

ПРОЧНОСТЬ И ПЛАСТИЧНОСТЬ

УДК 669.71'3:539.219.3:539.4

ВЛИЯНИЕ ВЗАИМОДИФФУЗИИ АТОМОВ НА ГРАНИЦЕ КОМПОЗИТА Al/Cu НА ЕГО МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА: МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА

© 2023 г. П. В. Полякова^{а, *}, Ю. А. Баимова^{а, б}

^аИнститут проблем сверхпластичности металлов РАН, ул. Степана Халтурина, 39, Уфа, 450001 Россия

^бУфимский университет науки и технологий, ул. Заки Валиди, 32, Уфа, 450067 Россия

*e-mail: polina.polyakowa@yandex.ru

Поступила в редакцию 01.11.2022 г.

После доработки 07.12.2022 г.

Принята к публикации 26.12.2022 г.

Композиты с алюминиевой матрицей являются актуальным объектом для исследований, поскольку подобные материалы превосходят традиционные по своим механическим характеристикам и могут быть использованы в различных областях промышленности. В настоящей работе методом молекулярной динамики исследована взаимная диффузия на границе перемешивания Al/Cu под действием сжатия, комбинированного со сдвигом. Проведены молекулярно-динамические испытания полученного композита на растяжение после комбинированного сжатия до разных степеней деформации. Схема деформирования, используемая в настоящей работе, представляет собой упрощение сценария, ранее экспериментально реализованного для получения композитов Al/Cu. Показано, что сжатие в сочетании с деформацией сдвига является эффективным способом получения композитной структуры. Установлено, что в процессе обработки атомы Cu диффундируют в блок Al легче, чем атомы Al диффундируют в блок Cu. Испытания на растяжение после комбинированного сжатия показывают, что разрушение происходит в алюминиевой части композита, следовательно, граница перемешивания атомов Al и Cu прочнее, чем чистая алюминиевая часть.

Ключевые слова: композит, молекулярная динамика, алюминий, медь, сдвиговая деформация, механические свойства

DOI: 10.31857/S0015323022601611, **EDN:** CLYCPS

ВВЕДЕНИЕ

Композитные материалы обладают комплексом свойств и особенностей, отличающих их от традиционных конструкционных материалов, что позволяет улучшить существующие конструкции самого различного назначения.

Композиты на основе алюминия (Al) являются хорошо известными материалами с превосходными свойствами, такими как малый удельный вес и высокая коррозионная стойкость [1–5]. Прочностные свойства чистого алюминия довольно низкие, однако это можно исправить, если армировать алюминий более прочными фазами. Упрочнение алюминия другим металлом приводит к значительному улучшению его механических свойств, в результате чего такой материал можно использовать в качестве замены чистого алюминия в промышленности [6, 7]. Одним из таких металлов, который может способствовать упрочнению алюминия, является медь (Cu). Согласно диаграмме состояния, имеет место образование интерметаллидных фаз

Al₂Cu, AlCu, Al₃Cu₄, Al₂Cu₃ и Al₄Cu₉. Кроме того, медь обладает высокой электро- и теплопроводностью, а также пластичностью [8]. На сегодняшний день обсуждаются различные методы изготовления подобных композитов, например, сварка взрывом, диффузионная сварка, вакуумное горячее прессование, экструзия [9–17]. Однако существующие методы их получения имеют свои преимущества и недостатки. Необходим поиск методов, которые включают использование простых и экономичных инструментов, меньшее время обработки поверхности, универсальность.

В последние пять лет получил развитие новый подход к получению композитных материалов — твердофазное соединение тонких дисков из алюминия и других металлов посредством сдвиговой деформации на наковальнях Бриджмена [18–23]. Кручением под квазигидростатическим давлением (КГД) получены композиты на основе различных систем: Al/Cu [18, 19, 24, 25], Al/Nb [20], Al/Mg [22, 23] и Al/Ti [28–31]. Обработка методом КГД может значительно увеличить диффузию в

структуре при сжатии за счет наличия высокой плотности вакансий, дислокаций и границ зерен [32]. Это приводит к образованию интерметаллических фаз и упрочнению материала.

В экспериментах подобные особенности структурных и фазовых превращений не всегда возможно исследовать в деталях. Однако это можно сделать с помощью методов компьютерного моделирования. Метод молекулярной динамики (МД) — это мощный инструмент для изучения процессов на атомистическом уровне, что позволяет отслеживать различные структурные и фазовые превращения при деформации или отжиге [33–35], в частности, проследить за перемешиванием атомов в системе и образованием интерметаллидов. Ранее методы МД применяли для исследования механических свойств композитов различного состава [36–38], изучения атомного перемешивания в композитных системах [39–43].

Целью данной работы является изучение процесса взаимной диффузии атомов Al и Cu под действием деформационной обработки, аналогичной КГД. Такой обработкой является одноосное сжатие, перпендикулярное границе перемешивания атомов, в комбинации с деформацией сдвига в плоскости границы. Для исследования прочности и механизмов разрушения полученной композитной структуры проводится моделирование одноосного растяжения, перпендикулярно границе перемешивания атомов.

