Al. Флуктуация (неоднородность) температуры относительно осредненной (как в плюс, так и в минус) в большинстве локальных объемов наночастицы, полученных разбиением всего объема наночастицы в виде кубической решетки доменов, оказалась не более 50 К. В отдельных доменах (их количество не превышает 3–4% от общего числа доменов) отклонение от осредненной температуры наночастицы оказалось порядка 150–175 К (в одном-двух доменах — порядка 200 К). В таких доменах происходят фазовые превращения (образование, либо распад фаз с выделением, либо с поглощением энергии), которые образуют аморфную «разреженную» структуру. Подтверждением этому являются результаты структурно-фазовых превращений (см. рис. 3 и 4), обсуждаемых в подразделе 2.1. Далее со временем температура наночастиц Ni@Al уже практически не изменяется по значению — температура порядка 1570–1575 К (рис. 2, а).

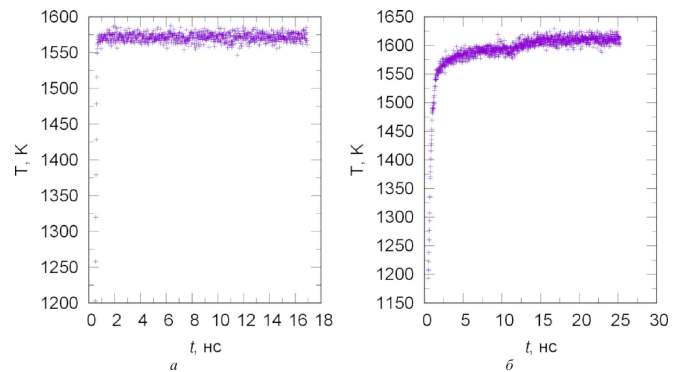


Рис. 2. Изменение температуры неконтактирующих между собой наночастиц в последовательные моменты времени: а — наночастицы Ni@Al; б — наночастицы Al@Ni

Для структуры (рис. 1, б) с использованием неконтактирующих между собой наночастиц Al@Ni стехиометрия равна  $N_{Al}/N_{Ni} = 0.1185$  (на один атом Al приходится чуть более 8 атомов Ni). На втором графике (рис. 2, б) для неконтактирующих между собой наночастиц Al@Ni (жидкий алюминий в ядре) с увеличением времени замечен плавный рост температуры до 1590 К в диапазоне до 8 нс, а затем температура неизменна до момента времени порядка 10.8 нс. Далее температура немного падает (порядка до 1580 К) и, начиная с момента 11 нс и до 15 нс, вновь плавно растет приблизительно до 1615 К. С момента 15 нс и до 25.8 нс температура остается практически неизменной. Флуктуация

температуры относительно осредненной (как в плюс, так и в минус) в доменах наночастицы Al@Ni оказалась порядка 80–90 К, а в отдельных доменах, в которых происходят активное образование высокотемпературных интерметаллических фаз Ni<sub>3</sub>Al и NiAl (подробнее изложено в подразделе 2.2), флуктуация достигала порядка 250–300 К.

Для более детального анализа структурно-фазовых превращений в неконтактирующих между собой наночастицах Ni@Al (а также и для Al@Ni) использовались встроенные в пакете OVITO следующие методы:

1. метод «общих (ближайших) соседей» (Common Neighbor Analysis — CNA-analysis) [12];
2. метод «угловой и радиальной связи» (между атомами) — Ackland-Jones analysis (далее: AJ-анализ) [16];
3. метод «сопоставления многогранных шаблонов» (Polyhedral Template Matching) — PTM-анализ [17].

Сравнивая упомянутые выше методы по эффективности распознавания кристаллических структур интерметаллидов, можно отметить следующее.

Метод CNA-анализа основан на межатомных расстояниях (или их пороговых значениях) для классификации атомной структуры. Как следствие, он чувствителен к деформации и тепловым смещениям, и для обеспечения надежной идентификации необходима предварительная обработка, такая как закалка или усреднение по времени расположения атомов. Поэтому для распознавания типов кристаллических элементарных ячеек в поликристаллических образцах (и тем более в образцах аморфного состояния с преобладанием неперриодического распределения атомов) с температурами, близкими к температурам плавления, CNA-анализ мало пригоден. Анализ, изложенный в подразделе 2.1 подтверждает такое критическое замечание. Метод AJ-анализа (с учетом углового и радиального распределений связей между атомами) обеспечивает низкую частоту неправильно назначенных или не назначенных атомов определенным типам кристаллических ячеек, воспроизводя дальнюю кристаллическую структуру для стабильных идеальных кристаллов. Метод AJ-анализа достаточно эффективен для распознавания ГЦК-, ОЦК- и ГПУ-структур.

Метод PTM-анализа классифицирует локальное структурное окружение атомов (топологию) и позволяет идентифицировать локальную кристаллическую структуру простых конденсированных фаз. В этом методе можно изменять и устанавливать пороговое значение параметра RMSD (среднеквадратического отклонения), которое является мерой пространственного отклонения от шаблона идеальной структуры (качества соответствия). В конечном итоге атому присваивается структурный тип того шаблона, для которого значение среднеквадратического отклонения оказывается

наименьшим. Атомам, параметр RMSD которых превышает пороговое значение, присваивается тип структуры «Другой» (т.е. нераспознанный тип). В качестве порогового значения чаще всего подходит наиболее вероятное значение, соответствующее пику гистограммы значений RMSD. Метод может надежно использоваться для идентификации структур даже при моделировании вблизи точки плавления, и что он также может идентифицировать наиболее распространенные упорядоченные структуры сплавов [17]. Кроме того, метод позволяет легко идентифицировать локальную ориентацию решетки в поликристаллических образцах и вычислять локальный тензор деформации [17]. Результаты сравнения методов анализа типов структур приведены на рисунках 3, 5 и др.

## 2.1. АНАЛИЗ СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В МАТРИЧНЫХ СТРУКТУРАХ С НЕКОНТАКТИРУЮЩИМИ МЕЖДУ СОБОЙ НАНОЧАСТИЦАМИ NI@AL

Как уже отмечено выше, за короткое время (к началу 2-й нс) происходит полное растворение за счет взаимной диффузии атомов Ni (первоначально находящихся в ядре наночастицы) в жидком алюминии (первоначально находящемся в оболочке), и на фрагментах рис. 3 (в центральном сечении наночастицы) наблюдаются подобные друг другу «аморфные» распределения атомов по различным типам элементарных ячеек (ОЦК, ГЦК, ГПУ и др.).

Однако CNA-анализ (рис. 3, а, г) дал «нулевой» результат распознавания структур — всем атомам предписан «нераспознанный тип» (светло-серый оттенок).

Стационарная картина аморфного распределения фаз в различные моменты времени (в 4 и 12 нс), характеризующих большой временной интервал (8 нс), синхронизируется с постоянством осредненной температуры порядка 1570–1575 К. Фрагменты а и б рис. 4 также подтверждают картину аморфного распределения атомов Ni (синий цвет) среди преобладающего количества атомов Al (серый цвет).

