

УДК 538.91:519.876

Распознавание синтезируемых интерметаллических прослоек на границе раздела в наночастицах со структурой Ti@Al «ядро — оболочка» на основе молекулярно-динамического моделирования*В.И. Иордан, И.А. Шмаков*

Алтайский государственный университет (Барнаул, Россия)

Recognition of Synthesized Intermetallic Interlayers at the Interface in Ti@Al "Core — Shell" Nanoparticles Based on Computer Molecular-Dynamic Simulation*V.I. Jordan, I.A. Shmakov*

Altai State University (Barnaul, Russia)

Представлены результаты применения ранее разработанного авторами нового метода, предназначенного для распознавания пространственных 3D-распределений синтезируемых интерметаллидов в объеме наночастицы на основе предварительно вычисленных наборов 3D-распределений плотности вещества. Набор 3D-распределений плотности вещества в объеме кубической наночастицы со структурой Ti@Al «ядро — оболочка» соответствует набору последовательных моментов времени и рассчитывается на основе результатов компьютерного молекулярно-динамического моделирования самораспространяющегося высокотемпературного синтеза в наночастице. По результатам вычислительных экспериментов, проведенных с помощью программного пакета LAMMPS, выполнены термический и микроструктурный анализы с подтверждением многостадийности механизма образования интерметаллических фаз по ходу реакции СВС в реакционной среде Ti-Al. Рассчитаны наборы 3D-распределений плотности вещества и 3D-распределений синтезируемых интерметаллидов в объеме наночастицы, соответствующие последовательности моментов времени. В статье показано преимущество метода распознавания 3D-распределений синтезируемых интерметаллидов, предложенного авторами, над методами подобного анализа, встроенными в программный пакет OVITO.

Ключевые слова: СВ-синтез, молекулярно-динамическое моделирование, наночастица «ядро — оболочка», кристаллическая решетка, интерметаллиды.

The paper presents the results of applying a new method, previously developed by the authors, based on precalculated sets of 3D distributions of a matter density. The method is designed to recognize the spatial 3D distributions of the synthesized intermetallic compounds in the volume of a nanoparticle. A set of 3D distributions of a matter density in the volume of a cubic Ti@Al core — shell nanoparticle corresponds to a set of successive time points. It is calculated based on the results of the computer molecular dynamics simulation of self-propagating high temperature synthesis in the nanoparticle. Computational experiments are performed using the LAMMPS software package. Based on the obtained results, thermal and microstructural analyses are performed, confirming the multistage mechanism for the formation of intermetallic phases during the SHS reaction in the Ti-Al reaction medium. The sets of 3D distributions of the matter density and 3D distributions of synthesized intermetallic compounds in the volume of a nanoparticle corresponding to the sequence of time points are calculated. The paper shows the advantage of the method for recognizing 3D distributions of synthesized intermetallic compounds, proposed by the authors, over the methods of similar analysis built into the OVITO software package.

Key words: SH-synthesis, molecular-dynamics simulation, "core — shell" nanoparticle, crystal cell, intermetallics.

DOI: 10.14258/izvasu(2023)1-04

Введение

Наряду с различными эффективными технологиями получения новых материалов с уникальными функциональными характеристиками используется и технология самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС). Воспламенение (зажигание) наружного слоя смеси частиц порошков, например Ti-Al, вызывает интенсивное тепловыделение (иначе говоря, «горение») в результате экзотермической химической реакции СВС с последующим распространением волны горения по объему порошковой смеси. Синтезируемые СВС-материалы находят применение в современных авиационных двигателях и другой технике.

Исследование микрокинетики структурно-фазовых превращений интерметаллидов (в т.ч. и алюминидов титана) в теоретическом плане можно достаточно эффективно выполнять методом молекулярно-динамического моделирования (МД-моделирования) с использованием программных пакетов в конфигурации параллельных вычислений, таких как LAMMPS, OVITO [1–3], на базе суперкомпьютеров и кластерных вычислительных систем.

В задачах исследования микрокинетики СВС в нано- и микроразмерных слоистых [4–6], слоисто-блочных [7] атомных системах большой интерес представляет собой изучение процессов зарождения и превращений интерметаллических фаз на границах раздела слоев и блоков. Например, в сферической наночастице со структурой Ni@Al «ядро — оболочка» [8] сферическое Ni-ядро состоит из кристаллических ячеек атомов Ni, а окружающая ядро сферическая оболочка содержит кристаллические ячейки

атомов Al. Интерес к таким структурам обоснован тем, что структурные изменения и фазовые превращения в наноблоках со структурой «ядро — оболочка» существенно влияют на формирование структурных свойств и элементарных процессов в мезо- и макросистемах реагирующей среды [9–13]. Компьютерное моделирование на высокопроизводительных вычислительных платформах вместо проведения физических экспериментов позволяет избежать больших затрат времени и материальных ресурсов.

