

PACS numbers: 02.70.Uu, 61.05.cp, 61.20.Ja, 61.25.Mv, 81.05.Bx

Вплив температури на структуру розтопів на основі алюмінію

О. С. Роїк, Д. С. Каніболоцький*, В. П. Казіміров, А. М. Верховлюк*,
О. М. Яковенко, О. А. Щерецький*, Р. А. Сергієнко*, Є. Г. Биба**

*Київський національний університет імені Тараса Шевченка,
вул. Володимирська, 64/13,
01601 Київ, Україна*

**Фізико-технологічний інститут металів та сплавів НАН України,
бульв. Академіка Вернадського, 34/1,
03142 Київ, Україна*

***Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»
просп. Берестейський, 37,
03056, Київ, Україна*

Витоплено шість стопів системи Al–Cu–Ti–Fe наступного складу [мас. %]: 5,1–6,1% Cu, 0,05–0,32% Ti, 0,06–0,19% Fe. Ці стопи було досліджено у рідкому стані високотемпературним рентгеноструктурним методом в середовищі гелію за 700°C та 1000°C. З мірянних кривих розсіяння випромінювання розраховано структурні фактори та функції парного розподілу атомів. В свою чергу, з кривих парного розподілу атомів визначено кількість атомів у найближчому оточенні (координаційні числа). Оберненим методом Монте-Карло побудовано моделі розтопів, які відповідають експери-

Corresponding author: Dmytro Serhiyovych Kanibolots'kyi
E-mail: kanibolotsky@univ.kiev.ua

*Taras Shevchenko National University of Kyiv,
64/13 Volodymyrska St., UA-01601 Kyiv, Ukraine*

**Physics-Technological Institute of Metals and Alloys, N. A. S. of Ukraine,
34/1 Academician Vernadsky Blvd., UA-03142 Kyiv, Ukraine*

***National Technical University of Ukraine 'Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute',
37 Beresteyskyi Ave., UA-03056 Kyiv, Ukraine*

Citation: O. S. Roik, D. S. Kanibolotsky, V. P. Kazimirov, A. M. Verkhovliuk, O. M. Yakovenko, O. A. Shcheretskiy, R. A. Sergiienko, and Ye. H. Byba, Influence of Temperature on the Structure of Aluminium-Based Melts, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, 45, No. 11: 1237–1252 (2023) (in Ukrainian);
DOI: [10.15407/mfint.45.11.1237](https://doi.org/10.15407/mfint.45.11.1237)

ментально визначеним кривим структурного фактора. За одержаними моделями розраховано парціальні структурні фактори та функції парного розподілу для атомових пар Al–Al, Al–Cu і Al–Ti та координаційні числа для атомів різного сорту. Побудовані моделі було розбито на симплекси Делоне та визначено політетраедричні атомові кластери ікосаедричного типу. Встановлено, що в таких кластерах вміст міді у 3–4 рази вищий, аніж у гомогенному розтопі.

Ключові слова: алюмінійові стопи, розтопи, кластери, мікроструктура, рентгеноструктурна аналіза, обернений метод Монте-Карло.

Six alloys of the Al–Cu–Ti–Fe system are smelted. The alloys' composition varies in the following ranges [wt.%]: 5.1–6.1% Cu, 0.05–0.32% Ti, 0.06–0.19% Fe. The alloys are investigated in the liquid state by the high-temperature x-ray diffraction method in a helium environment at 700°C and 1000°C. Structure factors and pair distribution functions are calculated from the measured scattering curves. In turn, the numbers of atoms in the first co-ordination sphere (co-ordination numbers) are determined from the pair-distribution curves. Models of the melt structure are designed using the inverse Monte Carlo method in such a way to correspond maximally to experimentally determined structure-factor curves. Partial structure factors and pair distribution functions for Al–Al, Al–Cu and Al–Ti atomic pairs as well as co-ordination numbers for atoms of different kinds are calculated from the obtained models. The constructed models are divided into Delaunay simplexes, and polytetrahedral atomic clusters of the icosahedral type are defined. It is determined that the copper content in such clusters is 3–4 times higher than in the homogeneous melt.