ДЕТАЛИ МОДЕЛИРОВАНИЯ

В качестве начальной структуры для моделирования выбран кубический образец размерами $10 \times 10 \times 10 \text{ нм}^3$, содержащий 76404 атома. Атомная структура Al/Cu представляет собой монокристалл, состоящий из двух слоев (верхняя часть кристалла — Cu, нижняя — Al). Расстояние между двумя слоями принимается равным среднему значению параметров решетки обоих металлов $(a_{\text{Al}} + a_{\text{Cu}})/2 = 3.8 \text{ \AA}$. Периодические граничные условия применяются во всех направлениях. Поскольку приложены периодические граничные условия, верхняя поверхность образца аналогична границе между двумя материалами — композит состоит из бесконечного количества периодически повторяющихся слоев. Начальная структура релаксируется при 300 К.

Исследование проводится с использованием свободно распространяемого программного па-

кета LAMMPS и межатомного потенциала EAM для Al/Cu [44]. В системе поддерживается постоянная температура 300 К при помощи термостата Носе–Хувера. Используется алгоритм Верле с шагом интегрирования 2 фс. Визуализация данных моделирования и структурный анализ выполняются с использованием программы OVITO.

Для получения композитной структуры Al/Cu применяется одноосное сжатие, перпендикулярное границе перемешивания атомов (вдоль оси z), в сочетании с деформацией сдвига в плоскости границы перемешивания (xy). Далее в тексте этот тип обработки будет называться комбинированное сжатие. Подобная деформационная обработка может рассматриваться как аналог КГД [19–23]. Поскольку в эксперименте при КГД на бойках и, соответственно, на образце реализуется температура около 300 К (с локальным разогревом, который в данной работе не учитывается, поскольку точных данных по температурам из эксперимента получить невозможно) [19–23], в данной работе принята температура сжатия 300 К. Скорость деформации сжатия $\dot{\epsilon}_{zz} = 6.2 \times 10^{-8} \text{ пс}^{-1}$ и скорость сдвиговой деформации $\dot{\epsilon}_{xy} = 6.2 \times 10^{-7} \text{ пс}^{-1}$. Для простоты в дальнейшем деформация сжатия (compression) вдоль zz будет обозначаться как $\epsilon_{\text{ср}}$.

Для исследования механических свойств полученных композитов проводится одноосное растяжение перпендикулярно границе перемешивания атомов после комбинированного сжатия до разных степеней деформации, $\epsilon_{\text{ср}} = (0.042; 0.1; 0.16)$. Таким образом, структуры композитов, полученных после сжатия до разных структурных состояний, являются исходными для испытаний на растяжение без дополнительной релаксации или изменений. Временное сопротивление разрыву ($\sigma_{\text{УТФ}}$) и модуль Юнга (E) для всех композитов нормированы относительно временного сопротивления разрыву (σ_0) и модуля Юнга (E_0) исходного недеформированного образца.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 1 представлена кривая напряжение-деформация в процессе одноосного сжатия перпендикулярно границе перемешивания атомов, в комбинации с деформацией сдвига в плоскости границы. Эффективное напряжение рассчитывали, по формуле (1):

$$\bar{\sigma} = \sqrt{\frac{1}{2}[(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 + (\sigma_{yy} - \sigma_{zz})^2 + (\sigma_{xx} - \sigma_{zz})^2] + 3(\sigma_{xy}^2 + \sigma_{xz}^2 + \sigma_{yz}^2)}, \quad (1)$$

где σ_{xx} , σ_{yy} , σ_{zz} , σ_{xy} , σ_{xz} , σ_{yz} — шесть компонент напряжений, записанные в процессе сжатия.