В данной статье исследуется микрокинетика структурно-фазовых превращений в наночастице со структурой Ti@Al «ядро — оболочка», в которой сферическое ядро состоит из атомов Ti и дополняющая до куба оболочка — из атомов Al (см. рис. 1). В статье рассмотрены результаты распознавания интерметаллидов, синтезируемых на границе раздела Ti-ядра и Al-оболочки.

Краткое описание этапов МД-моделирования СВС в кубической наночастице со структурой Ti@Al «ядро — оболочка»

На рисунке 1 показано схематичное изображение (в перспективе) для кубической наночастицы Ti@Al «ядро — оболочка», подобное изображению аналогичной кубической наночастицы Ni@Al «ядро — оболочка», исследованной в [14, 15]. Атомная структура кубической наночастицы построена с помощью пакета LAMMPS. Размер куба и диаметр Ti-ядра практически совпадают и равны 25 нм. В центрах всех шести граней куба наблюдаются одинаковые круги с «ореолами» кольцевой формы — это атомы Ti (рис. 1а, б).

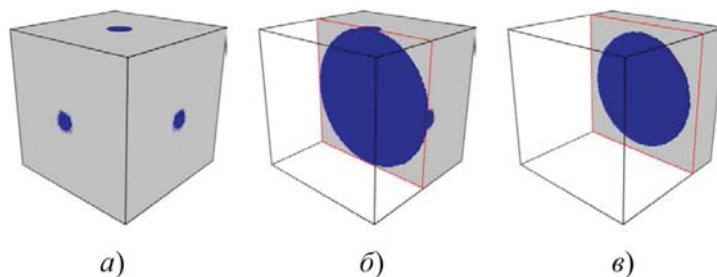


Рис. 1. Схематичное изображение (в разрезе) для наночастицы Ti@Al «ядро — оболочка»: а — полный объем; б — половина объема; в — четверть объема

Суммарное число атомов N в наночастице равно 903 726: из них 450 702 атома Ti и 453 024 атома Al. В Ti-ядре построена атомная структура с ячейками гексагональной плотной упаковки (ГПУ). ГПУ-ячейки (англ., *hcp* — hexagonal close packed) характеризуются следующими параметрами: параметр $a=0.29508$ нм и параметр $c=0.46855$ нм [16]. Структура оболочки содержит атомы Al с ячейками гранецентрированной кубической (ГЦК) структуры (англ., *fcc* — face centered

cubic): параметр $a=0.405$ нм [16]. Стехиометрическое соотношение (отношение числа атомов Ti к числу атомов Al) равно $N_{Ti}/N_{Al}=0.9949$ и соответствует фазе TiAl. МД-моделирование СВС разделяется на 3 этапа.

На 1-м этапе в течение 0.4 нс при температуре 800 К прогревание всего объема наночастицы в условиях канонического NPT-ансамбля ($N=903726$, $P=1$ Бар, $T=800$ К) обеспечивает «релаксацию» атомной структуры наночастицы, при этом были установлены пе-

риодические граничные условия по всем трем измерениям, которые сохраняются и на следующем этапе в течение 0.1 нс.

На 2-м этапе в течение 0.1 нс часть куба с размерами 10x25x25 нм (от плоской грани YZ с координатой X=0 и до параллельной ей секущей плоскости с координатой X=10 нм) прогревалась от 800 до 1400 К с соблюдением условий NVT-ансамбля (V — объем зоны прогрева), а в оставшейся части объема (по координате X от 10 до 25 нм) — условий NVE-ансамбля (E — суммарная энергия всех атомов этой части объема). Далее на 3-м этапе (позднее 0.5 нс) в наночастице фиксировались «свободные» граничные условия вдоль оси X, а по направлениям Y и Z сохранялись периодические условия и условия NVE-ансамбля. В начальной зоне наночастицы (в пределах 10 нм по оси X), начиная с 0.5 нс, инициировалась волна горения СВС в направлении оси X.