Key words: aluminium alloys, melts, clusters, microstructure, x-ray diffraction, inverse Monte Carlo method.

(Отримано 29 грудня 2022 р.; остаточн. варіант — 12 січня 2023 р.)

1. ВСТУП

Стопи на основі бінарної системи Al–Cu широко застосовуються в авіа- й автомобільній промисловості завдяки легкості та корозійній стійкості [1]. Для поліпшення механічних властивостей цих стопів використовують додавання домішкових кількостей металів, атоми яких можуть виступати центрами кластероутворення. Це дає змогу керувати морфологією стопів за рахунок утворення бажаних інтерметалідних фаз. Наприклад, додавання Титану за надлишку Алюмінію зумовлює утворення інтерметаліду Al_3Ti [2], що впливає на морфологію кристалічних фаз $\alpha\text{-Al}$ й Al_2Cu , які є основними для стопів на основі системи Al–Cu [3]. Необхідно відмітити, що присутність Титану впливає на процеси зародкоутворення у рідкому стані; тому експериментальне та модельне дослідження розтопів Al–Cu, що містять домішки Титану, має важливе теоретичне та

прикладне значення.

Згідно з даними термодинамічних досліджень [4, 5], розтопи бінарних систем Al–Cu і Al–Ti характеризуються інтенсивною взаємодією між різносортними атомами, на що вказують негативні ентальпії змішання із екстремальними значеннями -17 кДж/моль (для Al–Cu) і -30 кДж/моль (для Al–Ti). Моделювання структури ряду розтопів від $\text{Al}_{97}\text{Cu}_3$ до $\text{Al}_{70}\text{Cu}_{30}$ за допомогою методу молекулярної динаміки *ab initio* [6] вказує на формування фази Al_2Cu під час кристалізації заевтектичних розтопів, тоді як для евтектичного та доевтектичного складів характер впорядкування атомів відмінний, і різні типи мікроугруповань співіснують у розтопі одночасно. Дослідження стопів із вмістом 1,9, 2 та 2,5% ат. Купруму за допомогою EXAFS-методу [7, 8] вказує на те, що розподіл атомів Cu у перенасиченому твердому розчині на основі алюмінію не є статистично випадковим; натомість є кореляція у взаємному розташуванні атомів Cu, що приводить до утворення двох радіальних компонент у найближчому оточенні атомів Купруму: $2,67\text{\AA}$ для взаємодії у парі Cu–Cu і $2,93\text{\AA}$ у парі Cu–Al.

Метою даного дослідження було експериментальне та модельне дослідження алюмінієвих розтопів з концентрацією Купруму у 5–6% мас. і Титану до 0,3% мас.

2. ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНА ТА РОЗРАХУНКОВА МЕТОДИКА

Рентгенодифракційний експеримент проводився у захисній атмосфері гелію за 700°C (поблизу лінії ліквідусу) та 1000°C (перегрів над лінією ліквідусу $\cong 350^\circ\text{C}$) на високотемпературному θ – θ -дифрактометрі (фокусування за Бреґгом–Брентано) з використанням монохроматизованого випромінення MoK_α . З метою мінімізації експериментальних похибок для кожного розтопу за заданої температури дослідження зразка були виміряні по три криві інтенсивності розсіяних променів $I(Q)$ у відносних одиницях ($Q = 4\pi\sin\theta/\lambda$, де $\lambda = 0,71069\text{\AA}$). Одержані криві усереднювали та нормували з врахуванням поправки на поляризацію розсіяного випромінення, а також атомових факторів, дисперсійних поправок та інтенсивності некогерентного випромінення [9]. Із нормованих кривих $I_e(Q)$ були розраховані загальні криві структурного фактора (СФ) $S(Q)$ згідно з методом, запропонованим О. С. Лашком [10]:

$$S(Q) = \frac{I_e(Q)}{NF^2}, \quad (1)$$

де $F^2 = \sum n_i f_i^2$, n_i — атомова частка i -го компонента, f_i — його розсіювальна здатність, N — загальне число атомів. На основі загальних експериментальних СФ були одержані загальні функції парного

розподілу атомів (ФПР) $g(r)$:

$$g(r) = 1 + \frac{1}{2\pi^2 r \rho_0 \left(\sum_i n_i K_i \right)^2} \int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} Q [S(Q) - 1] \sin(Qr) dQ, \quad (2)$$

де $K_i^2 = f_i^2 / F^2$ — відносна розсіювальна здатність атомів i -го компонента, ρ_0 — середня атомова густина.