Продолжая анализировать эффективность методов распознавания типов кристаллических ячеек на основе всех фрагментов рис. 3, можно сделать вывод, что для аморфных состояний и поликристаллических структур CNA-метод практически полностью не эффективен (абсолютно все атомы помечены «нераспознаваемым» типом). Методы же AJ-анализа и PTM-анализа в аморфном распределении атомов по объему наночастицы распознают локальные алломераты атомов, в которых обнаруживаются небольшие скопления кубических ячеек (ОЦК — синий цвет, ГЦК — зеленый цвет) и ГПУ-ячеек (красный цвет), а также и икосаэдров (желтовато-коричневый). Порядка 70% атомов помечены «нераспознанным» типом, среди которых все три метода не смогли распознать скопления кристаллических ячеек, соответствующих типу «орто-

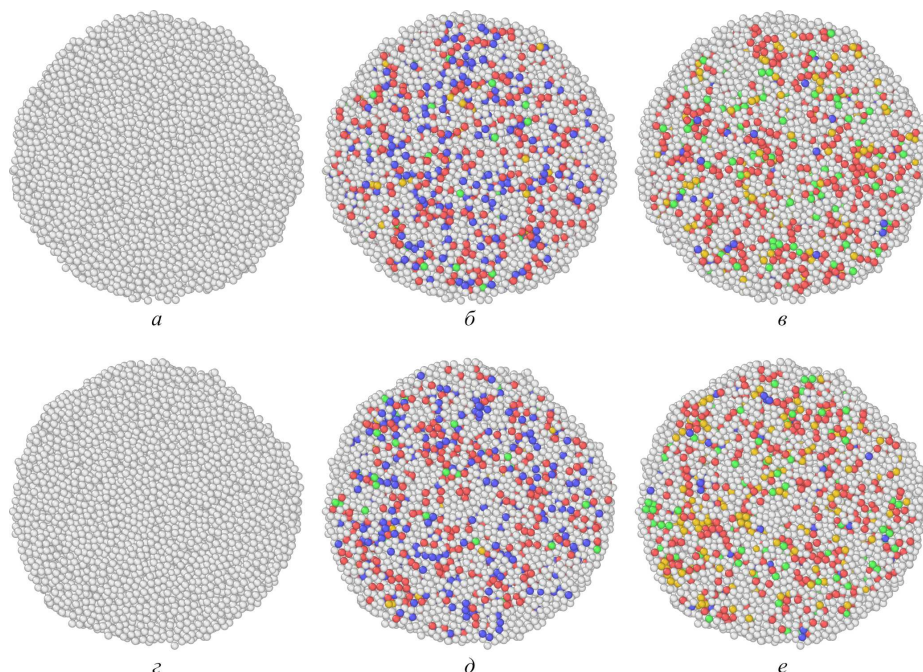


Рис. 3. Результаты анализа тремя методами (CNA, AJ и PTM) структурно-фазовых превращений в неконтактирующих между собой Ni@Al-наночастицах в моменты времени 4 нс (фрагменты: *a*, *б*, *в*) и 12 нс (фрагменты: *г*, *д*, *е*). CNA-результаты: фрагменты *a* и *г*; AJ-результаты: фрагменты *б* и *д*; PTM-результаты: фрагменты *в* и *е*. Цветовые обозначения структур: ОЦК — синий, ГПУ — красный, ГЦК — зелёный, икосаэдр — желтовато-коричневый, «нераспознанный тип» — светловато-серый оттенок

ромбической сингонии» (ей соответствует интерметаллид NiAl<sub>3</sub>). Используя ранее предложенный авторами метод «распознавания фаз на основе 3D-распределения плотности и 3D-распределения температуры в наночастице» [13, 14], таких структур фазы NiAl<sub>3</sub> оказывается не менее 40%, как показано на фрагментах *в* и *г* рис. 4. В центральных сечениях наночастицы (рис. 4, *в, г*) отображены двумерные решетки доменов, полученных разбиением куба с вписанной в него наночастицей на 1000 доменов (кубическое разбиение 10x10x10 доменов).

На фрагментах *в* и *г* рис. 4 видно, что много доменов наночастицы содержат только 5-ю фазу (NiAl<sub>3</sub>), а почти все остальные домены содержат двухфазную смесь (5 — NiAl<sub>3</sub>; 6 — жидкий алюминий). Имеются несколько двухфазных доменов (4;5) — смесь 4-й фазы (Ni<sub>2</sub>Al<sub>3</sub>) и 5-й (NiAl<sub>3</sub>), а в углах разбиения куба находятся домены с номерами 0 (пустые домены), так как наночастицы имеют форму сферы.

Равновесная диаграмма состояния системы Ni-Al с учетом стехиометрии  $N_{Ni}/N_{Al} = 0.202$  также указывает на две фазы: Al и фаза NiAl<sub>3</sub>. Т.е., если осуществить процесс резкого охлаждения (закалки) наночастицы, тогда в застывшем расплаве алюминия образуется наноккомпозит с зародышами кристаллов фазы NiAl<sub>3</sub>. Следует отметить, что в процессе СВС неконтактирующие между собой наночастицы Ni@Al практически сохраняют свою первоначальную сферическую форму.

## 2.2. АНАЛИЗ СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В МАТРИЧНЫХ СТРУКТУРАХ С НЕКОНТАКТИРУЮЩИМИ МЕЖДУ СОБОЙ НАНОЧАСТИЦАМИ Al@Ni

Для структуры (рис. 1, *б*) с использованием неконтактирующих между собой наночастиц Al@Ni стехиометрия равна  $N_{Al}/N_{Ni} = 0.1185$  (на один атом Al приходится чуть более 8 атомов Ni). В сравнении со структурой (рис. 1, *а*) из неконтактирующих между собой наночастиц Ni@Al для рассматриваемой структуры (рис. 1, *б*) наблюдаются отличия в кинетике СВС-процесса, как в температурной кинетике (рис. 2, *б*), так и в структурно-фазовых превращениях (см. рис. 5 и 6).

Метод CNA-анализа в данном случае уже распознал ГЦК-структуры (зеленый цвет), ОЦК-структуры (синий цвет) и ГПУ-структуры (красный цвет), что подтверждают фрагменты *a* и *г* рис. 5 (моменты времени, соответственно, 11.0 и 25.8 нс). Кроме того, результаты распознавания методом CNA-анализа, коррелируют с результатами распознавания методами AJ- и PTM-анализов. Т.е., в твердой Ni-оболочке наночастицы в преобладающей степени сохраняется кристаллическая ГЦК-структура. В жидком Al-ядре в последующее время за моментом 11 нс (характерный момент температурной динамики) к моменту времени 25.8 нс на изображениях AJ- и PTM-анализов заметно небольшое увеличение числа ГЦК-структур и небольшое уменьшение числа ОЦК- и ГПУ-структур. Рост