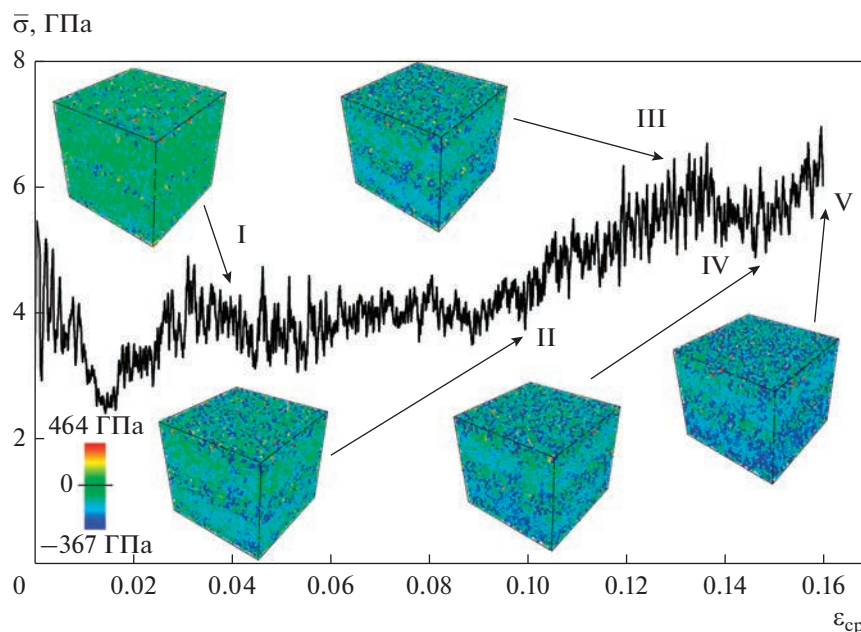


Рис. 1. Кривая напряжение–деформация в процессе деформационной обработки. Поатомное распределение напряжений σ_{zz} при: $\epsilon_{cp} = 0.042$ (I), $\epsilon_{cp} = 0.1$ (II), $\epsilon_{cp} = 0.13$ (III), $\epsilon_{cp} = 0.15$ (IV), $\epsilon_{cp} = 0.16$ (V).

На вставках на рис. 1 также представлено поатомное распределение напряжений σ_{zz} в структуре, при разных степенях деформации сжатия (точки I–V). Точки I–V выбраны в качестве репрезентативных в соответствии с ходом кривой.

В процессе сжатия картина поатомного распределения напряжений практически не меняется до степени деформации $\epsilon_{cp} = 0.04$, большинство атомов демонстрируют малые, в сравнении со всем диапазоном, напряжения, колеблющиеся вблизи нуля (зеленый цвет, интервал напряжений от -40 до 92 ГПа), однако на границе между металлами атомы имеют весь градиент напряжений от положительных до отрицательных. С увеличением деформации сжатия количество синих атомов (т.е. атомов, находящихся в области сжатия) увеличивается. До степени деформации сжатия $\epsilon_{cp} = 0.13$ такие атомы в основном сосредоточены на границе между металлами, однако затем отрицательные значения напряжения преобладают по всей структуре.

Для исследования структуры в процессе сжатия проводится анализ ближайших соседей атомов (CNA) и дислокационный анализ. Большинство дислокаций при сжатии сосредоточено в верхней части композита (в меди). Следует отметить, что программа OVITO не определяет тип кристаллической решетки на границе между металлами и не позволяет провести дислокационный анализ граничной области, что объясняется большим сжатием.

На рис. 2 представлены положения атомов при различных степенях сжатия: голубым и розовым – для $\epsilon_{cp} = 0.00$, желтым и фиолетовым – для $\epsilon_{cp} = 0.01$, черным и темно-синим – для $\epsilon_{cp} = 0.04$, оранжевым и голубым – для $\epsilon_{cp} = 0.08$, зеленым и красным – для $\epsilon_{cp} = 0.16$. Блок Си на рисунке смещен вправо для лучшей визуализации перемешивания атомов. Представлена только часть моделируемой ячейки вблизи границы раздела. Положения атомов при $0.01 < \epsilon_{cp} < 0.04$ и $0.08 < \epsilon_{cp} < 0.16$ не представлены, поскольку в этом интервале происходит постепенное движение атомов: атомы Al движутся к Си части образца и наоборот.

Видно, что активное перемешивание атомов начинается уже при степени деформации сжатия $\epsilon_{cp} = 0.01$. На начальной стадии сжатия атомы Al активнее движутся в левой части образца (фиолетовые и черные точки), тогда как атомы Си движутся в правой части (желтые и синие точки). До $\epsilon_{cp} = 0.04$ наиболее активно ведут себя атомы Al, после же тенденция меняется, в результате чего при больших степенях сжатия атомы Си смещаются глубже в блок Al.

Процесс взаимодиффузии атомов в процессе сжатия можно описать изменением среднего и максимального расстояния, пройденного атомами по сравнению с начальным положением границы, что представлено на рис. 3. Значение Δz_{max} (глубина диффузии) определяется как координата z атома, прошедшего максимальную глубину из одной части образца в другую через границу раздела (относительно начального положения