Із кривих радіального розподілу атомів $\rho_0 4\pi r^2 g(r)$ методом інтегрування до першого локального мінімуму $g(r)$ було оцінено середню кількість атомів у найближчому оточенні в розтопі — координаційне число (CN).

Для з'ясування особливостей локальної атомарної структури розтопів було проведено моделювання оберненим методом Монте-Карло (ОМК) [11], що передбачає мінімізацію різниці між експериментальним ($S^E(S_i)$) і модельним ($S^M(S_i)$) структурними факторами:

$$\chi^2 = \sum_i \frac{(S^E(S_i) - S^M(S_i))^2}{\sigma^2(S_i)}, \quad (3)$$

де χ^2 — фактор збіжності, $\sigma(S_i)$ — стандартний відхил нормального розподілу для експериментального структурного фактора. Як вихідну комірку було обрано куб, що містить 10000 атомів стехіометричного складу, а довжину ребра куба було обчислено, виходячи із експериментальних значень густини розтопу за температури експерименту [12, 13]. Віддалі мінімального зближення для атомів одного сорту були визначені як точка перетину експериментальної кривої ФПР з віссю абсцис ($d_{700^\circ\text{C}}(\text{Al-Al}) = 2,25 \text{ \AA}$, $d_{1000^\circ\text{C}}(\text{Al-Al}) = 2,20 \text{ \AA}$, $d(\text{Cu-Cu}) = 2,10 \text{ \AA}$, $d(\text{Fe-Fe}) = 2,05 \text{ \AA}$, $d(\text{Ti-Ti}) = 2,30 \text{ \AA}$), а між атомами з різним протонним числом — як середні значення між відповідними величинами. Алгоритм ОМК включає наступні кроки.

1) Для конфігурації атомів розраховують парціальні ФПР:

$$g_{\alpha\beta}^{M_o}(r) = \frac{n_{\alpha\beta}^{M_o}(r)}{\rho c_\alpha 4\pi r^2 dr}, \quad (4)$$

де ρ — атомова густина, c_α — концентрація атомів сорту α і $n_{\alpha\beta}^{M_o}(r)$ — кількість атомів сорту β на віддалі від r до $r + dr$ від центрального атому сорту α , що усереднена по всіх атомах сорту α конфігурації. Індекс «o» (old) вказує на попередню конфігурацію.

2) Розраховують парціальні СФ $S_{\alpha\beta}^{M_o}(Q)$ на основі парціальних ФПР:

$$S_{\alpha\beta}^{M_o}(Q) = 1 + \rho \int_0^{r_{\max}} 4\pi r^2 \left[g_{\alpha\beta}^{M_o}(r) - 1 \right] \frac{\sin(Qr)}{Qr} dr, \quad (5)$$

де r_{\max} — половина ребра основної комірки.

3) Розраховують загальний СФ модельної конфігурації:

$$S^{M_o}(Q) = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} c_{\alpha} c_{\beta} k_{\alpha} k_{\beta} S_{\alpha\beta}^{M_o}(Q), \quad (6)$$

де k_{α} — відносна розсіювальна здатність атомів сорту α :

$$k_{\alpha}^2 = \frac{f_{\alpha}^2}{\sum_i c_i f_i^2}. \quad (7)$$

4) Обчислюється фактор збіжності між експериментальним і модельним СФ χ^2 за рівнянням (3).

5) Зміщують випадковим чином один із атомів на величину заданого кроку, враховуючи мінімальні віддалі між атомами. Якщо нове зміщення атома прийняте, що відмічається індексом « n » (new), розраховують парціальні ФПР ($g_{\alpha\beta}^{M_n}(r)$) і парціальні СФ ($S_{\alpha\beta}^{M_n}(Q)$), загальний СФ $S^{M_n}(Q)$ і фактор збіжності χ_n^2 .