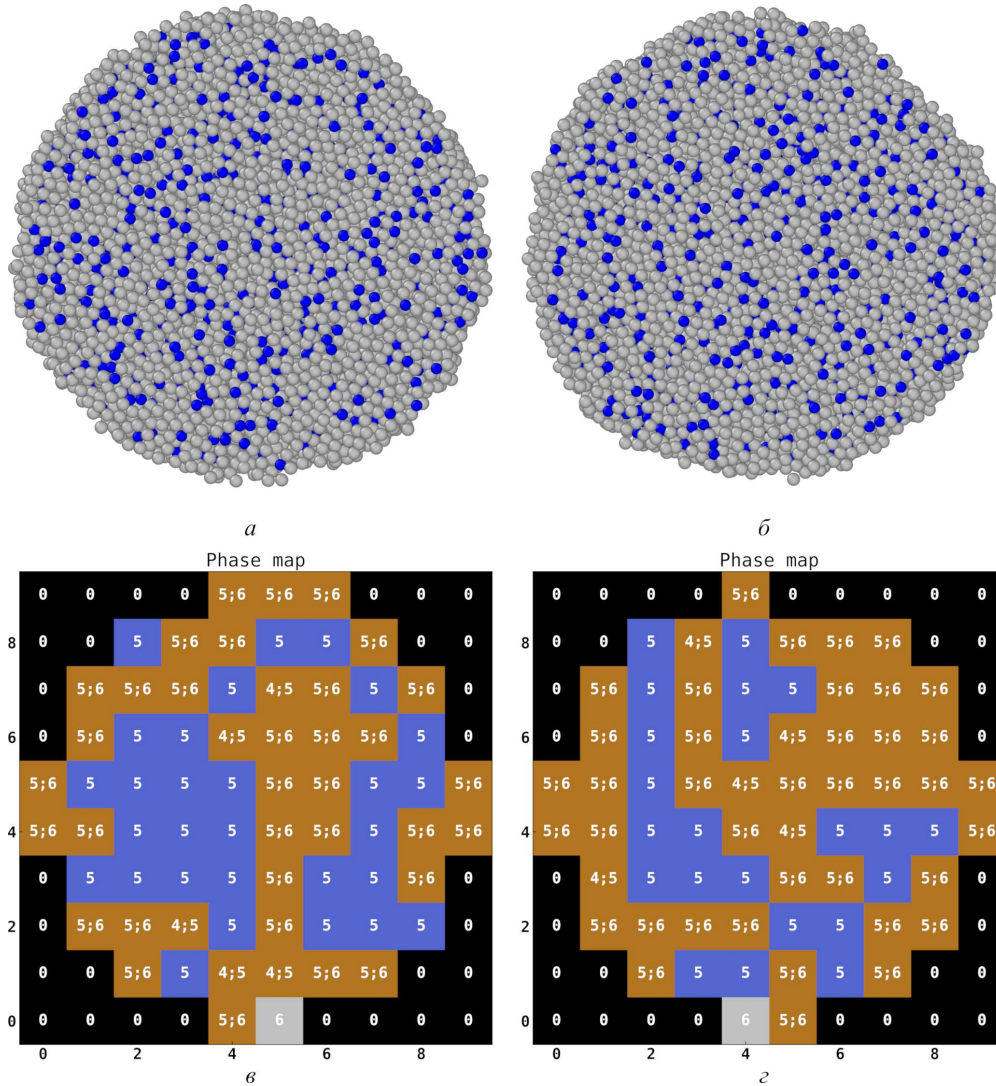


Рис. 4. Распределение атомов (Ni — синий; Al — светло-серый): *a* —  $t=4$  нс; *б* —  $t=12$  нс. Фазовые карты для неконтактирующих между собой Ni@Al-наночастиц:  $\nu$  —  $t=4$  нс;  $\zeta$  —  $t=12$  нс. Расшифровка фаз на картах: 1 — Ni, 2 — Ni<sub>3</sub>Al, 3 — NiAl, 4 — Ni<sub>2</sub>Al<sub>3</sub>, 5 — NiAl<sub>3</sub>, 6 — Al, 0 — пустой домен; (4;5) и (5;6) — домены с двухфазными смесями соответствующих гомогенных фаз

в ядре числа ГЦК-структур (зеленый цвет) связан с кристаллизацией фазы Ni<sub>3</sub>Al из расплава, который в начале процесса СВС в ядре представлял собой жидкий алюминий. С течением времени за счет реакционной диффузии атомов Ni из твдофазной Ni-оболочки через границу раздела в ядро наночастицы в жидком расплаве формируются кристаллические зародыши различных интерметаллических фаз (в т.ч., фазы Ni<sub>3</sub>Al и NiAl). Кроме рис. 5 подтверждением этому являются все фрагменты рис. 6 (распределение атомов и фазовые карты распределения интерметаллических фаз в «центральном» сечении наночастицы).

На фазовых картах (фрагменты  $\nu$  и  $\zeta$  рис. 6) в области ядра наночастицы имеются: однофазные домены 2 (фаза Ni<sub>3</sub>Al); двухфазные домены (1;2) — смесь никеля (ГЦК-структура) и фазы Ni<sub>3</sub>Al (также ГЦК-

структура); один двухфазный домен (2;3) — смесь фаз Ni<sub>3</sub>Al и NiAl (ОЦК-структура).

Возвращаясь к анализу фрагментов рис. 5, заметно уменьшение в ядре числа ОЦК-структур (фазы NiAl — синий цвет) и ГПУ-структур (красный цвет), что связано в определенной степени с перекристаллизацией фазы NiAl в фазу Ni<sub>3</sub>Al (подтверждают также СНА-анализ и РТМ-анализ).

Наличие большого избытка Ni в исходной наночастице Al@Ni (стехиометрия компонентов Ni и Al составляет чуть более 8:1) способствует перекристаллизации фазы NiAl в фазу Ni<sub>3</sub>Al. Экспериментальное подтверждение такому структурному фазовому переходу от фазы NiAl к фазе Ni<sub>3</sub>Al имеется в работе [18]. Продолжая рассуждать про механизмы кристаллизации фазы Ni<sub>3</sub>Al, можно указать на работы [19–23],

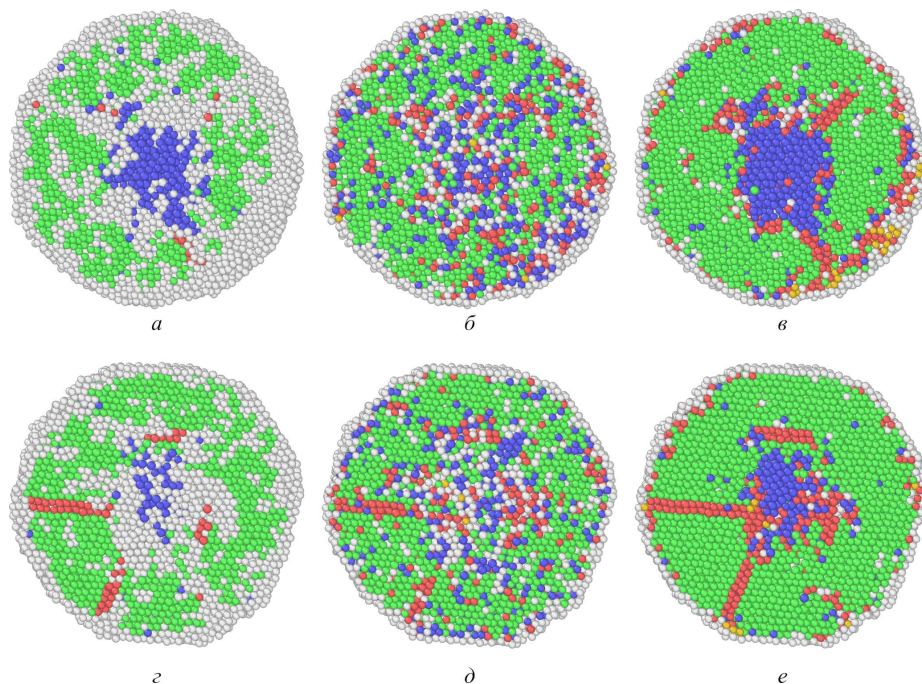


Рис. 5. Результаты анализа тремя методами (CNA, AJ и РТМ) структурно-фазовых превращений в неконтактирующих между собой Al@Ni-наночастицах в моменты времени 11 нс (фрагменты *a*, *б*, *в*) и 25.8 нс (фрагменты *z*, *д*, *е*). CNA-результаты: фрагменты *a* и *z*; AJ — результаты: фрагменты *б* и *д*; РТМ — результаты: фрагменты *в* и *е*. Цветовые обозначения структур: ОЦК — синий цвет, ГПУ — красный цвет, ГЦК — зелёный цвет, икосаэдр — желтовато-коричневый цвет, «нераспознанный тип» — светловато-серый оттенок

в которых их авторы обосновывают несколько механизмов. В работах [19, 20] говорится о механизме теплового взрыва (высокотемпературный режим синтеза  $\text{Ni}_3\text{Al}$  с очень высокой скоростью экзотермического тепловыделения и скачкообразного роста температуры). В работах [21, 22] говорится о механизме синтеза  $\text{Ni}_3\text{Al}$  в зоне догорания порошковой смеси чистых металлов за пиком максимального тепловыделения в виде комбинации двух плавных процессов: как кристаллизации из остывающего расплава, так и путем диффузионного взаимодействия промежуточных продуктов с исходными компонентами. Процесс СВ-синтеза, анализируемый на основе моделирования и изложенный в данном подразделе 2.2, относится к последнему комбинированному механизму «плавного» характера. В работе [23, с. 41] рассмотрен механизм синтеза  $\text{Ni}_3\text{Al}$  при температуре перитектического превращения в  $1396^\circ\text{C}$  и чуть выше (т.е., при  $1669\text{ K}$  и чуть выше). Такой механизм синтеза  $\text{Ni}_3\text{Al}$  обоснован в подразделе 3.2.

