

Структурно-энергетические характеристики сплавов NiAl, имеющих отклонения от стехиометрического состава. Общие положения. Часть 1

А.И. Потехаев^{1,2}, А.А. Чаплыгина³, М.Д. Старостенков³, А.А. Клопотов^{2,4}, В.В. Кулагина^{2,5}, П.А. Чаплыгин³, Е.С. Марченко¹

¹Национальный исследовательский Томский государственный университет (Томск, Россия)

²Сибирский физико-технический институт им. акад. В.Д. Кузнецова (Томск, Россия)

³Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова (Барнаул, Россия)

⁴Томский государственный архитектурно-строительный университет (Томск, Россия)

⁵Сибирский государственный медицинский университет (Томск, Россия)

Structural and Energy Characteristics of NiAl Alloys with Deviations from Stoichiometric Composition. General Provisions. Part 1

A.I. Potekaev^{1,2}, A.A. Chaplygina³, M.D. Starostenkov³, A.A. Klopotov^{2,4}, V.V. Kulagina^{2,5}, P.A. Chaplygin³, E.S. Marchenko¹

¹National Research Tomsk State University (Tomsk, Russia)

²Siberian Physical-Technical Institute (Tomsk, Russia)

³Polzunov Altai State Technical University (Barnaul, Russia)

⁴Tomsk State University of Architecture and Building (Tomsk, Russia)

⁵Siberian State Medical University (Tomsk, Russia)

Результаты работы представлены в виде двух частей. В первой части приведены данные, описывающие общее состояние проблемы проявления слабоустойчивых структурно-фазовых состояний в интерметаллидах в системе Ni-Al. Описаны физические представления о слабоустойчивых структурно-фазовых состояниях в конденсированных системах и применяемая физико-математическая модель, в основе которой лежит расчетный блок из $32 \times 32 \times 32$ элементарных ячеек (65536 атомов) упорядоченной ОЦК-структуры (сверхструктура B2, символ Пирсона cP2). Исследование проведено в рамках метода Монте-Карло с использованием алгоритма Метрополиса на примере интерметаллида NiAl стехиометрического состава. Установлено, что при термоциклировании наблюдается своеобразный гистерезис, наличие которого свидетельствует о необратимости происходящих процессов, что подразумевает различие структурно-фазовых состояний на этапах нагрева и охлаждения.

Во второй части будут представлены результаты компьютерного моделирования изменения структурно-фазовых состояний с особым вниманием на слабоустойчивые предпереходные

The research results are presented in two parts. The first part presents data describing the general state of the problem of low-stability pre-transitional structural phase states in intermetallides of the Ni-Al system. Physical interpretations of low-stability structural phase states in condensed systems are described along with the applied physical-mathematical model based on a calculated block of $32 \times 32 \times 32$ elementary cells (65536 atoms) of an ordered BCC structure (superstructure B2, Pearson symbol cP2). The study is carried out by Monte Carlo methods using the Metropolis algorithm for an intermetallic NiAl sample of stoichiometric composition (used as an example). It is found out that a kind of hysteresis is observed during thermal cycling. The presence of such hysteresis indicates the irreversibility of the occurring processes. This implies a difference in the structural phase states at the heating and cooling stages.

The second part of the paper will demonstrate the results of a computer simulation of changes in structural phase states. The focus will be made on the low-stability pre-transitional structural phase states and energy characteristics of intermetallides

состояния и энергетические характеристики интерметаллидов с отклонениями от стехиометрического состава $Ni_{45}Al_{55}$ и $Ni_{55}Al_{45}$.

Ключевые слова: интерметаллид, NiAl, слабоустойчивые предпереходные состояния, атомный порядок, структурные дефекты.

DOI 10.14258/izvasu(2020)1-03

1. Введение

Металлические материалы с ОЦК-структурой в настоящее время широко используются из-за своих уникальных физико-механических свойств, особенно в высокотемпературной области слабоустойчивых предпереходных состояний. Например, интерметаллиды системы Ni-Al. Алюминид никеля активно исследуется как перспективный материал для авиационной и космической промышленности. Полезными характеристиками NiAl являются высокая температура плавления, относительно низкая плотность, хорошая химическая стойкость, высокая теплопроводность, высокая прочность, металлоподобные свойства.