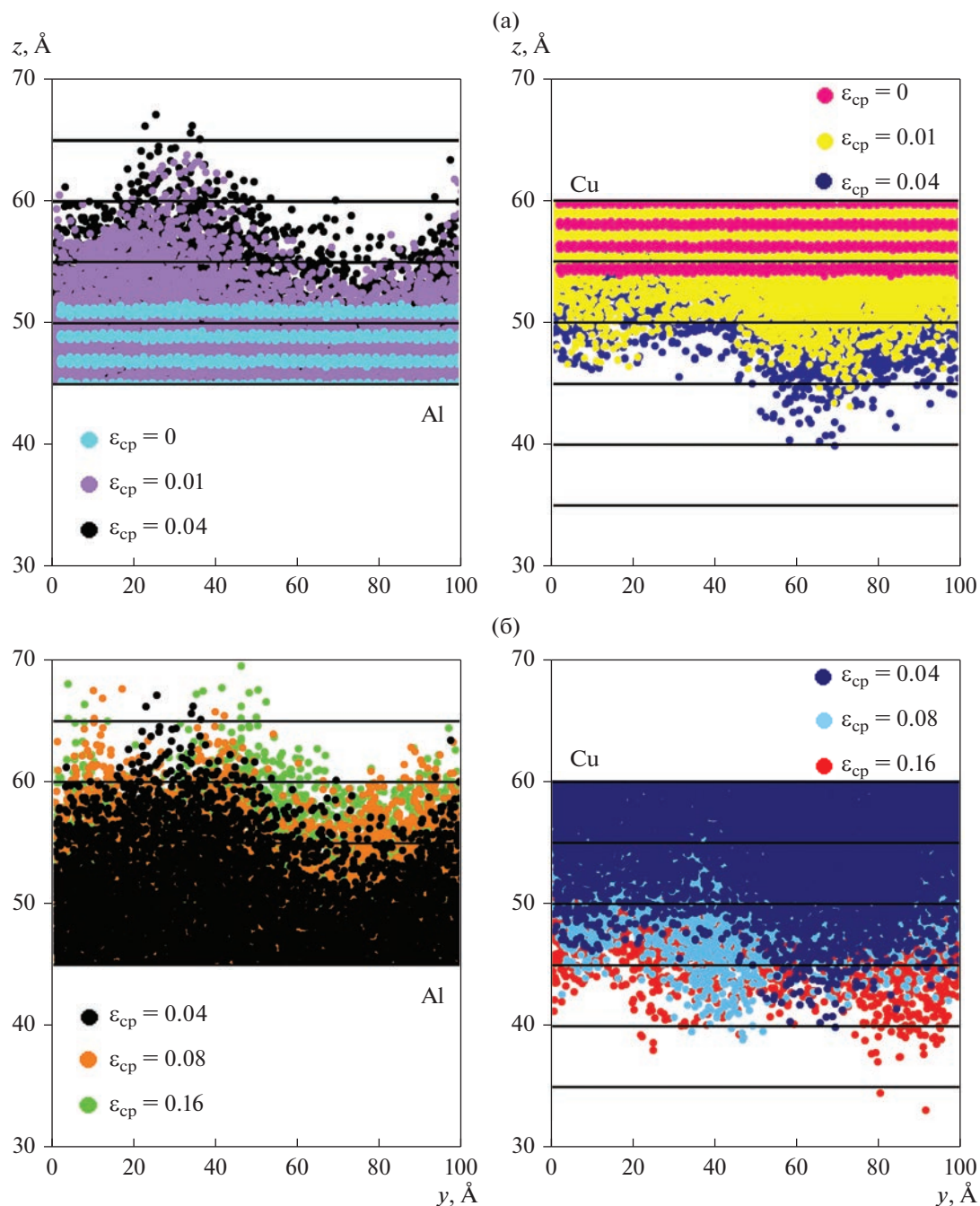


Рис. 2. Изменение атомных позиций на границе Al/Cu. Разные цвета соответствуют разным степеням деформации.

границы) в разные моменты времени. Значение Δz_{cp} определяется как среднее всех координат атомов, движущихся из одной части кристалла вдоль оси z , прошедших через границу раздела двух металлов (относительно начального положения границы). Таким образом, чтобы получить среднее значение, вычисляли длину пути, пройденного всеми атомами меди (алюминия) через границу раздела в область алюминия (меди), данные суммировали и затем были разделены на ко-

личество атомов, прошедших через границу. Численные данные показаны точками. Аппроксимирующие кривые показаны сплошными линиями.

Глубина диффузии при сжатии для Al/Cu логарифмически увеличивается с увеличением сжимающей деформации (также можно провести параллель с увеличением времени деформирования): $\Delta z_{max} = b \ln(\epsilon_{cp})$, где b — это наклон кривой ($b_{Al} = 1.9 \text{ Å/пс}$, $b_{Cu} = 3.2 \text{ Å/пс}$). Точки на графике на рис. 3 — расчетные данные, сплошные линии —