Следует отметить, что в процессе СВС неконтактирующие между собой наночастицы Al@Ni аналогично предыдущему случаю также практически сохраняют свою первоначальную сферическую форму поверхности.

### 3. АНАЛИЗ СТРУКТУРНО-ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ В МАТРИЧНЫХ СТРУКТУРАХ С КОНТАКТИРУЮЩИМИ МЕЖДУ СОБОЙ НАНОЧАСТИЦАМИ

Для структуры (рис. 1, *в*) с использованием контактирующих между собой наночастиц Ni@Al стехиометрия равна  $N_{\text{Ni}}/N_{\text{Al}} = 0.202$  (на один атом Ni приходится пять атомов Al). К началу 2-й нс (после 0.5 нс от начала зажигания СВС) температура, вычисленная осреднением по всему объему наночастицы, достигает значений порядка  $1560\text{--}1565\text{ K}$  (рис. 7, *a*), что существенно выше точки плавления алюминия ( $933\text{ K}$ ). Поэтому весь алюминий переходит в жидкое состояние. За это короткое время происходит полное растворение за счет взаимной диффузии атомов Ni (из первоначального твердофазного ядра) с жидким алюминием (первоначально находившегося только в оболочке), так как по стехиометрии, как уже говорилось выше, на один атом Ni приходится пять атомов Al. Флуктуация температуры относительно осредненной (как в плюс, так и в минус) в большинстве доменов наночастицы оказалась не более  $50\text{ K}$ . В отдельных доменах малого количества отклонение от осредненной температуры наночастицы оказалось порядка  $150\text{--}175\text{ K}$  (в одном-двух доменах порядка  $200\text{ K}$ ), т.е. аналогично случаю неконтактирующих между собой наночастиц Ni@Al. Поэтому аналогично структуре (рис. 1, *a*) в таких доменах происходят фазовые превращения (образование,

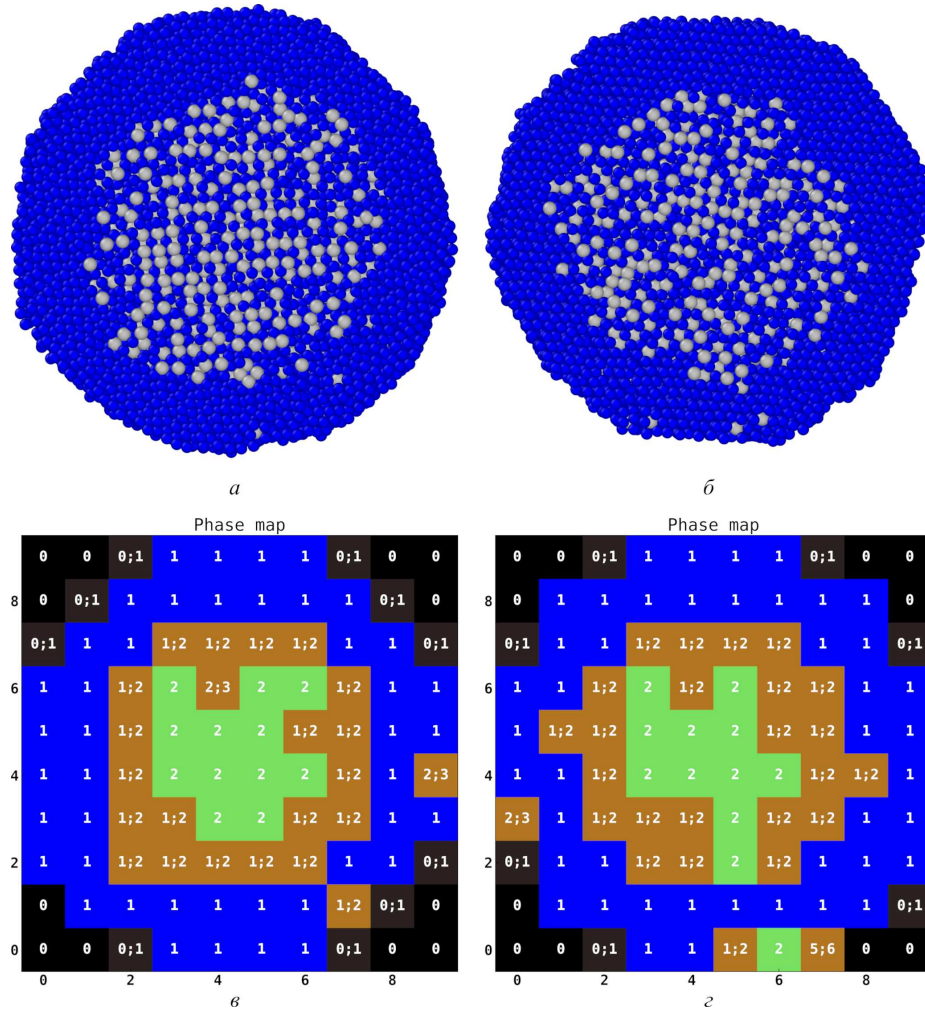


Рис. 6. Распределение атомов (Ni — синий; Al — серый):  $a-t=11$  нс;  $b-t=25.8$  нс. Фазовые карты для неконтактирующих между собой Al@Ni-наночастиц:  $\epsilon-t=11$  нс;  $\epsilon-t=25.8$  нс. Расшифровка фаз на картах: 1 — Ni, 2 — Ni<sub>3</sub>Al, 3 — NiAl, 4 — Ni<sub>2</sub>Al<sub>3</sub>, 5 — NiAl<sub>3</sub>, 6 — Al, 0 — пустой домен; (1;2), (2;3) и (5;6) — домены с двухфазными смесями соответствующих однородных фаз; (0;1) — домен, частично занятый никелем

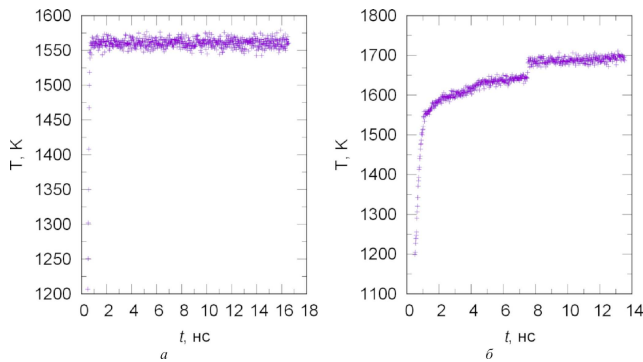


Рис. 7. Изменение температуры контактирующих между собой наночастиц в последовательные моменты времени:  $a$  — наночастицы Ni@Al;  $b$  — наночастицы Al@Ni

либо распад фаз — с выделением, либо с поглощением энергии), которые образуют аморфную «разрежен-

ную» структуру. Подтверждением этому являются результаты структурно-фазовых превращений (см. рис. 9 и 10), обсуждаемых в подразделе 3.1. Далее со временем температура наночастиц Ni@Al уже практически не изменяется по значению — температура порядка 1560–1565 К (рис. 7,  $a$ ).

Для структуры (рис. 1,  $\epsilon$ ) с использованием контактирующих между собой наночастиц Al@Ni стехиометрия равна  $N_{AL}/N_{Ni} = 0.1185$  (на один атом Al приходится чуть более 8 атомов Ni). На втором графике (рис. 7,  $b$ ) для контактирующих между собой наночастиц Al@Ni (жидкий алюминий в ядре) с увеличением времени заметен плавный рост температуры в диапазоне до 7.4 нс, а затем происходит резкий скачок температуры, приблизительно со значения 1645 до 1670 К (рис. 7,  $b$ ). Как известно [23, с. 41], при температуре перитектического превращения в 1396°C и чуть выше (т.е., при 1669 К и чуть выше) образуется соединение Ni<sub>3</sub>Al, что и подтверждается дальнейшим ниже



приведенным анализом в подразделе 3.2. Флуктуация температуры относительно осредненной (как в плюс, так и в минус) в доменах наночастицы Al@Ni оказалась порядка 100 К, а в отдельных доменах, в которых происходят активное образование высокотемпературных интерметаллических фаз Ni<sub>3</sub>Al и NiAl (подробнее изложено в подразделе 3.2), флуктуация достигала порядка 300 К (в двух-трех доменах достигла около 400 К).