Анализ температурных профилей волны горения и методические аспекты распознавания 3D-распределения интерметаллидных прослоек на границе раздела «ядро — оболочка» наночастицы Ti@Al

Используя пакет LAMMPS в параллельной версии и потенциал межатомного взаимодействия в модели

«погруженного атома» (англ., *embedded atom model* — EAM) [16], были получены результаты моделирования СВС в наночастице Ti@Al с сохранением их на внешнем диске. Кроме того, ранее была создана программа [7, 11], которая позволяет рассчитывать профили температуры и плотности вещества (одномерные распределения температуры и плотности в виде двух одномерных массивов) вдоль одного направления, например, вдоль оси X. Значения температуры и плотности определяются для каждого тонкого слоя с размерами 4x25x25 нм как «осредненные» значения, соответственно температуры и плотности каждого слоя наночастицы. На рисунке 2 показан рассчитанный набор профилей температуры вдоль направления горения (вдоль оси X) для указанных в «легенде» рисунка моментов времени. Значения температуры «привязаны» к центрам слоев с X-координатами (в нм): 2, 6, 10, 14, 18, 22. На «классическом» температурном профиле фронтального (последнего) горения (маркер времени 0.5 нс) наблюдается превышение температуры воспламенения над максимумом температуры прогрева в 1400 К (вдоль оси X вплоть до 6 нм). Превышение в 90 К (вдоль оси X до 2 нм) определяет так называемую «сверхадиабатическую» температуру воспламенения (порядка 1490 К).

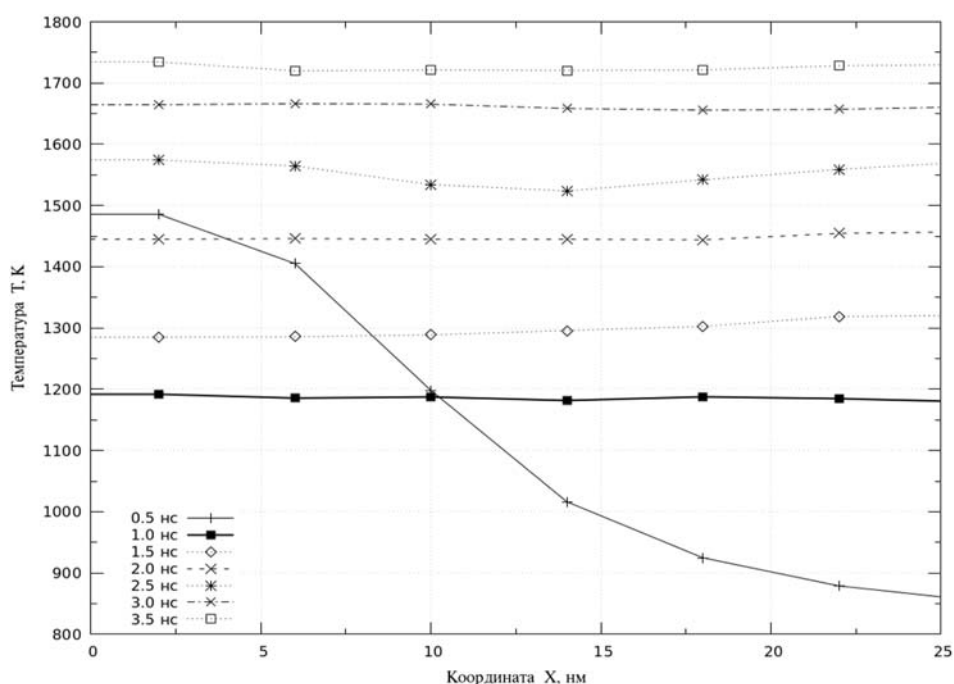


Рис. 2. Набор температурных профилей, соответствующих последовательности моментов времени, указанных в «легенде» рисунка

Осредненное выравнивание температуры в объеме наночастицы (после прохождения 15 нм волной горения от 10 нм до 25 нм) происходит за время 0.5 нс (к моменту времени 1 нс), и оценка скорости фронта

горения в 30 м/с получена делением 15 нм на 0.5 нс. Далее осредненная (по объему) температура горения довольно быстро возрастает до 1730 К (в силу замкнутости системы отсутствует внешний теплоотвод).

Такой режим СВ-синтеза подобен режиму «теплого взрыва», так как скорость роста температуры оказывается порядка $200 \cdot 10^9$ К/с.