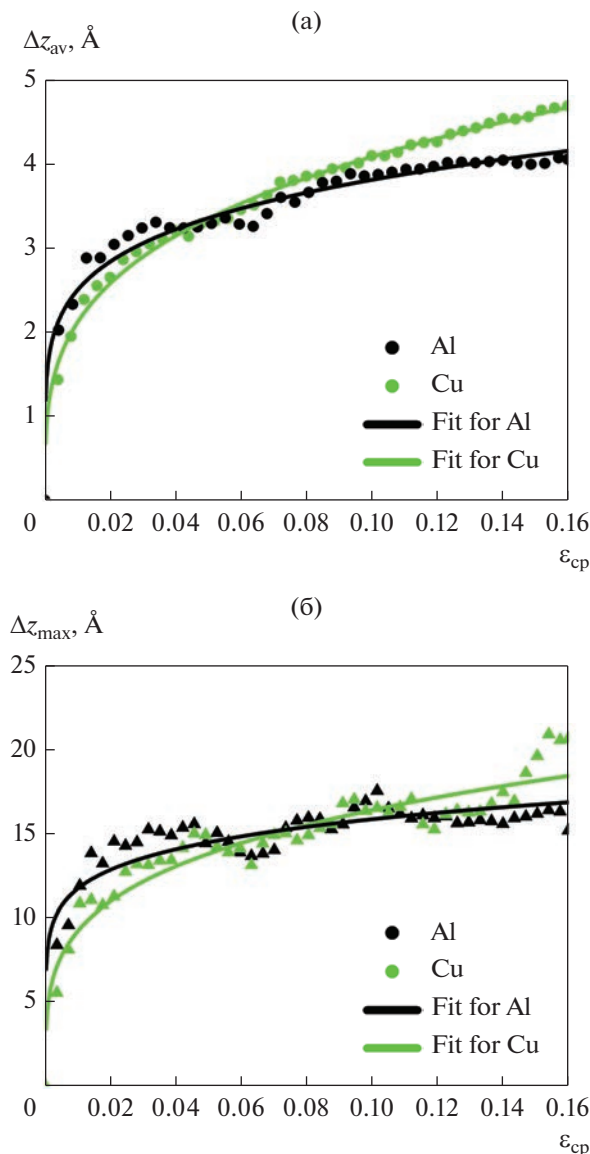


Рис. 3. Глубина диффузии (Δz) атомов Al и Cu в зависимости от деформации сжатия: (а) среднее значение, (б) максимальное.

аппроксимация. В данном примере описаны кривые на рис. 3б, однако кривые зависимости средней глубины диффузии аппроксимируются аналогичной зависимостью. Наиболее активное перемешивание атомов происходит до $\epsilon_{cp} < 0.04$. Атомы Al активнее проникают в блок Cu, чем атомы Cu в блок Al ($b_{Al} < b_{Cu}$ почти в два раза). После $\epsilon_{cp} = 0.04$ ход кривых близкий (наблюдается симметричная диффузия Al и Cu), скорость диффузии замедляется, и глубина диффузии приближается к ее максимальному значению. Однако средняя глубина диффузии для Cu больше, следовательно, атомы Cu лучше диффундируют в блок Al. Это можно объяснить тем, что радиус атомов Al больше, чем атомов Cu ($r_{Al} = 1.43 \text{ \AA}$, $r_{Cu} = 1.27 \text{ \AA}$).

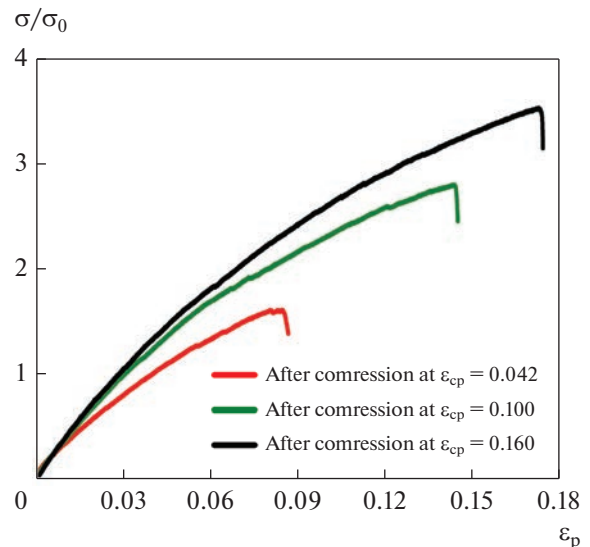


Рис. 4. Кривые напряжение-деформация в процессе одноосного растяжения нормально границе перемешивания атомов после комбинированного сжатия до разных степеней деформации: $\epsilon_{cp} = 0.042$ (I), $\epsilon_{cp} = 0.1$ (II), $\epsilon_{cp} = 0.16$ (III).

К сожалению, используемая для анализа структуры программа OVITO не позволяет в данном случае идентифицировать отдельные фазы, возникающие в процессе сжатия. Одна из причин — высокие приложенные сжимающие и сдвиговые деформации, что мешает анализу фаз на границе. Подобный анализ возможно было бы провести с помощью метода Монте-Карло, который ранее неоднократно использовали для различных бинарных систем и анализа перемешивания атомов и формирования сегрегаций в бинарных системах [45–48].

На рис. 4 представлены кривые напряжение-деформация в процессе одноосного растяжения нормально границе перемешивания атомов после комбинированного сжатия до разных степеней деформации: $\epsilon_{cp} = 0.042$ (I), $\epsilon_{cp} = 0.1$ (II), $\epsilon_{cp} = 0.16$ (V) (см. точки, отмеченные на рис. 1). Рассчитанные методом молекулярной динамики значения относительного временного сопротивления разрыву σ_{UTS}/σ_0 , деформации разрушения ϵ_p и модуля Юнга E/E_0 после растяжения для все трех структур представлены в табл. 1.