Разные варианты фазовой диаграммы бинарной системы Ni-Al приведены в ряде работ и справочников [1–6]. Исследования по уточнению различных участков по этой диаграмме непрерывно продолжаются [6–9].

Сплавы из области эквиатомного состава обладают упорядоченной структурой B2 на основе ОЦК-решетки, и их принято называть β -сплавами [10]. Одним из важных свойств β -сплавов на основе NiAl является изменение типа твердого раствора в пределах области гомогенности. Так, в β -сплавах, содержащих менее 50 ат.% Al, образуются твердые растворы замещения на основе NiAl. В сплавах с концентрацией Al больше 50 ат.% создаются условия для образования твердых растворов вычитания на той же основе. При этом на подрешетке Ni растет концентрация вакансий с увеличением отклонения от стехиометрического состава NiAl. Очевидно, что такое образование твердых растворов замещения и вычитания в зависимости от отклонения состава от стехиометрического проявляется в разных физико-механических свойствах β -сплавов (твердость, предел прочности, плотность, хрупкость, коэффициент взаимной диффузии и т.д.) [10, 11].

Другим важным свойством сплавов системы Ni-Al является высокая энергия упорядочения. Интерметаллид NiAl и твердые растворы замещения на его основе обладают высокой степенью дальнего порядка, сохраняющейся во всей температурно-концентрационной области их существования вплоть до температуры плавления. Большая величина сил межатомного взаимодействия в решетке моноалюминид никеля и обуславливает главным образом

with deviations from the stoichiometric composition of $Ni_{45}Al_{55}$ and $Ni_{55}Al_{45}$.

Key words: intermetallic, NiAl, low-stability pre-transitional structural-phase states, atomic order, structural defects.

свойства β -сплавов [10]. Известно, что моноалюминид никеля характеризуется высокой температурой плавления (1638 °C) и большой теплотой образования. Кристаллы NiAl обладают сильной упругой анизотропией и связанной с ней анизотропией свойств по сравнению со структурами с неупорядоченной ОЦК-решеткой.

Сплавы системы Ni-Al обладают высокой энергией упорядочения и достигают значений 0,76 эВ на связь [12]. Это находит отражение в высоких значениях параметра дальнего порядка η в сплавах в области эквиатомного состава. Высокие значения η сохраняются в β -сплавах на основе NiAl вплоть до температуры плавления [12].

Необходимо отметить, что в β -сплавах, содержащих более 62,5 ат.% Ni, установлена не только слабая устойчивость, но и потеря устойчивости B2 структуры. Это явление проявляется в том, что при закалке от высокой температуры β -сплавов при этих концентрациях происходит мартенситное превращение, которое подавляется при медленном охлаждении. При медленном охлаждении успевает пройти процесс распада с образованием частиц γ' -Ni₃Al [10].

С другой стороны, сплавы системы Ni-Al обладают высокими значениями энтальпии образования интерметаллических соединений [13–16]. В β -сплавах из области эквиатомного состава установлено наибольшее значение энтальпии образования (по модулю). Такое сочетание высокой энергии упорядочения, большие значения энтальпии образования соединений в системе Ni-Al и проявление явления слабой устойчивости и потери устойчивости B2 структуры в β -сплавах, содержащих более 62,5 ат.% Ni, в процессе низкотемпературных отжигов ниже температуры 700 °C, находит отражение в образовании стабильного интерметаллического соединения Ni₅Al₃ (символ Пирсона oS16) и метастабильной фазы Ni₂Al (символ Пирсона tI6) и более высокого ранга, чем исходная структура B2 (символ Пирсона cP2) соединения NiAl [10].

β -сплавы моноалюминид никеля кристаллизуются уже в упорядоченном состоянии даже при закалке из жидкого состояния при спиннинговании на медный диск [17].

Очевидно, что свойства сплавов связаны со структурно-фазовым состоянием материалов, свой-

ствами и структурой фаз, которые имеют, как правило, структурные дефекты. Исследование свойств и структурно-фазового состояния материалов методами компьютерного моделирования позволяет детально изучить механизмы происходящих физико-химических процессов в предпереходной слабоустойчивой области [18, 19]. Знание структурных особенностей материала позволяет, естественно, определять набор его физических характеристик, оказывать влияние на конструирование новых материалов с заданным набором свойств.