Авторами ранее была создана «специальная» программа [14, 15], позволяющая вычислять наборы 3D-распределений температуры и плотности вещества в объеме наночастицы и на их основе распознавать наборы 3D-распределений интерметаллидных прослоек на границе раздела «ядро — оболочка» наночастиц Ni@Al. В работах [14, 15] предложена вычислительная процедура метода для «распознавания» 3D-распределений интерметаллидных прослоек, синтезируемых на границе раздела «ядро — оболочка» наночастиц Ni@Al, применимая и для наночастиц Ti@Al и других подобных частиц. Идея и суть этого метода распознавания в кратком виде состоит в следующем.

Весь объем кубической наночастицы разбивается по трем измерениям на одинаковые малые кубики, например с размерами $1.25 \times 1.25 \times 1.25$ нм. С учетом размера кубической наночастицы в 25 нм (по 20 кубиков по каждому из трех измерений) общее количество кубиков равно $8000 = 20 \times 20 \times 20$. Выполняя трехмерный вложенный цикл, в каждом кубике определяют количество атомов Ti и Al, затем вычисляется общая масса атомов в кубике. Поделив общие массы атомов в кубиках на один и тот же объем кубика (1.953125 нм^3), получаем 3D-распределение плотности вещества в на-

ночастице (3-мерный массив значений по 8000 кубикам) для заданного момента времени (аналогично и для других моментов времени). Подсчитывая общие кинетические энергии атомов в каждом кубике и нормируя их с учетом константы Больцмана, аналогично определяем 3D-распределения температуры, соответствующие заданной последовательности моментов времени. Оба набора 3D-распределений (плотности вещества и температуры), соответствующих последовательности моментов времени, сохраняются на внешнем диске. Далее будем их называть «эмпирическими» распределениями.

В работе [17] приведены экспериментальные данные значений плотностей компонентов Ti, Al и их интерметаллических фаз в зависимости от температуры. На основе этих данных авторами обобщены аналитические зависимости плотностей вещества от температуры $\rho_{lS}(T)$ и $\rho_{lL}(T)$, где l — номер фазы (от 1 до 7), индексы S и L обозначают состояния фаз, соответственно «твердое» и «жидкое» (см. табл.). В таблице в скобках формул со знаком «минус» указаны значения температур плавления фаз:

$$\begin{aligned} T_{melt,1} &= T_{melt,\alpha-Ti} = 1156 \text{ K}, & T_{melt,2} &= T_{melt,\beta-Ti} = 1943 \text{ K}, \\ T_{melt,3} &= T_{melt,Ti_3Al} = 1453 \text{ K}, & T_{melt,4} &= T_{melt,TiAl} = 1733 \text{ K}, \\ T_{melt,5} &= T_{melt,TiAl_2} = 1488 \text{ K}, & T_{melt,6} &= T_{melt,TiAl_3} = 1628 \text{ K}, \\ T_{melt,7} &= T_{melt,Al} = 933.6 \text{ K}. \end{aligned}$$

Аналитические зависимости плотностей для Ti, Al и интерметаллических фаз системы Ti-Al (в твердом (S) и жидком (L) состояниях), $T_0 = 300 \text{ K}$, $T_{max} = 2000 \text{ K}$

Фазы	В твердом состоянии: $T_0 \leq T < T_{melt,l}$	В жидком состоянии: $T_{melt,l} \leq T < T_{max}$
1. α -Ti	$\rho_{1S}(T) = 4.506 - 1.59 \cdot 10^{-4}(T - 300)$	
2. β -Ti	$\rho_{2S}(T) = 4.38 - 1.525 \cdot 10^{-4}(T - 1156)$	$\rho_{2L}(T) = 4.12 - 2.2 \cdot 10^{-4}(T - 1943)$
3. Ti_3Al	$\rho_{3S}(T) = 4.2 - 2.0 \cdot 10^{-4}(T - 300)$	$\rho_{3L}(T) = 3.9 - 2.2 \cdot 10^{-4}(T - 1453)$
4. TiAl	$\rho_{4S}(T) = 3.8 - 2.0 \cdot 10^{-4}(T - 300)$	$\rho_{4L}(T) = 3.4 - 2.2 \cdot 10^{-4}(T - 1733)$
5. $TiAl_2$	$\rho_{5S}(T) = 3.65 - 2.0 \cdot 10^{-4}(T - 300)$	$\rho_{5L}(T) = 3.16 - 2.2 \cdot 10^{-4}(T - 1488)$
6. $TiAl_3$	$\rho_{6S}(T) = 3.3 - 2.0 \cdot 10^{-4}(T - 300)$	$\rho_{6L}(T) = 2.92 - 2.2 \cdot 10^{-4}(T - 1628)$
7. Al	$\rho_{7S}(T) = 2.699 - 3.736 \cdot 10^{-7}(T - 300)^2$	$\rho_{7L}(T) = 2.368 - 2.667 \cdot 10^{-4}(T - 933.6)$