Как было отмечено в конце разд. 2, в процессе СВС неконтактирующие между собой наночастицы в структурах (рис. 1, *a, б*), главным образом, сохраняют свою первоначальную сферическую форму поверхности. Для структур (рис. 1, *в, г*) с контактирующими между собой наночастицами сферическая форма наночастиц существенно изменяется. Это изменение отражено на рис. 8. Структура из контактирующих между собой наночастиц Ni@Al (рис. 1, *в*), обладавшая одинаковой симметрией в трех плоскостях сечений (XY, XZ, YZ) через центры наночастиц, трансформируется в структуру, в которой топологии сечений имеют пустоты (поры) только в двух плоскостях (XY, XZ), а в третьей плоскости YZ, проходящей через центры наночастиц, поры отсутствуют. Это можно объяснить следующим образом. В процессе СВС жидкий алюминий, находящийся во внешних оболочках контактирующих между собой наночастиц Ni@Al, приобретает в одной из плоскостей (случайным образом, например, в плоскости YZ) наибольший импульс растекания. Топология формы трансформированной наночастицы Ni@Al в плоскости сечения XY оказалась подобной топологии формы трансформированной наночастицы Al@Ni (одинаковой во всех трех плоскостях сечений, см. рис. 8, *г, д, е*), однако в плоскости сечения XZ топология напоминает уже форму «двухавра», а в плоскости сечения YZ, проходящей через центры наночастиц, пустот нет по причине интенсивного растекания в ней.

Таким образом, структура (рис. 1, *в*) в двух направлениях Y и Z, перпендикулярных плоскостям, соответственно, XY и XZ, имеет сквозные «трубчатые» каналы (продуваемые напором газа), а вдоль направления X (перпендикулярного плоскости YZ) — сквозных «трубчатых» каналов нет.

Наночастицы Al@Ni в структуре (рис. 1, *г*) контактируют между собой оболочками, в которых находится никель практически в твердой фазе, так как усредненная температура горения СВС в наночастицах не превосходит 1700 К, а температура плавления никеля равна 1728 К. Поэтому оболочки наночастиц не претерпевают процесса растекания. Однако на межатомном уровне контакта соседних наночастиц за счет ЕАМ-потенциала происходит сближение (притяжение) граничных атомов Ni из соседних наночастиц, что приводит к увеличению совместной площади контакта соседних наночастиц и к изменению их топологии поверхности. Несмотря на изменение топологии наночастиц Al@Ni, за счет твердофазного со-

стояния их Ni-оболочек топология в трех декартовых плоскостях-сечениях обладает одинаковой формой (см. рис. 8, *г, д, е*).

### 3.1. Анализ структурно-фазовых превращений в матричных структурах с контактирующими между собой наночастицами Ni@Al

Для структуры (рис. 1, *в*) с использованием контактирующих между собой наночастиц Ni@Al стехиометрия равна  $N_{Ni}/N_{Al} = 0.202$  (на один атом Ni приходится пять атомов Al), т.е. совпадает со стехиометрией неконтактирующих между собой частиц Ni@Al в структуре (рис. 1, *а*). Температурная динамика (рис. 7, *а*) для структуры (рис. 1, *в*) выглядит абсолютно подобно температурной динамике (рис. 2, *а*), соответствующей структуре (рис. 1, *а*), а температурное различие составляет лишь 10 К. Аналогичное подобие наблюдается и в изображениях структурно-фазовых превращений, если сравнить между собой пару рисунков (рис. 9, 10) с парой рисунков (рис. 3, 4).

Различие между ними состоит только лишь в топологии (форме) наночастиц Ni@Al, которые они приобретают в процессе СВС. Ранее уже отмечалось, неконтактирующие между собой наночастицы практически сохраняют свою сферическую форму, а в случае контактирования приобретают формы, показанные на рис. 8 (фрагменты *а, б, в*). На рис. 9 и 10 показаны сечения плоскостью YZ через центры наночастиц Ni@Al, соответствующие фрагменту *в* рис. 8. Поэтому нет необходимости повторять анализ структурно-фазовых превращений, изложенный в подразделе 2.1.

Приведем лишь подобный же вывод: если осуществить процесс резкого охлаждения (закалки) контактирующих между собой наночастиц Ni@Al, тогда в застывшем расплаве алюминия образуется наноккомпозит с зародышами кристаллов фазы NiAl<sub>3</sub>. Кроме того, в процессе СВС контактирующие между собой наночастицы Ni@Al изменяют свою первоначальную сферическую форму поверхности (см. рис. 8, *а, б, в*).

### 3.2. Анализ структурно-фазовых превращений в матричных структурах с контактирующими наночастицами Al@Ni

Для структуры (рис. 1, *г*) с использованием контактирующих между собой наночастиц Al@Ni в сравнении со структурой (рис. 1, *б*) неконтактирующих между собой наночастиц Al@Ni наблюдаются отличия в кинетике СВС-процесса, как в температурной кинетике (на графике рис. 7, *б* заметен скачок), так и в структурно-фазовых превращениях (рис. 11 и 12).

Все три метода анализа структур показали, что в твердой Ni-оболочке наночастицы Al@Ni в практическом смысле сохраняется кристаллическая ГЦК-структура.

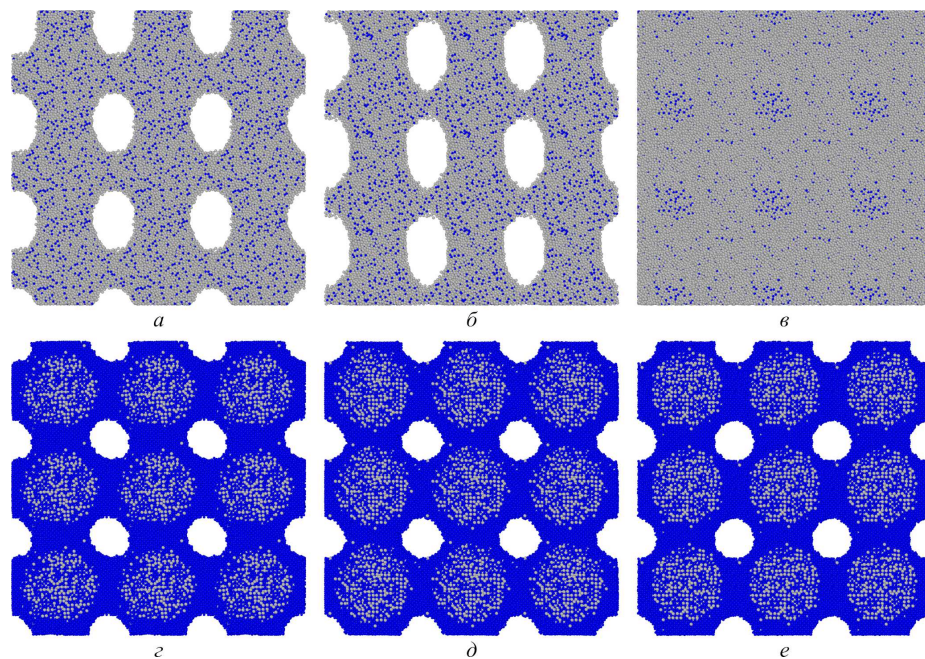


Рис. 8. Изображения сечений матричных структур из контактирующих между собой наночастиц тремя плоскостями (XY, XZ, YZ): фрагменты *a*, *b*, *c* — для матричной структуры из контактирующих между собой наночастиц Ni@Al; фрагменты *d*, *e*, *f* — для матричной структуры из контактирующих между собой наночастиц Al@Ni. Фрагменты *a* и *d* соответствуют сечению плоскостью XY, *b* и *e* — сечению плоскостью XZ, *c* и *f* — сечению плоскостью YZ. Атомы Al помечены светло-серым оттенком, атомы Ni — синим цветом