Систематические исследования структурно-фазовых состояний металлических систем методами компьютерного моделирования привлекают пристальное внимание, так как удается вскрывать происходящие в системе физико-химические процессы и явления [20]. Например, ранее были рассмотрены особенности слабоустойчивых структурно-фазовых состояний в сплавах Cu-Pt с ГЦК-структурой [21], в сплавах CuZn [22], NiAl с ОЦК-структурой [19].

Моделированию выделений сегрегаций по границам зерен, образованию точечных и планарных дефектов, дефектов упаковки, расчету энергии межфазных границ в зависимости от кристаллографической ориентации, вкладу колебательных мод в свободную энергию в кристаллические структуры в сплавах системы Ni-Al посвящено очень много работ [23–34]. Однако работ, направленных на изучение слабоустойчивых структурно-фазовых состояний в интерметаллидах в системе Ni-Al в температурных и концентрационных областях, предшествующих структурным превращениям, очень мало. Поэтому мы постарались заполнить этот пробел.

Цель данной работы — исследовать с помощью метода Монте-Карло особенности структурно-фазо-

вых слабоустойчивых состояний при термоциклировании (на этапах нагрева и охлаждения) интерметаллида NiAl стехиометрического состава системы Ni-Al в области структурно-фазовых превращений.

2. Применяемые приближения и используемая модель

В качестве базовой диаграммы (рис. 1) будем использовать диаграмму из справочника Н.П. Лякишева [5]. В системе Ni-Al установлено существование четырех стабильных промежуточных фаз: Ni₃Al, NiAl, Ni₂Al₃, NiAl₃ (рис. 1). β-сплавы на основе NiAl обладают максимально широкой областью гомогенности от 43 ат.% до 70 ат.% при температуре 1400 °С. На диаграмме состояния видно, что эта область гомогенности β-сплавов сужается с повышением и понижением температуры.

Согласно литературным данным [13–16], установлено, что наибольшим значением энтальпии образования (по модулю) обладают β-сплавы из области эквиатомного состава (рис. 2).

Исследуем структурно-фазовые особенности слабоустойчивых предпереходных состояний и энергетические характеристики интерметаллических ОЦК-соединений на примере интерметаллида системы Ni-Al в процессе охлаждения в зависимости от атомного состава. Для этого рассмотрим структурно-фазовые состояния и энергетические характеристики трех сплавов: Ni 45ат.%-Al 55ат.% (Ni₄₅Al₅₅), Ni 50ат.%-Al 50ат.% (Ni₅₀Al₅₀), Ni 55ат.%-Al 45ат.% (Ni₅₅Al₄₅). Вначале рассмотрим структурно-фазовые состояния интерметаллида NiAl эквиатомного состава, который будет выступать в дальнейшем сравнительном анализе в качестве исходного. Стартовую конфигурацию сплава будем задавать путем случайного распределения атомов Ni и Al по узлам ОЦК-решетки в соответствии с заданными концентрациями компонент.

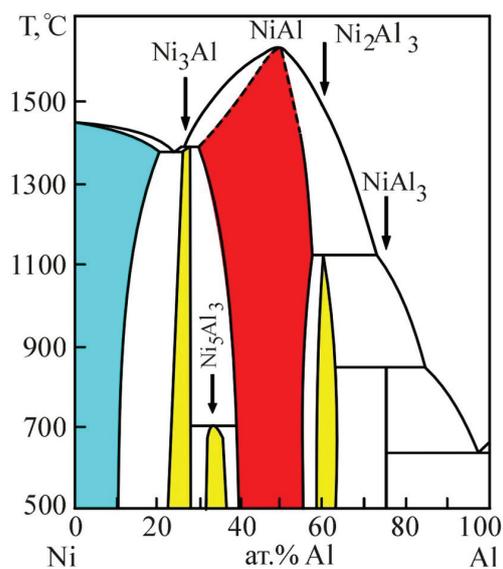


Рис. 1. Фазовая диаграмма системы Ni-Al [5]