Растяжение начинается с упругой деформации (до $\epsilon_{cp} = 0.03$). После сжатия структуры до $\epsilon_{cp} = 0.042$ в процессе последующего растяжения происходит образование поры на границе перемешивания атомов, из чего можно сделать вывод, что данной степени сжатия было недостаточно для получения прочной композитной структуры. После сжатия до $\epsilon_{cp} = 0.1$ и $\epsilon_{cp} = 0.16$ разрушение в процессе последующего растяжения происходит

Таблица 1. Модуль Юнга (E/E_0), критические значения деформации (ϵ_F) и напряжения (σ_{UTS}/σ_0) для композита Al/Cu при растяжении после комбинированного сжатия до разных степеней деформации

Структура	ϵ_F	σ_{UTS}/σ_0	E/E_0
I ($\epsilon_{cp} = 0.042$)	0.084	0.7	0.89
II ($\epsilon_{cp} = 0.1$)	0.14	2.8	1.48
III ($\epsilon_{cp} = 0.16$)	0.17	3.54	1.60

в алюминиевой части композита. Таким образом, граница, где произошло перемешивание атомов, прочнее чем в части чистого металла. Чем выше приложенная деформация сдвига (сжатия), тем выше прочность композитной структуры.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На атомистическом уровне методом МД исследовано формирование композита Al/Cu в процессе одноосного сжатия комбинированного с деформацией сдвига. Настоящая работа представляет собой упрощение сценария, экспериментально реализованного ранее для получения композитов Al/металл методом КГД [13–17].

Установлено, что глубина диффузии атомов Al и Cu зависит от степени приложенной деформации. Наблюдается логарифмическая зависимость между глубиной диффузии и приложенной деформацией. Показано, что до степени деформации $\epsilon_{cp} = 0.04$ активнее ведут себя атомы Al, после чего тенденция меняется и при больших степенях сжатия атомы Cu проходят глубже в блок Al.

Из испытаний на растяжение установлено, что после достижения критического уровня сжатия, значительного упрочнения пограничной области не наблюдается. Однако, чем выше приложенная деформация сдвига, тем выше прочность композитной структуры.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Oliveira N.A., von Ranke P.J. Theoretical aspects of the magnetocaloric effect // Phys. Rep. 2010. V. 489. P. 89–153.
2. Zhang J., Song B., Wei Q., Bourell D., Shi Y. A review of selective laser melting of aluminum alloys: Processing, microstructure, property and developing trends // J. Mater. Sci. Technol. 2019. V. 35. P. 270–284.
3. Imran M., Khan A.R.A. Characterization of Al-7075 metal matrix composites: a review // J. Mater. Res. Technol. 2019. V. 8. P. 3347–3356.
4. Xu T., Yang Y., Peng X., Song J., Pan F. Overview of advancement and development trend on magnesium alloy // J. Magn. All. 2019. V. 7. P. 536–544.
5. Hirsch J., Al-Samman T. Superior light metals by texture engineering: Optimized aluminum and magnesium alloys for automotive applications // Acta Mater. 2013. V. 61(3). P. 818–843.
6. Lacaze J., Tierce S., Lafont M.-C., Thebault Y., P'eb'ere N., Mankowski G., Blanc C., Robidou H., Vaumousse D., Daloz D. Study of the microstructure resulting from brazed aluminium materials used in heat exchangers // Mater. Sci. Eng.: A. 2005. V. 413–414. P. 317–321.
7. Kala H., Mer K.K.S., Kumar S. A review on mechanical and tribological behaviors of stir cast aluminum matrix composites // Procedia Mater. Sci. 2014. V. 6. P. 1951–1960.
8. Mai T.A., Spowage A.C. Characterisation of dissimilar joints in laser welding of steel-kovar, copper–steel and copper–aluminium // Mater. Sci. Eng. A. 2004. V. 374. P. 224–233.
9. Mishra R.S., Mahoney M.W., McFadden S.X., Mara N.A., Mukherjee A.K. High strain rate superplasticity in a friction stir processed 7075 Al alloy // Scr. Mater. 1999. V. 42. P. 163–168.
10. Wei X.Z., Zhou Q., Xu K.W., Huang P., Wang F., Lu T.J. Enhanced hardness via interface alloying in nanoscale Cu/Al multilayers // Mater. Sci. Eng.: A. 2018. V. 726. P. 274–281.
11. Fronczek D.M., Chulist R., Litynska-Dobrzynska L., Kac S., Schell N., Kania Z., Szulc Z., Wojewoda-Budka J. Microstructure and kinetics of intermetallic phase growth of three-layered Al1050/AZ31/Al1050 clads prepared by explosive welding combined with subsequent annealing // Mater. Design. 2017. V. 130. P. 120–130.
12. Rahmatabadi D., Tayyebi M., Hashemi R., Faraji G. Microstructure and mechanical properties of Al/Cu/Mg laminated composite sheets produced by the ARB process // Int. J. Miner. Metall. Mater. 2018. V. 25. P. 564–572.
13. Shayanpoor A.A., Ashtiani H.R.R. Microstructural and mechanical investigations of powder reinforced interface layer of hot extruded Al/Cu bimetallic composite rods // J. Manuf. Process. 2022. V. 77. P. 313–328.
14. Shakouri S., Eghbali B. Characterization of Microstructure and Mechanical Properties of Multilayer Al/Cu/Mg/Ni Composite Produced through Accumulative Roll Bonding // Phys. Metals Metallogr. 2019. V. 120. P. 796–805.
15. Volkov A.Y., Kalonov A.A., Komkova D.A., Glukhov A.V. Structure and Properties of Cu/Mg Composites Produced by Hydrostatic Extrusion // Phys. Met. Metal. 2018. V. 119. P. 946–955.
16. Brodova I.G., Volkov A.Y., Shirinkina I.G., Kalonov A.A., Yablonskikh T.I., Astaf'ev V.V., Elokhina L.V. Evolution of the Structure and Properties of Al/Cu/Mg Ternary Composites during Thermomechanical Treatment // Phys. Met. Metal. 2018. V. 119. P. 1210–1216.
17. Grigoreva T.F., Petrova S.A., Kovaleva S.A., Dudina D.V., Batraev I.S., Kiseleva T.Yu., Zholudev S.I., Vosmerikov S.V.,