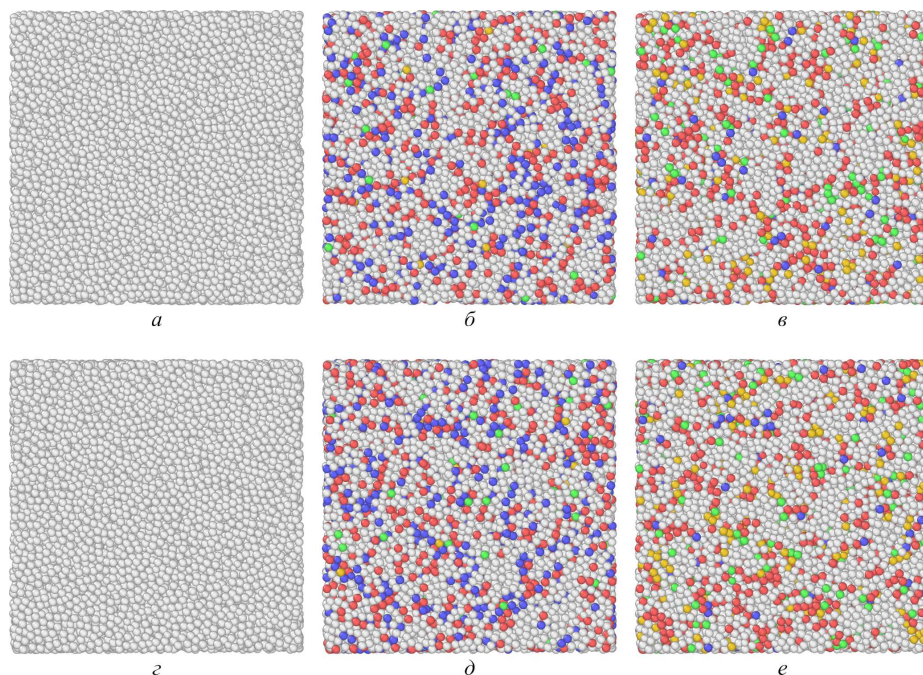


Рис. 9. Результаты анализа тремя методами (CNA, AJ и PTM) структурно-фазовых превращений в контактирующих между собой Ni@Al-наночастицах в моменты времени 4 нс (фрагменты *a*, *b*, *c*) и 12 нс (фрагменты *d*, *e*, *f*). CNA-результаты: фрагменты *a* и *d*; AJ- результаты: фрагменты *b* и *e*; PTM- результаты: фрагменты *c* и *f*. Цветовые обозначения структур: ОЦК — синий цвет, ГПУ — красный цвет, ГЦК — зелёный цвет, икосаэдр — желтовато-коричневый цвет, «нераспознанный тип» — светловато-серый оттенок

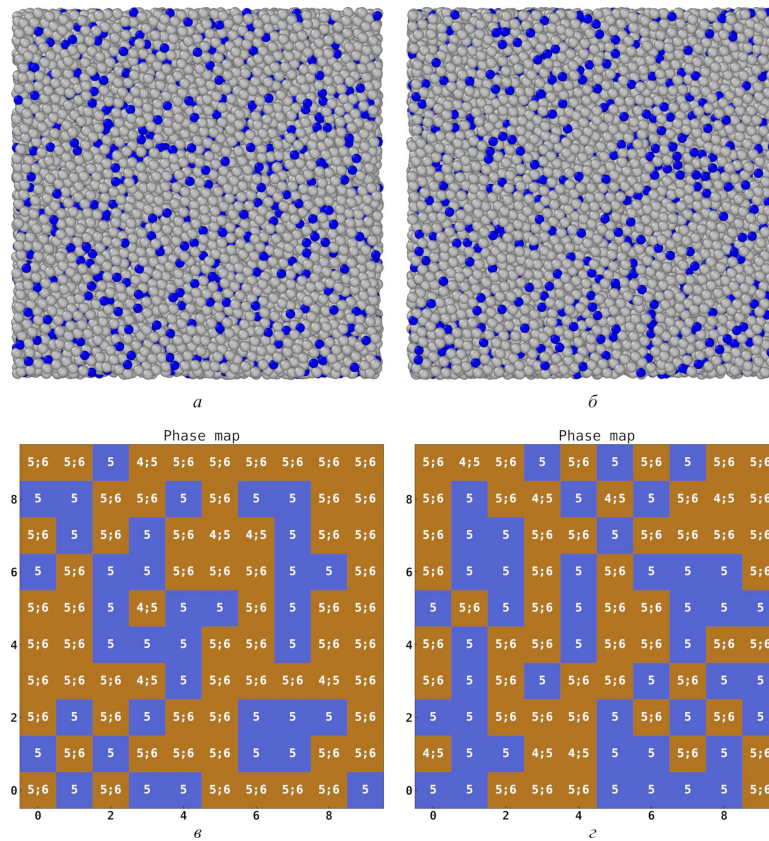


Рис. 10. Распределение атомов (Ni – синий; Al – серый):  $a-t=4$  нс;  $b-t=12$  нс. Фазовые карты для контактирующих между собой Ni@Al-наночастиц:  $\theta-t=4$  нс;  $\varepsilon-t=12$  нс. Расшифровка фаз на картах: 1 – Ni, 2 – Ni<sub>3</sub>Al, 3 – NiAl, 4 – Ni<sub>2</sub>Al<sub>3</sub>, 5 – NiAl<sub>3</sub>, 6 – Al, 0 – пустой домен; (4;5) и (5;6) – домены с двухфазными смесями соответствующих гомогенных фаз

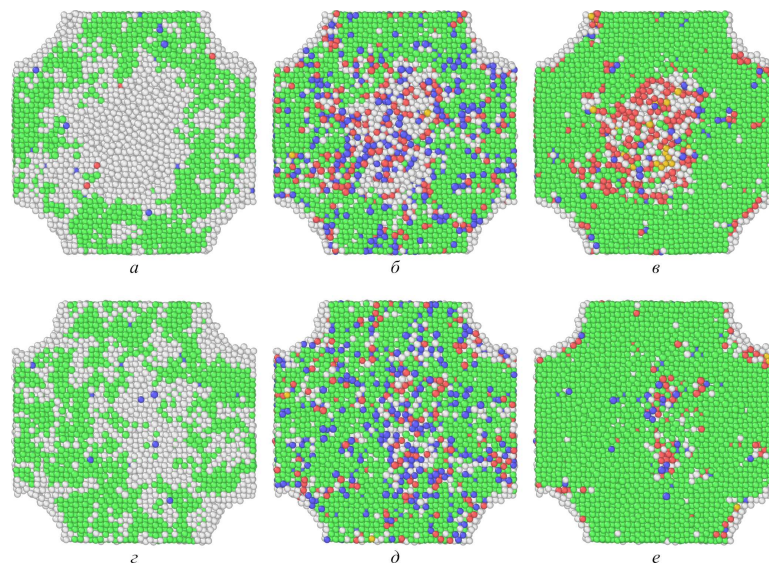


Рис. 11. Результаты анализа тремя методами (CNA, AJ и PTM) структурно-фазовых превращений в контактирующих между собой Al@Ni-наночастицах в моменты времени 7.4 нс (фрагменты  $a$ ,  $b$ ,  $v$ ) и 7.5 нс (фрагменты  $z$ ,  $d$ ,  $e$ ). CNA-результаты: фрагменты  $a$  и  $z$ ; AJ – результаты: фрагменты  $b$  и  $d$ ; PTM – результаты: фрагменты  $v$  и  $e$ . Цветовые обозначения структур: ОЦК – синий цвет, ГПУ – красный цвет, ГЦК – зелёный цвет, икосаэдр – желтовато-коричневый цвет, «нераспознанный тип» – светловато-серый оттенок