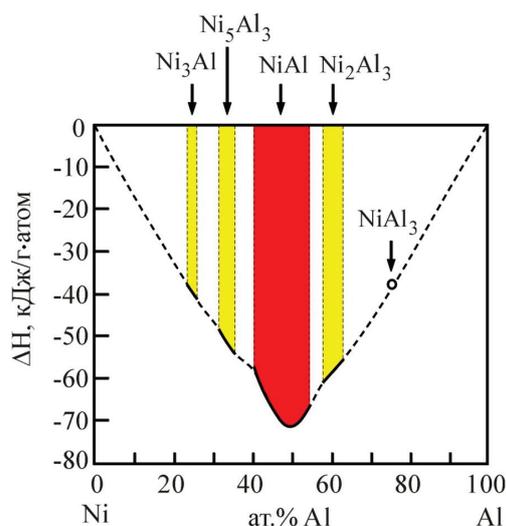


Рис. 2. Концентрационные зависимости энтальпии образования в интерметаллидных соединениях системы Al-Ni при 298 К [13]

Для активизации процесса диффузии в систему случайным образом вводится одна вакансия, что соответствует концентрации $\sim 1,5 \cdot 10^{-5}$. Рассматривается только вакансионный механизм диффузии. Динамическая или кинетическая составляющая присутствуют только в перескоках атомов в вакантные узлы.

Известно, что моноалюминид никеля NiAl плавится, находясь в упорядоченном состоянии [10]. Разупорядочение тем не менее при повышении температуры происходит. Считается, что температура разупорядочения интерметаллида NiAl выше температуры его плавления. По этой причине рассмотрим вначале в интерметаллиде NiAl гипотетические переходы порядок — беспорядок в ходе нагрева и беспорядок — порядок в ходе охлаждения, чтобы исследовать закономерности сложного атомного упорядочения-разупорядочения для целей повышения структурной стабильности и механических свойств жаростойких сплавов на основе β -фазы системы Ni-Al, и выявить влияние процессов разупорядочения при повышении температуры на свойства интерметаллида. Далее рассмотрим в интерметаллидах с отклонениями от стехиометрического состава $Ni_{45}Al_{55}$ и $Ni_{55}Al_{45}$ реализующиеся при охлаждении структурно-фазовые состояния, обращая особое внимание на слабоустойчивые предпереходные состояния. Температурный интервал таких состояний будет оценен из анализа гипотетических переходов порядок — беспорядок в ходе нагрева и беспорядок — порядок в ходе охлаждения в интерметаллиде NiAl.

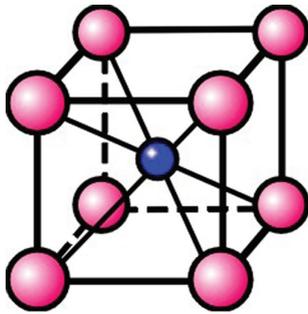


Рис. 3. Элементарная ячейка сверхструктуры B2 на основе ОЦК-решетки

Рассмотрим упорядоченную ОЦК-структуру со сверхструктурой B2 (рис. 3). Пусть модель (расчетный блок) включает $32 \times 32 \times 32$ элементарных ячеек (65536 атомов), при этом используем периодические граничные условия, что эффективно соответствует бесконечной системе с длинным периодом.

Взаимодействие между атомами сплава зададим, используя полуэмпирический парный потенциал

Морзе в виде: $\varphi(r_{ij}) = D_{KL} \beta_{KL} e^{-\alpha_{KL} r_{ij}} (\beta_{KL} e^{-\alpha_{KL} r_{ij}} - 2)$, где

$\alpha_{KL}, \beta_{KL}, D_{KL}$ — параметры потенциалов, описывающих связи атомов сортов $K-L$; r_{ij} — расстояние между

атомами. Конфигурационную энергию системы будем

рассчитывать как: $E = 1/2 \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M \varphi(r_i - r_j)$, где $r_i - r_j$ —

радиус-векторы атомов i и j ; N — количество атомов в системе, M — количество ближайших соседей, в которое включены атомы трех координационных сфер взаимодействия.