Уже имея в распоряжении рассчитанные эмпирические значения плотности и температуры, при выполнении трехмерного вложенного цикла для каждого кубика по значению температуры вычисляются «теоретические» значения плотностей семи фаз с использованием формул, указанных в таблице. Если эмпирическое значение плотности анализируемого кубика отличается в относительном смысле (и по модулю) от теоретического значения плотности какой-либо фазы с номером l (для твердого либо жидкого состояния) не более чем на заданную пользователем малую величину γ (например, $\gamma = 0.05$ или в процентах — 5%), тогда принима-

ется решение о том, что анализируемый кубик заполнен l -ой фазой. Иначе принимается решение, что кубик заполнен смесью тех двух фаз, между теоретическими значениями плотностей которых находится эмпирическое значение плотности анализируемого кубика.

Анализ результатов вычислительных экспериментов по распознаванию пространственного 3D-распределения интерметаллидов в объеме наночастицы со структурой Ti@Al «ядро — оболочка»

Авторами реализованы программы для 3D-распознавания и визуализации 3D-распреде-

лений интерметаллидов в наночастице. Визуализация такого 3D-распределения интерметаллидов по объему наночастицы представляется набором 2D-решеток (из 20 решеток), перпендикулярных оси X. Каждая 2D-решетка (размерностью 20x20 кубиков) с номером N_x , параллельная плоскости YZ, содержит по 400 кубиков. На рисунках 3–5 показаны «карты» распределения фаз (2D-решетки квадратики размерностью 20x20), соответствующие

2D-решеткам кубиков с определенными номерами N_x и для различных моментов времени τ (например, $\tau=0.5, 2.0$ и 2.5 нс). Квадратики различаются цветовыми оттенками и номерами интерметаллических фаз, в том числе квадратики с «двойными» номерами для смесей фаз: 1 — α -Ti; 2 — β -Ti; 3 — Ti_3Al ; 4 — TiAl; 5 — $TiAl_2$; 6 — $TiAl_3$; 7 — Al; 10 — жидкий Al (или 7L).