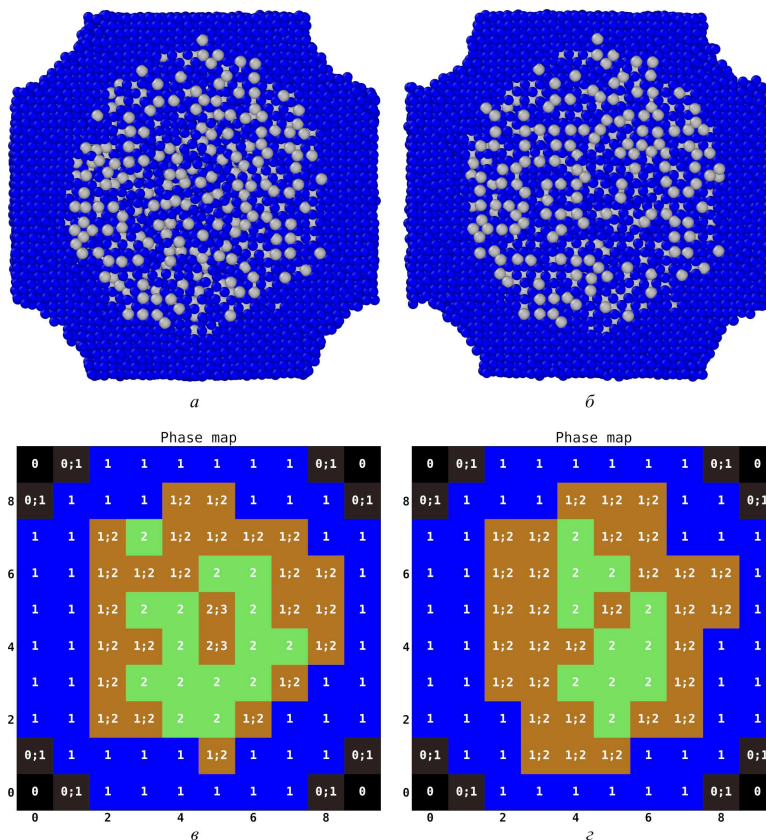


Рис. 12. Распределение атомов (Ni — синий; Al — серый):  $a-t=7.4$  нс;  $b-t=7.5$  нс. Фазовые карты для контактирующих между собой Al@Ni-наночастиц:  $\vartheta-t=7.4$  нс;  $\varepsilon-t=7.5$  нс. Расшифровка фаз на картах: 1 — Ni, 2 — Ni<sub>3</sub>Al, 3 — NiAl, 4 — Ni<sub>2</sub>Al<sub>3</sub>, 5 — NiAl<sub>3</sub>, 6 — Al, 0 — пустой домен; (1;2), (2;3) — домены с двухфазными смесями соответствующих гомогенных фаз; (0;1) — домен, частично занятый никелем

СНА-анализ в жидком ядре наночастицы в определенной степени отражает только лишь увеличение числа ГЦК-структур (появление зародышей фазы Ni<sub>3</sub>Al, рис. 11, *a, z*) за время температурного скачка от момента времени 7.4 нс до 7.5 нс (см. рис. 7, *б*), а других изменений практически не обнаруживает. Результаты АЖ- и РТМ-методов, коррелируя между собой, фиксируют более интенсивное увеличение числа ГЦК-структур и резкое уменьшение числа ГПУ-структур. РТМ-анализ по сравнению с АЖ-анализом показал (в ядре наночастицы Al@Ni) немногим большее увеличение числа ГЦК-структур, что лучше соответствует фазовой карте (рис. 12, *z*).

Анализируя изменения в распределениях атомов Ni и Al в моменты времени 7.4 нс и 7.5 нс (фрагменты *a* и *б* рис. 12), также можно судить о структурно-фазовых изменениях, выраженных в переходе от менее упорядоченных структур к более упорядоченным структурам за очень короткое время (в ядре наночастицы). Т.е. структурная перестройка в ядре наночастицы согласуется с понятием «структурного фазового перехода» [24, 25]. А именно, на фрагменте *б* рис. 12 в ядре наночастицы (по сравнению с фрагментом *a*

рис. 12) более отчетливо видны вертикальные и горизонтальные ряды атомов Al (серый цвет), чередующиеся с атомами Ni (синий цвет) и лежащие с ними в одной плоскости (в одной грани), что подтверждает увеличение числа ГЦК-структур к моменту 7.5 нс. На фрагментах *в* и *z* этого же рис. 12 (фазовые карты) распознанные фазы 2 (Ni<sub>3</sub>Al — структура ГЦК) и 3 (NiAl — структура ОЦК) коррелируют (по месту их расположения на фазовых картах) с локальными ГЦК- и ОЦК-структурами, отраженных на соответствующих изображениях (фрагменты *a* и *б* рис. 12).

Таким образом, процесс быстрой кристаллизации фазы Ni<sub>3</sub>Al из расплава в ядре наночастицы сопровождается резким скачком температуры за очень короткое время (менее 0.1 нс) до температуры перитектического превращения в 1669–1670 К (см. рис. 7, *б*) с образованием фазы Ni<sub>3</sub>Al. При этом дополнительно происходит перекристаллизация фазы NiAl в фазу Ni<sub>3</sub>Al, что подтверждается исчезновением фазы 3 (NiAl) на фрагменте *в* и появлением на этих местах фазы 2 (Ni<sub>3</sub>Al). В итоге, в ядре наночастицы доминирует фаза Ni<sub>3</sub>Al с наличием избытка Ni, что соответствует общему стехиометрическому соотношению компонентов Ni и Al исходной наночастицы Al@Ni. Резкий скачок темпера-

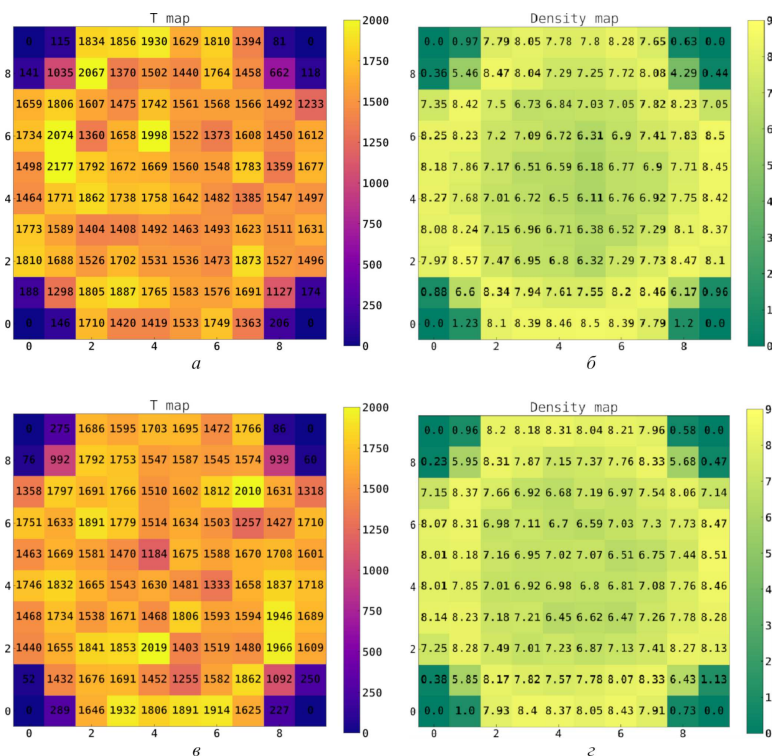


Рис. 13. Карты распределения температуры в доменах контактирующих между собой Al@Ni-наночастиц:  $a$   $t = 7.4$  нс;  $в$   $t = 7.5$  нс. Карты распределения плотности в доменах контактирующих между собой Al@Ni-наночастиц:  $б$   $t = 7.4$  нс;  $г$   $t = 7.5$  нс

туры за время, меньшее 0.1 нс, характеризует скачок в скорости тепловыделения подобно режиму теплового взрыва. На фрагментах  $a$  и  $в$  рис. 13, в качестве примера, приведены температурные карты центрального сечения наночастицы в моменты времени 7.4 нс и 7.5 нс, на которых отчетливо видны отдельные домены, в которых имеются сверхадиабатические скачки температуры (вспышки теплового взрыва).