Для расчетов используем алгоритм Метрополиса метода Монте-Карло. Будем полагать, что состояние системы может изменяться только в дискретные моменты времени с шагом Δt . В данной работе не осуществляется переход к реальному времени, поэтому продолжительность каждого эксперимента определяется в условных единицах времени, равных числу перескоков атомов на место вакантных узлов, т.е. $\Delta t=1$ соответствует одной итерации. На каждой итерации рассчитывается вероятность перескока ближайшего к вакантному узлу атома i , находящегося от него на расстоянии до трех координационных сфер, на место

этой вакансии: $p_i = A^{-1} e^{-\frac{E_{\max} - (E_n^i - E_k^i)}{kT}}$ где E_n^i — энергия i -го атома в начальном положении; E_k^i — энергия i -го атома после перескока на место вакансии; A — константа нормировки; E_{\max} — максимальная разность начальной и конечной энергий атомов: $E_{\max} = \max_{0 \leq i \leq M} (E_n^i - E_k^i)$. Для определения константы

нормировки A строилось разбиение отрезка $[0;1]: 0 = A_0 < A_1 < A_2 < A_3 < \dots < A_{M-1} < A_M = 1$ так, чтобы $|A_i - A_{i-1}| = p_i$. Затем при помощи генератора случайных чисел выбиралось число $B \in [0;1]$ и определялся отрезок разбиения, которому это число принадлежало, т.е. находился атом с индексом j из условия: $A_{j-1} \leq B < A_j$. Для каждой температуры выполнялось $5 \cdot 10^6$ итераций, шаг изменения температуры составлял 100 К.

При исследовании особое внимание уделим изменениям конфигурационной энергии, параметров ближнего и дальнего порядка, структурно-фазовым слабоустойчивым состояниям в процессах нагрева (гипотетического разупорядочения) и охлаждения (гипотетического упорядочения).

Параметр ближнего порядка на i -й сфере будем определять в приближении Каули [35]:

$$\sigma_i^{AB} = 1 - \frac{P_i^{AB}}{C_B}$$

где C_B — концентрация атомов компоненты B; P_i^{AB} — вероятность образования для атома сорта A связи A-B на i -й координационной сфере.

Параметр дальнего порядка (усредненный по системе) будем рассчитывать в приближении Горского-

Брэгга-Вильямса [36]: $\eta = \frac{P_A^{(1)} - C_A}{1 - \nu}$, где $P_A^{(1)}$ — вероят-

ность заполнения атомами компоненты А узлов первого типа, C_A — концентрация атомов компоненты А в сплаве; ν — концентрация узлов первого типа.

3. Результаты и обсуждение

На основе используемой модели исследуем структурно-фазовые особенности слабоустойчивых предпереходных состояний и энергетические характеристики интерметаллических ОЦК-соединений

на примере интерметаллидов системы Ni-Al для эквивалентного состава сплава. Необходимо отметить, что для общего понимания природы явлений, происходящих в сплавах системы Ni-Al, необходимо изучить процессы влияния термоциклирования на структурно-фазовые состояния в интерметаллидах различного атомного состава: Ni₄₅Al₅₅, Ni₅₀Al₅₀, Ni₅₅Al₄₅.

При описании межатомного взаимодействия используем параметры потенциалов Морзе, приведенные в таблице.

Параметры потенциала Морзе для расчетов для интерметаллидных соединений в системе Ni-Al

Тип взаимодействия	$\alpha, \text{\AA}^{-1}$	β	D, эВ
Ni- Ni	1,360166	37,72	0,451
Ni-Al	1,073363	17,551	0,6016
Al -Al	1,024939	27,743	0,3724

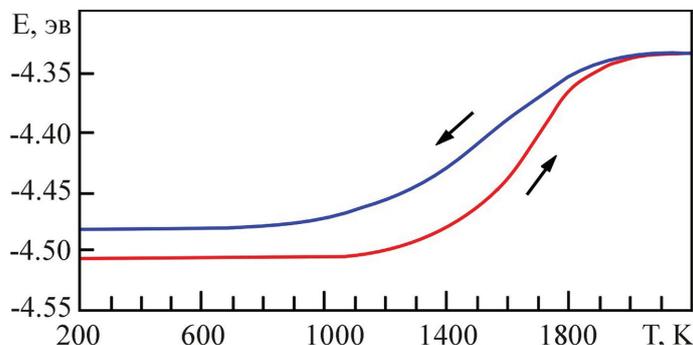


Рис. 4. Температурная зависимость средней конфигурационной энергии на атом в процессе последовательного нагрева и охлаждения. Стрелками показано направление нагрева и охлаждения