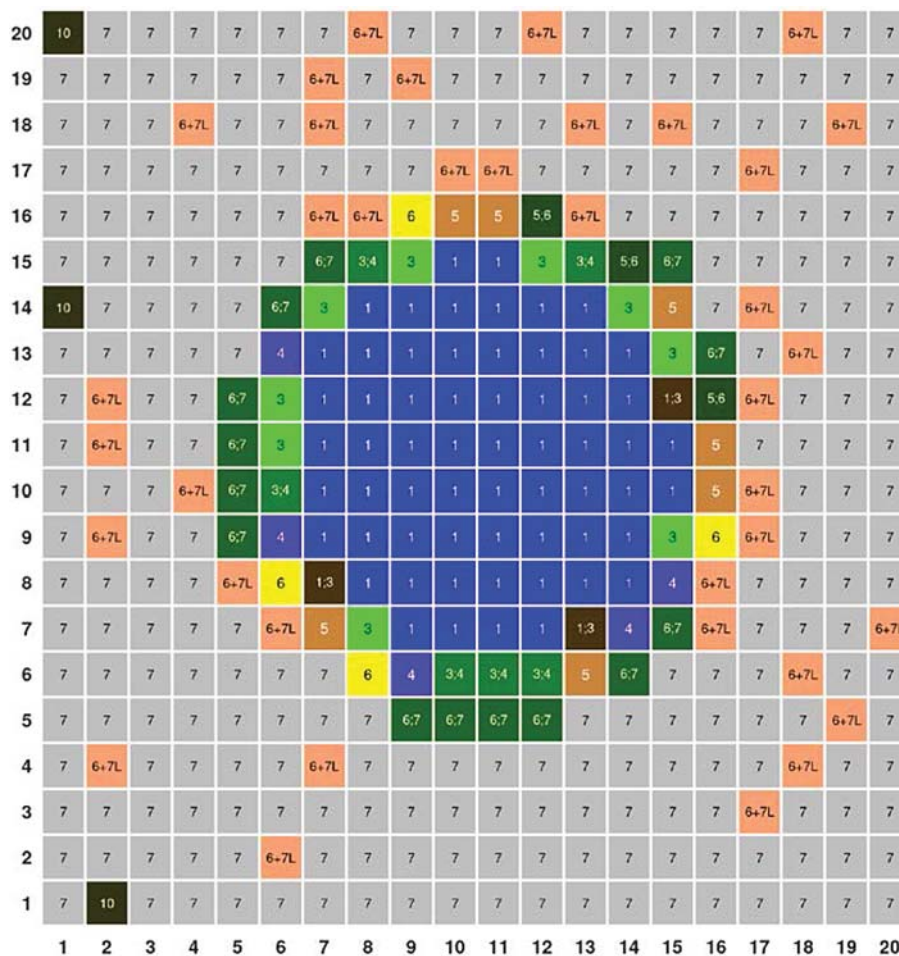


Рис. 3. Карта распределения фаз: $\tau=0.5$ нс; $N_x=18$

Например, квадратик с двойным номером «1;3» на рисунке 3 указывает на смесь фаз Ti и Ti_3Al (двухфазная область продуктов СВС), квадратик «6+7L» — 6 фаза ($TiAl_3$) в жидком Al. На примере слоя с номером $N_x=18$ (т.е. $X=22.5$ нм) видно (рис. 3), что в начале процесса СВС ($\tau=0.5$ нс) на границе раздела между Ti-ядром и Al-оболочкой (в твердой фазе) зарождаются все интерметаллические фазы (с номерами 3, 4, 5, 6), но среди них преобладает 6-я фаза ($TiAl_3$). Затем к моменту времени $\tau=2.0$ нс заметно утолщается сферический слой 6-й фазы ($TiAl_3$) и уменьшается количество Al (рис. 4в).

При $\tau=2.0$ нс 6-я фаза доминирует, так как температура горения равна 1450 К (см. рис. 2) и она не превосходит температуру плавления 6-й фазы (1628 К).

Для времени $\tau=2.5$ нс температура горения равна порядка 1550 К, что превосходит температуру плавления 3-й фазы (Ti_3Al) в ее гомогенной области ($T_{melt,3}=1453$ К). Однако в двухфазной области, находясь в смеси с фазой TiAl, фаза Ti_3Al может сохраняться и при температурах порядка 1550-1600 К (согласно равновесной диаграмме состояния). Рисунок 5 подтверждает наличие 3-й фазы в окружении 4-й фазы (TiAl).