- Devyatkina E.T., Udalova T.A., Polyakov S.N., Lyakhov N.Z.* Mechanochemical Synthesis of Cu–Al Alloyed Powders and Their Consolidation by Spark Plasma Sintering // *Phys. Met. Metal.* 2021. V. 122. P. 681–687.
18. *Rodak K., Rzychoń T., Mikuszewski T., Chmiela B., Sozańska M., Boczek S.* Ultrafine-grained microstructures of Al–Cu alloys with hypoeutectic and hypereutectic composition produced by extrusion combined with reversible torsion // *Microsc. Microanal.* 2022. V. 28. P. 953–960.
19. *Mulyukov R.R., Korznikova G.F., Nazarov K.S., Khisamov R.K., Sergeev S.N., Shayakhmetov R.U., Khalikova G.R., Korznikova E.A.* Annealing-induced phase transformations and hardness evolution in Al–Cu–Al composites obtained by high-pressure torsion // *Acta Mech.* 2021. V. 232. P. 1815–1828.
20. *Korznikova G., Korznikova E., Nazarov K., Shayakhmetov R., Khisamov R., Khalikova G., Mulyukov R.* Structure and mechanical behavior of Al–Nb hybrids obtained by high-pressure-torsion-induced diffusion bonding and subsequent annealing // *Adv. Eng. Mater.* 2020. V. 23. P. 2000757.
21. *Korznikova G., Kabirov R., Nazarov K., Khisamov R., Shayakhmetov R., Korznikova E., Khalikova G., Mulyukov R.* Influence of constrained high-pressure torsion on microstructure and mechanical properties of an aluminum-based metal matrix composite // *JOM.* 2020. V. 72. P. 2898–2911.
22. *Korznikova G.F., Nazarov K.S., Khisamov R.K., Sergeev S.N., Shayakhmetov R.U., Khalikova G.R., Baimova J.A., Glezer A.M., Mulyukov R.R.* Intermetallic growth kinetics and microstructure evolution in Al–Cu–Al metal-matrix composite processed by high pressure torsion // *Mater. Lett.* 2019. V. 253. P. 412–415.
23. *Korznikova G., Korznikova E., Khalikova G., Nazarov K., Khisamov R., Sergeev S., Shayakhmetov R., Mulyukov R.* Al based layered in situ metal-matrix composites fabricated by constrained high pressure torsion // *Lett. Mater.* 2021. V. 11. P. 533–543.
24. *Rogachev S.O., Khatkevich V.M., Sundeev R.V.* High strength in layered metal composites obtained by high-pressure torsion // *Mater. Lett.* 2021. V. 303. P. 130567.
25. *Han J.-K., Han D.K., Liang G.Y., Jang J.-I., Langdon T.G., Kawasaki M.* Direct bonding of aluminum–copper metals through high-pressure torsion processing // *Adv. Eng. Mat.* 2018. V. 20. P. 1800642.
26. *Kulagin R., Beygelzimer Y., Ivanisenko Y., Mazilkin A., Straumal B., Hahn H.* Instabilities of interfaces between dissimilar metals induced by high pressure torsion // *Mater. Lett.* 2018. V. 222. P. 172–175.
27. *Kawasaki M., Han J.-K., Lee D.-H., Jang J.-I., Langdon T.G.* Fabrication of nanocomposites through diffusion bonding under high-pressure torsion // *J. Mater. Res.* 2018. V. 33. P. 2700–2710.
28. *Kawasaki M., Jang J.-I.* Micro-mechanical response of an Al–Mg hybrid system synthesized by high-pressure torsion // *Materials.* 2017. V. 10. P. 596.
29. *Cao M., Wang C.-J., Deng K.-K., Nie K.-B., Liang W., Wu Y.-C.* Effect of interface on mechanical properties and formability of Ti/Al/Ti laminated composites // *J. Mater. Res. Technol.* 2021. V. 14. P. 1655–1669.
30. *Bartkowska A., Bazarnik P., Huang Y., Lewandowska M., Langdon T.G.* Using high-pressure torsion to fabricate an Al–Ti hybrid system with exceptional mechanical properties // *Mater. Sci. Eng.: A.* 2021. V. 799. P. 140114.
31. *Bazarnik P., Bartkowska A., Huang Y., Szlkazak K., Adamczyk-Cieslak B., Sort J., Lewandowska M., Langdon T.G.* Fabrication of hybrid nanocrystalline Al–Ti alloys by mechanical bonding through high-pressure torsion // *Mater. Sci. Eng.: A.* 2022. V. 833. P. 142549.
32. *Nazarov A.A., Mulyukov R.R.* Handbook of Nanoscience, Engineering, and Technology // CRC Press, Boca Raton. 2002. P. 22–1–22–41.
33. *Karkina L.E., Karkin I.N., Gornostyrev Y.N.* Grain Boundary Sliding along Special Asymmetric Grain Boundaries in the Al Bicrystals: Atomistic Molecular Dynamics Simulation. // *Phys. Metals Metallogr.* 2021. V. 122. P. 1103–1111.
34. *Karkin I.N., Karkina L.E., Gornostyrev Y.N., Korzhavyi A.P.* Kinetics of Early Decomposition Stages in Diluted BCC Fe–Cu–Ni–Al Alloy: MC + MD Simulation. // *Phys. Solid State.* 2019. V. 61. P. 601–608.
35. *Karkina L.E., Karkin I.N., Kuznetsov A.R., Razumov I.K., Korzhavyi P.A., Gornostyrev Yu.N.* Solute–grain boundary interaction and segregation formation in Al: First principles calculations and molecular dynamics modeling. // *Comput. Mater. Sci.* 2016. V. 112. P. 18–26.
36. *Ding S., Wang X.* Strain rate and temperature effects on the mechanical properties of TiN/VN composite: Molecular dynamics study // *J. Alloys Compd.* 2020. V. 814. P. 152151.
37. *Su M., Deng Q., An M., Liu L., Chen L.* Role of amorphous layer and interfaces on the tensile behaviors of triple-phase Ti/Ni nanolaminates: A molecular dynamic study // *J. Alloys Compd.* 2021. V. 868. P. 159282.
38. *Han X., Liu P., Sun D., Wang Q.* Molecular dynamics simulations of the tensile responses and fracture mechanisms of Ti₂AlN/TiAl composite // *Theor. Appl. Fract. Mech.* 2019. V. 101. P. 217–223.
39. *Polyakova P.V., Baimova J.A.* Molecular dynamics simulation of diffusion in Mg–Al system under pressure // *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.* 2021. V. 1008. P. 012052.
40. *Polyakova P.V., Shcherbinin S.A., Baimova J.A.* Molecular dynamics investigation of atomic mixing and mechanical properties of Al/Ti interface // *Lett. Mater.* 2021. V. 11. P. 561–565.
41. *Polyakova P.V., Pukhacheva J.A., Shcherbinin S.A., Baimova J.A., Mulyukov R.R.* Fabrication of magnesium–aluminum composites under high-pressure torsion: Atomistic simulation // *Appl. Sci.* 2021. V. 11. P. 6801.
42. *Poletaev G.M., Rakitin R.Y.* Influence of Ni–Al interphase boundary orientation on the interdiffusion rate at temperatures above aluminum melting point: a molec-