В результате проведенных расчетов были получены данные по изменению средней конфигурационной энергии на атом в процессе последовательного нагрева и охлаждения в интерметаллиде стехиометрического состава NiAl. По этим данным можно оценить температурный интервал изменения структурно-фазовых состояний (рис. 4). Видно, что изменение

средней конфигурационной энергии на атом при термоциклировании происходит в достаточно широком температурном интервале. На зависимостях $E=f(T)$ хорошо видно, что при температурах ниже 900 К энергия не изменяется ни при нагреве, ни при охлаждении, однако при охлаждении ее значения заметно выше. Постепенное увеличение значений энергии в диапа-

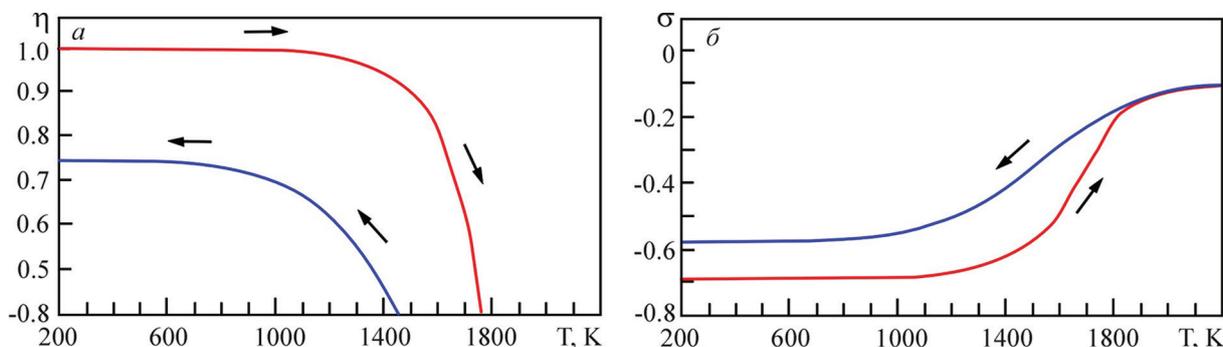


Рис. 5. Параметры дальнего (а) и ближнего (б) порядка в процессе последовательного нагрева и охлаждения. Стрелками показаны направления нагрева и охлаждения

зоне от 1000 К до 1400 К при росте температуры сменяется резким повышением в диапазоне от 1400 К до 1900 К, что соответствует, как можно полагать, реализации процессов разупорядочения (рис. 5), т.е. в этом температурном интервале происходит гипотетический фазовый переход порядок — беспорядок. При охлаждении значения энергии лежат выше, что естественно. Это свидетельствует о том, что для реализации процессов появления и повышения атомного порядка необходимо переохлаждение. Расхождение кривых нагрева и охлаждения означает необратимость диффузионных процессов при термоциклировании.

Наблюдаемое изменение энергии в интерметаллиде NiAl при нагреве отражает гипотетический пере-

ход порядок — беспорядок, а при охлаждении гипотетический переход беспорядок — порядок. При этом наблюдается своеобразный гистерезис, наличие которого свидетельствует о необратимости происходящих процессов при термоциклировании.

4. Заключение

Применение метода Монте-Карло в интерметаллиде NiAl стехиометрического состава системы Ni-Al показало, что при термоциклировании в результате реализации цикла нагрева и охлаждения наблюдается своеобразный гистерезис, наличие которого свидетельствует о необратимости происходящих процессов, что подразумевает различие структурно-фазовых состояний на этапах нагрева и охлаждения.