На фрагментах  $б$  и  $г$  рис. 13 приведены карты плотностей, соответствующие температурным картам (фрагментам  $a$  и  $в$  рис. 13).

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для четырех матричных структур в качестве значимых результатов приведены карты распознавания интерметаллических фаз, синтезируемых в наночастицах в последовательные моменты времени. В двух структурах с наночастицами, контактирующими друг с другом, в процессе СВС изменяется их сферическая форма. Одно из значимых отличий результатов данной статьи от результатов работы [9] состоит в том, что

в матричной структуре с контактирующими между собой наночастицами Al@Ni (при значительном преобладании атомов Ni) процесс интенсивной реакционной диффузии атомов Ni из оболочки в жидкое Al-ядро в определенный момент вызывает в ядре наночастицы процесс структурного фазового перехода с быстрой (скачкообразной) кристаллизацией фазы Ni<sub>3</sub>Al из расплава и совместный с ней процесс рекристаллизации фазы NiAl в фазу Ni<sub>3</sub>Al. Переход к более высокой степени структурной упорядоченности атомов происходит за очень короткое время (менее 0.1 нс), сопровождающийся резким скачком температуры и скачком в скорости тепловыделения подобно режиму теплового взрыва. Результаты проведенных исследований могут оказаться полезными при создании наноструктурированных композиционных пористых материалов.

Исследование выполнено в рамках реализации Программы развития университета на 2021–2030 гг. в рамках реализации программы стратегического академического лидерства «Приоритет 2030», проект «Исследование особенностей микрокинетики СВ-синтеза в наноразмерных системах Ni–Al, Ti–Al, Ni–Ti с помощью метода молекулярно–динамического моделирования».

[1] Мержанов А.Г. Твердопламенное горение. Изд-во ИС-МАН. Черноголовка, 2000.

[2] Концепция развития СВС как области научно-технического прогресса. Под ред. А.Г. Мержанова. Чер-

- ноголовка: Территория, 2003.
- [3] *Rogachev A.S., Mukasyan A.S.* Горение для синтеза материалов: введение в структурную макрокинетiku. Физматлит. М., 2012.
- [4] *Politano O., Baras F.* // *Journal of Alloys and Compounds*. **652**. 25 (2015).
- [5] *Turlo V., Politano O., Baras F.* // *Journal of Alloys and Compounds*. **708**. 989 (2017).
- [6] *Rogachev A.S., Vadchenko S.G., Baras F. et al.* // *Combustion and Flame*. **166**. 158169 (2016).
- [7] *Schwarz F., Spolenak R.* // *J. Appl. Phys.* **131**. 075107 (2022).
- [8] *Jordan V., Shmakov I.* // *Communications in Computer and Information Science*. **1304**. 43 (2020).
- [9] *Kart S.O., Kart H.H. and Cagin T.* // *Journal of Nanoparticle Research*. **22**, Issue 6. 140 (2020).
- [10] *Jordan V. and Shmakov I.* // *Communications in Computer and Information Science*. **1526**. 101 (2022).
- [11] *Plimpton S.* // *J. Comp. Phys.* **117**, Issue 1. 1 (1995).
- [12] *Stukowski A.* // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. **18**. 015012 (2010).
- [13] *Иордан В.И., Шмаков И.А.* // Высокопроизводительные вычислительные системы и технологии. **5**, № 2. 42 (2021). <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=47508632>
- [14] *Иордан В.И., Шмаков И.А.* // *Известия Алтайского государственного университета*. № 1(129). 29 (2023).
- [15] *Purja Pun G.P., Mishin Y.* // *Philosophical Magazine*. **89**, Issue 34-36. 3245 (2009).
- [16] *Ackland G.J., Jones A.P.* // *Phys. Rev. B*. **73**, N 5. 054104 (2006). <https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.73.054104>
- [17] *Larsen P.M., Schmidt S., Schiutz J.* // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. **24**, Issue 5. 055007 (2016).
- [18] *Шморгунов В.Г., Богданов А.И., Таубе А.О., Серов А.Г.* // *Изв. вузов. Порошковая металлургия и функциональные покрытия*. № 1. 51 (2016).
- [19] *Лапшин О.В., Овчаренко В.Е.* // *Физика горения и взрыва*. **32**, № 3. 68 (1996).
- [20] *Лапшин О.В., Овчаренко В.Е., Боянгин Е.Н.* // *Физика горения и взрыва*. **38**, № 4. 59 (2002).
- [21] *Итин В.И., Найбороденко Ю.С.* Высокотемпературный синтез интерметаллических соединений. Томск: Изд-во Том. ун-та, 1989.
- [22] *Лапшин О.В., Боянгин Е.Н., Овчаренко В.Е.* // *Физика горения и взрыва*. **41**, № 1. 73 (2005).
- [23] *Ибраева Г.М.* Многослойная структура интерметаллидных соединений алюминидов кобальта, никеля и титана. Дисс. на соискание степени PhD по спец. 6D071000 — Материаловедение и технология новых материалов. 2019. Алматы. Республика Казахстан. 91 с.
- [24] *Мягков В.Г., Быкова Л.Е., Бондаренко Г.Н., Бондаренко Г.В., Мягков Ф.В.* // *ЖТФ*. **71**, № 6. 104 (2001).
- [25] *Аксенов В.Л., Тропин Т.В.* Лекции по теории конденсированного состояния. Учеб. пособие. Физ. факультет МГУ им. М.В. Ломоносова. М., 2020.

## Molecular Dynamics Study of Structural-Phase Transformations during SH-Synthesis of Nickel Aluminides in Matrix Structures with a Homogeneous Composition of Nanoparticles of the Core-Shell Composite Structure

V.I. Jordan<sup>a</sup>, I.A. Shmakov<sup>b</sup>

*Department of Computer Science and Electronics, Institute of Digital Technologies, Electronics and Physics, Altai State University  
Barnaul 656049, Russia*

*E-mail: <sup>a</sup>jordan@phys.asu.ru, <sup>b</sup>ihammers.sia@gmail.com*

Using the LAMMPS and OVITO software packages, the results of computer simulation of the SH-synthesis of nickel aluminides in model matrix structures with a homogeneous composition of core-shell composite nanoparticles were obtained. For the compositions of Ni@Al nanoparticles and Al@Ni nanoparticles, two variants of interelement bonds were studied (non-contacting and contacting nanoparticles), for which recognition maps of intermetallic phases synthesized in nanoparticles at successive moments in time are provided. In two structures with contacting nanoparticles, their spherical shape changes during the SHS process, and for the composition of Al@Ni nanoparticles, a sharp jump in temperature to the peritectic transformation temperature of 1669 K was detected. In this case, a structural phase transition occurs with rapid crystallization of the Ni<sub>3</sub>Al phase from the melt and recrystallization of the NiAl phase into the Ni<sub>3</sub>Al phase.

PACS: 61.50.Ks, 61.50.Ah, 65.80.+n, 81.20.Ka

*Keywords:* SH-synthesis, structural-phase transformations, nickel aluminides, core-shell nanoparticle, molecular dynamics method.

*Received 15 August 2024.*

### Сведения об авторах

- Иордан Владимир Иванович — канд. физ.-мат. наук, доцент; тел.: (3852) 29-66-42, e-mail: jordan@phys.asu.ru.
- Шмаков Игорь Александрович — ст. преподаватель; тел.: (3852) 29-66-42, e-mail: ihammers.sia@gmail.com.