- ular dynamics study // *Mater. Phys. Mech.* 2022. V. 48. P. 452–458.
43. *Poletaev G.M., Bebikhov Y.V., Semenov A.S., Starostenkov M.D.* Self-diffusion in melts of Ni–Al and Ti–Al systems: molecular dynamics study // *Lett. Mater.* V. 11. P. 438–441.
44. *Cai J., Ye Y.Y.* Simple analytical embedded-atom-potential model including a long-range force for fcc metals and their alloys // *Phys. Rev. B.* 1996. V. 54. P. 8398–8410.
45. *Karkin I.N., Karkina L.E., Korzhavyi P.A., Gornostyrev Yu.N.* Monte Carlo simulation of the kinetics of decomposition and the formation of precipitates at grain boundaries of the general type in dilute BCC Fe–Cu alloys // *Phys. Solid State.* 2017. V. 59. P. 106–113.
46. *Karkin I.N., Karkina L.E., Kuznetsov A.R., Petrik M.V., Gornostyrev Yu.N., Korzhavyi P.A.* Segregation of Mg to generic tilt grain boundaries in Al: Monte Carlo modeling // *Mater. Phys. Mech.* 2015. V. 24. P. 201–210.
47. *Shmakov I.G., Razumov I.K., Gorbatov O.I., Gornostyrev Yu.N., Korzhavyi P.A.* Decomposition kinetics in Fe–Cu dilute alloys. Monte Carlo simulation using concentration-dependent interactions // *JETP Letters.* 2016. V. 103. P. 112–116.
48. *Luo S.Y., Li J.H., Cui Y.Y., Dai Y., Liu B.X.* Monte Carlo simulations to study the forming ability and atomic configuration of the Cu–Al amorphous alloys // *Intermetallics.* 2012. V. 25. P. 109–114.