Библиографический список

1. Хансен М., Андерко К. Структуры двойных сплавов. М., 1962. Т. 1.
2. Вол А.Е. Строение и свойства двойных металлических систем. М., 1959. Т. 1.
3. Massalski T.B. Binary alloy phase diagrams // Ohio: American Society for Metals. Metals Park. 1986. Vol. 1.
4. Hilper K. and et. al. Phase diagram studies on Ni-Al system // Z. Naturforsch. 1987. Vol. 42A. URL: <https://doi.org/10.1515/zna-1987-1117>.
5. Лякишев Н.П. Диаграммы состояния двойных металлических систем. М., 1996. Т. 1.
6. Battezzati L., Baricco M., Pascale L. High temperature thermal analysis of Ni-Al alloys around the γ' composition // Scripta Mater. 1998. Vol. 39. URL: [https://doi.org/10.1016/S1359-6462\(98\)00129-8](https://doi.org/10.1016/S1359-6462(98)00129-8).
7. Wu X., Li Y., Huang M., Liu W., Hou Z. Precipitation kinetics of ordered γ' phase and microstructure evolution in a NiAl alloy // Mater. Chem. Phys. 2016. Vol. 182. URL: <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2016.07.013>.
8. Urrutia A., Tumminello S., Aricó S. F., Sommadossi S. Characterization of Al-Ni intermetallics around 30-60at% Al for TLPB application // Calphad. 2014. Vol. 44. URL: <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2013.08.004>.
9. Aune R., Battezzati L., Egry I. and et. al. Surface Tension Measurements of Al-Ni Based Alloys from Ground-Based and Parabolic Flight Experiments // Results from the Thermolab Project. Microgravity sci. technol. 2006. Vol. XVIII-3/4. URL: <https://doi.org/10.1007/BF02870383>.
10. Косицын С.В., Косицына И.И. Фазовые и структурные превращения в сплавах на основе моноалюминида никеля // Успехи физ. мет. 2008. Т. 9. URL: <https://doi.org/10.15407/ufm.09.02.195>.
11. Синельникова В.С., Подергин В.А., Речкин В.Н. Аллюминиды. Киев, 1965.
12. Hughes T., Lautenschlager E.P., Cohen J.B., Brittain J.O. X-ray diffraction investigation of β' -NiAl alloys // J. Appl. Phys. 1971. Vol. 42. URL: <https://doi.org/10.1063/1.1659674>.
13. Kubaschewski O. The heats of formation in the systems nickel – aluminium // Trans. Faraday Soc. 1952. Vol. 54. URL: <https://doi.org/10.1039/tf9585400814>.
14. Wang Y., Liu Z.K., Chen L.Q. Thermodynamic properties of Al, Ni, NiAl, and Ni₃Al from first-principles calculations // Acta Materialia. 2004. Vol. 52. URL: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2004.02.014>.
15. Arroyave R., Shin D., Liu Z.K. Ab initio thermodynamic properties of stoichiometric phases in the Ni-Al system // Acta Materialia. 2005. Vol. 53. URL: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2004.12.030>.
16. Rzyman K., Moser Z. Calorimetric studies of the enthalpies of formation of Al₃Ni₂, AlNi and AlNi₃ // Progress in Materials Science. 2004. Vol. 49. URL: <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2003.08.001>.
17. Menushenkov V.P., Gorshenkov M.V., Savchenko E.S., Zhukov D.G. Single-Phase Region on the Microstructure and Magnetic Properties of AlNi Alloys // Metallurgical and materials transactions A. 2015. Vol. 46. URL: <https://doi.org/10.1007/s11661-014-2677-3>.
18. Чаплыгин П.А., Потекаев А.И., Чаплыгина А.А., Старостенков М.Д., Клопотов А.А., Кулагина В.В., Гринкевич Л.С. Влияние концентрации вакансий на слабоустойчивые структурно-фазовые состояния и энергетические характеристики интерметаллида NiAl. Структурно-фазовые превращения ОЦК-сплава при термоциклировании // Известия вузов. Физика. 2015. Т. 58. № 4.
19. Потекаев А.И., Чаплыгина А.А., Чаплыгин П.А., Старостенков М.Д., Кулагина В.В., Клопотов А.А., Гринкевич Л.С. Влияние концентрации вакансий на слабоустойчивые структурно-фазовые состояния и энергетические характеристики интерметаллида NiAl // Известия вузов. Физика. 2019. Т. 62. № 1.