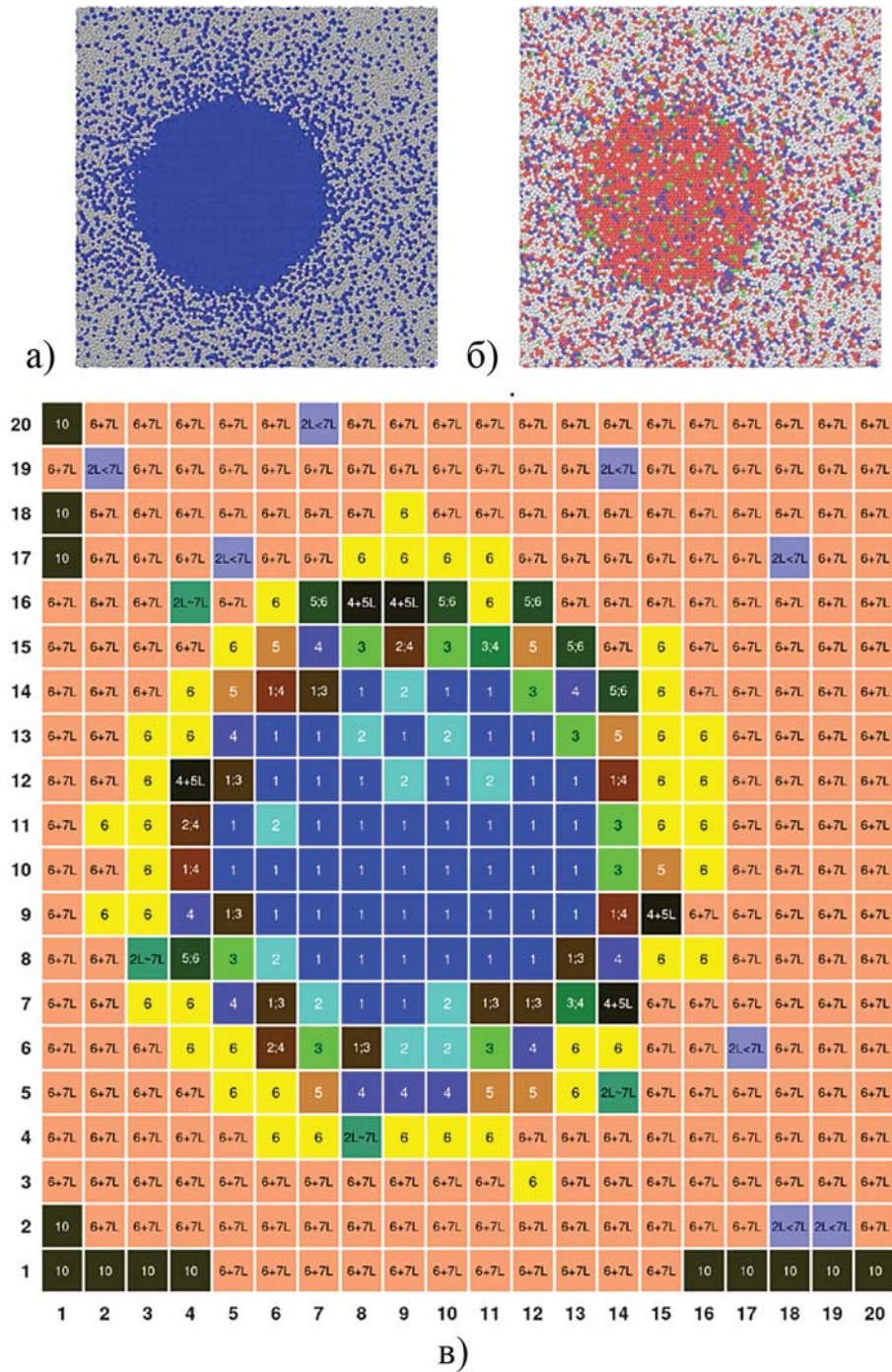


Рис. 4. Различные распределения в слое $N_x=18$, $\tau=2.0$ нс: а — распределение атомов Ti и Al; б — распределение типов кристаллических структур: зеленые точки — ГЦК-фсс, синие точки — ОЦК-всс, красные точки — ГПУ-нсп, желтые точки — iso-тип; белые точки — «другой» тип; в — карта распределения фаз

Для последующих моментов времени (3 нс и далее) температура продолжает расти до 1700 К и выше (см. рис. 2), поэтому Ti_3Al проходит стадию перекристаллизации в $TiAl$. В отдельных кубиках температура оказывается выше 1733 К (температуры плавления $TiAl$ — 4-й фазы), поэтому в этих кубиках расплав $\beta-Ti$ преобладает над расплавом Al (обозначено как $2L>7L$).

Поясним результаты визуализации (рис. 4а, б), полученные программой OVITO [2]. В центре каждого из двух рисунков 4а и 4б отчетливо выделяется Ti -ядро, геометрические формы и размеры которых подобны форме и размеру Ti -ядра, отображенно-го на рисунке 4в ($\alpha-Ti$ — 1; $\beta-Ti$ — 2). Распределение интерметаллических фаз с номерами 3, 4, 5, 6 в виде



Рис. 5. Карта распределения фаз: $\tau=2.5$ нс, $N_x=16$

сферических прослоек по рисункам 4а, б практически установить невозможно. Поэтому пакет OVITO со встроенным Ackland-Jones анализом (другими словами, Bond-angle analysis — анализ по углу и длине связи) имеет ограничения по распознаванию интерметаллидов в структурах «ядро — оболочка».

Заключение

По результатам вычислительных экспериментов выполнены термический и микроструктурный анализы СВ-синтеза интерметаллидов в кубической наночастице со структурой Ti@Al «ядро — оболочка». Наборы карт 3D-распределений синтезируемых интерметаллических фаз корректно подтверждают многостадийность механизма образования интерметаллидов в реакционной среде Ti-Al. А именно: вначале диффузия атомов жидкого Al в решетку Ti приводит на границе раздела к зарождению фазы TiAl₃. Затем

возникающие внутренние сжимающие и внешние растягивающие напряжения приводят к разрушению слоя TiAl₃, но перемещение атомов Al в Ti-ядро через слой TiAl₃ ограничивается. Это приводит к зарождению фазы TiAl. Дальнейшее проникновение в глубь Ti-ядра уменьшает концентрацию Al, что приводит к зарождению фазы Ti₃Al, которая с превышением ее температуры плавления может практически исчезнуть благодаря перекристаллизации Ti₃Al в TiAl.