20. Потекаев А.И., Старостенков М.Д., Кулагина В.В. Влияние точечных и планарных дефектов на структурно-фазовые превращения в предпереходной слабоустойчивой области металлических систем. Томск, 2014.
21. Потекаев А.И., Чаплыгина А.А., Старостенков М.Д., Попова Л.А., Кулагина В.В., Клопотов А.А. Структурно-фазовые превращения сплавов системы Cu-Pt при атомном упорядочении // Известия вузов. Физика. 2012. Т. 55. № 7.
22. Чаплыгина А.А., Чаплыгин П.А., Старостенков М.Д., Потекаев А.И., Романенко В.В. Стабильность комплексов термических антифазных границ в процессе фазового перехода порядок — беспорядок в сплаве CuZn // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2016. Т. 13. № 3.
23. Mishin Y. Atomistic modeling of the γ and γ' -phases of the Ni-Al system // Acta Materialia. 2004. V. 52. № 6. URL: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2003.11.026>.
24. Brown A., Mishin Y. Segregation and structural transformations at $\Sigma=3$ grain boundaries in NiAl: A Monte-Carlo study // Acta Materialia. 2005. Vol. 53. № 7. URL: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2005.01.027>.
25. Lazarev N., Abromeit C., Schäublin R., Gotthardt R. Atomic-scale simulation of martensitic phase transformations in NiAl // Materials Science and Engineering. A. 2008. Vol. 481–482. URL: <https://doi.org/10.1016/j.msea.2007.05.105>.
26. Ya-Fang Guo, Yue-Sheng Wang, Wen-Ping Wu and Dong-Liang Zhao. Atomistic simulation of martensitic phase transformation at the crack tip in B2 NiAl // Acta Materialia. 2007. Vol. 55. URL: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2007.03.002>.
27. Ozgen S., Adiguzel O. Investigation of the thermoelastic phase transformation in a NiAl alloy by molecular dynamics simulation // Journal of Physics and Chemistry of Solids. 2004. Vol. 65. URL: <https://doi.org/10.1016/j.jpics.2003.09.004>
28. Kazanc S., Tatar C. Investigation of the effect of pressure on some physical parameters and thermoelastic phase transformation of NiAl alloy // International Journal of Solids and Structures. 2008. Vol. 45. URL: <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2008.01.027>.
29. Zhang F., Chang Y.A., Du Y., Chen S.-L., Oates W.A. Application of the cluster-site approximation (CSA) model to the f.c.c. phase in the Ni-Al system // Acta Materials. 2003. Vol. 51. URL: [https://doi.org/10.1016/S1359-6454\(02\)00392-0](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(02)00392-0).
30. Arroyave R., Shin D., Liu Z.-K. Ab initio thermodynamic properties of stoichiometric phases in the Ni-Al system // Acta Materialia. 2005. Vol. 53. URL: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2004.12.030>.
31. Songy., Guo Z.X., Yang R., D. Li. First principles study of site substitution of ternary elements in NiAl // Acta mater. 2001. Vol. 49. URL: [https://doi.org/10.1016/S1359-6454\(01\)00052-0](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(01)00052-0).
32. Zhang T., Guo H.-B., Gong S.-K., Xu H.-B. Existence patterns of Dy in b-NiAl from first-principles calculations // Rare Met. 2016. Vol. 35(4). URL: <https://doi.org/10.1007/s12598-014-0393-1>.
33. Chen K., Zhao L.R., Tse J.S. Sulfur embrittlement on γ/γ' interface of Ni-base single crystal superalloys // Acta Materialia. 2003. Vol. 51. URL: [https://doi.org/10.1016/S1359-6454\(02\)00512-8](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(02)00512-8).
34. Xie X., Mishin Y. Monte Carlo simulation of grain boundary segregation and decohesion in NiAl // Acta Materialia. 2002. Vol. 50. URL: [https://doi.org/10.1016/S1359-6454\(02\)00262-8](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(02)00262-8).
35. Иверонова В.И., Кацнельсон А.А. Ближний порядок в твердых растворах. М., 1977.
36. Кривоглаз М.А., Смирнов А.А. Теории упорядочивающихся сплавов. М., 1958.