Резюмируя, можно сказать, что авторами создан эффективный программный инструментарий для исследования микрокинетики СВС и процесса структурно-фазовых превращений на границах раздела в таких нано- и микрогазменных гетерогенных системах. Кроме того, показано его преимущество в сравнении с методами подобного анализа, реализованными в программном пакете OVITO.

Библиографический список

1. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics // *J. Comp. Phys.* 1995. № 117.
2. Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO — the Open Visualization Tool // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 2010. Vol. 18. № 015012.
3. Ackland G.J., Jones A.P. Applications of local crystal structure measures in experiment and simulation // *Phys. Rev. B*. 2006. Vol. 73 (5). № 054104.
4. Turlo V., Politano O. and Baras F. Microstructure evolution and self-propagating reactions in Ni-Al nanofoils: an atomic-scale description // *J. Alloys and Compd.* 2017. Vol. 708.
5. Baras F., Politano O. Epitaxial growth of the intermetallic compound NiAl on low-index Ni surfaces in Ni/Al reactive multilayer nanofoils // *Acta Materialia*. 2018. Vol. 148.
6. Rogachev A.S. and et al. Combustion in reactive multilayer Ni/Al nanofoils: experiments and molecular dynamic simulation // *Combustion and Flame*. 2016. № 166.
7. Jordan V., Shmakov I. Thermal and microstructural analysis of intermetallide synthesis in the Ni-Al layered-block atomic structure based on the computer-aided simulation of SHS // *Communications in Computer and Information Sciences*. 2020. Vol. 1304.
8. Kart S.O., Kart H.H., Cagin T. Atomic-scale insights into structural and thermodynamic stability of spherical Al@Ni and Ni@Al core-shell nanoparticles // *Journal of Nanoparticle Research*. 2020. № 22 (140).
9. Ковалев О.Б., Беляев В.В. Математическое моделирование металлохимических реакций в двухкомпонентной реагирующей дисперсной смеси // *Физика горения и взрыва*. 2013. Т. 49. № 5.
10. Рогачев А.С., Мукасян А.С. Горение для синтеза материалов: введение в структурную макрокинетику. М., 2012.
11. Jordan V.I., Shmakov I.A., Grigorevskaya A.A. 3D computer-aided simulation of SHS macrokinetics in the Ni-Al porous medium with the closest packing of “mesocells” // *Journal of Physics: Conference Series*. 2021. Vol. 1745. № 012062. DOI:10.1088/1742-6596/1745/1/012062.
12. Bharat N.T., Mishra D.P., Gundawar M.K. Effect of Heat Loss on Propagation Limits of Combustion Fronts // *Combustion Science and Technology*. 2020. Vol. 192 (3). DOI: 10.1080/00102202.2019.1565534.
13. Lam Fredric, Mi XiaoCheng, and Higgins Andrew J. Front roughening of flames in discrete media // *Physical Review E*. 2017. Vol. 96. Iss. 1. № 013107. DOI: 10.1103/PhysRevE.96.013107.
14. Иордан В.И., Шмаков И.А. Вычислительная процедура распознавания синтезируемых интерметаллических прослоек на границе раздела в наночастицах типа Ni@Al «ядро — оболочка» // *Высокопроизводительные вычислительные системы и технологии*. 2021. Т. 5, № 2.
15. Jordan V., Shmakov I. Method for Intermetallide Spatial 3D-Distribution Recognition in the Cubic Ni@Al “Core-Shell” Nanoparticle based on Computer MD-Simulation of SHS // *Communications in Computer and Information Science*. 2022. Vol. 1526. DOI: 10.1007/978-3-030-94141-3_9.
16. Zope R.R., Mishin Y. Interatomic Potentials for Atomistic Simulations of the Ti-Al system // *Phys. Rev. B*. 2003. Vol. 68. № 024102.
17. Lopis A.S., Reynolds Q.G. and Bisaka K. Computational simulation of molten titanium-aluminium metal and alloys // Paper presented at the Conference of Metallurgistics. October 2010. <https://www.pyro.co.za/Mintek/Files/2010Lopis.pdf>.