6) Якщо $\chi_n^2 < \chi_o^2$, тоді рух приймається, і нова конфігурація заміщує попередню. Якщо $\chi_n^2 > \chi_o^2$, то рух приймається з ймовірністю $\exp(-(\chi_n^2 - \chi_o^2)/2)$; в іншому випадку він відкидається. Прийняття лише частини рухів, які збільшують розбіжність моделю й експерименту, робить кінцеву конфігурацію більш незалежною від початкової. З потраплянням модельної конфігурації у локальний мінімум у системи буде шанс з нього вийти за рахунок рухів, що збільшують розбіжність. Процедура повторюють з 5-го кроку до зменшення параметра χ^2 до рівноважного значення, навколо якого він далі коливатиметься.

З одержаних структурних моделей були розраховані парціальні структурні фактори та функції парного розподілу атомів. Для аналізу структурних мотивів простір моделей був розбитий на симплекси Делоне (четвірки атомів, що утворюють елементарні пустоти) відповідно до [14, 15].

3. РЕЗУЛЬТАТИ ТА ЇХ ОБГОВОРЕННЯ

Номери стопів та уточнений склад після елементної аналізи показано у табл. 1. Виявилось, що всі стопи, окрім Купруму та Титану, містили добавки Феруму (0,1–0,2% мас.). Один із стопів (6-й) окрім найбільшої концентрації Феруму ($\cong 0,2\%$) також містив незначні домішки Mn ($\cong 0,01\%$) та Zn ($\cong 0,04\%$).

Експериментальні криві загальних СФ і ФПР за температур у 700°C та 1000°C наведено на рис. 1. Для порівняння показано також дані для рідкого алюмінію [16].

ТАБЛИЦЯ 1. Склад досліджених стопів, % мас.**TABLE 1.** Investigated alloys' composition, wt. %.

Номер стопу	Al	Cu	Fe	Ti	Mn	Zn
1	94,737	5,07	0,1	0,093	–	–
2	94,36	5,43	0,13	0,08	–	–
3	94,11	5,53	0,12	0,24	–	–
4	93,937	5,89	0,14	0,033	–	–
5	93,524	6,10	0,056	0,32	–	–
6	94,273	5,43	0,19	0,053	0,013	0,041

Значення положення (Q_1 , R_1) та висоти ($S(Q_1)$) перших максимумів кривих СФ і ФПР показано у табл. 2. Одержані криві СФ і ФПР в цілому вказують на подібність локальної атомарної структури досліджених розтопів Al–Cu–Ti–Fe та рідкого алюмінію, що є прогнозованим через значний вміст Al в досліджених стопах.

ТАБЛИЦЯ 2. Параметри кривих структурного фактора та функції парного розподілу.**TABLE 2.** Parameters of structure factor and pair distribution-function curves.

Стопи	$w(\text{Cu})$, % мас.	$w(\text{Ti})$, % мас.	T , °C $\pm 5^\circ\text{C}$	Q_1 , Å ⁻¹ $\pm 0,01$	$S(Q_1)$	R_1 , Å $\pm 0,01$	CN $\pm 0,1$
Al	0	0	700	2,66	2,2	2,83	11,5
			1000	2,66	1,95	2,83	10,7
1	5,07	0,093	700	2,63	2,15	2,81	10,8
			1000	2,64	1,95	2,81	10,2
2	5,43	0,080	700	2,64	2,2	2,82	10,8
			1000	2,65	1,90	2,83	9,8
3	5,53	0,240	700	2,65	2,3	2,81	10,7
			1000	2,68	2,0	2,82	9,6
4	5,89	0,033	700	2,67	2,1	2,82	10,4
			1000	2,65	1,95	2,81	10,2
5	6,10	0,320	700	2,66	2,2	2,81	10,4
			1000	2,67	1,9	2,8	10,1
6	5,43	0,053	700	2,67	2,2	2,81	10,0
			1000	2,6	1,9	2,82	9,9

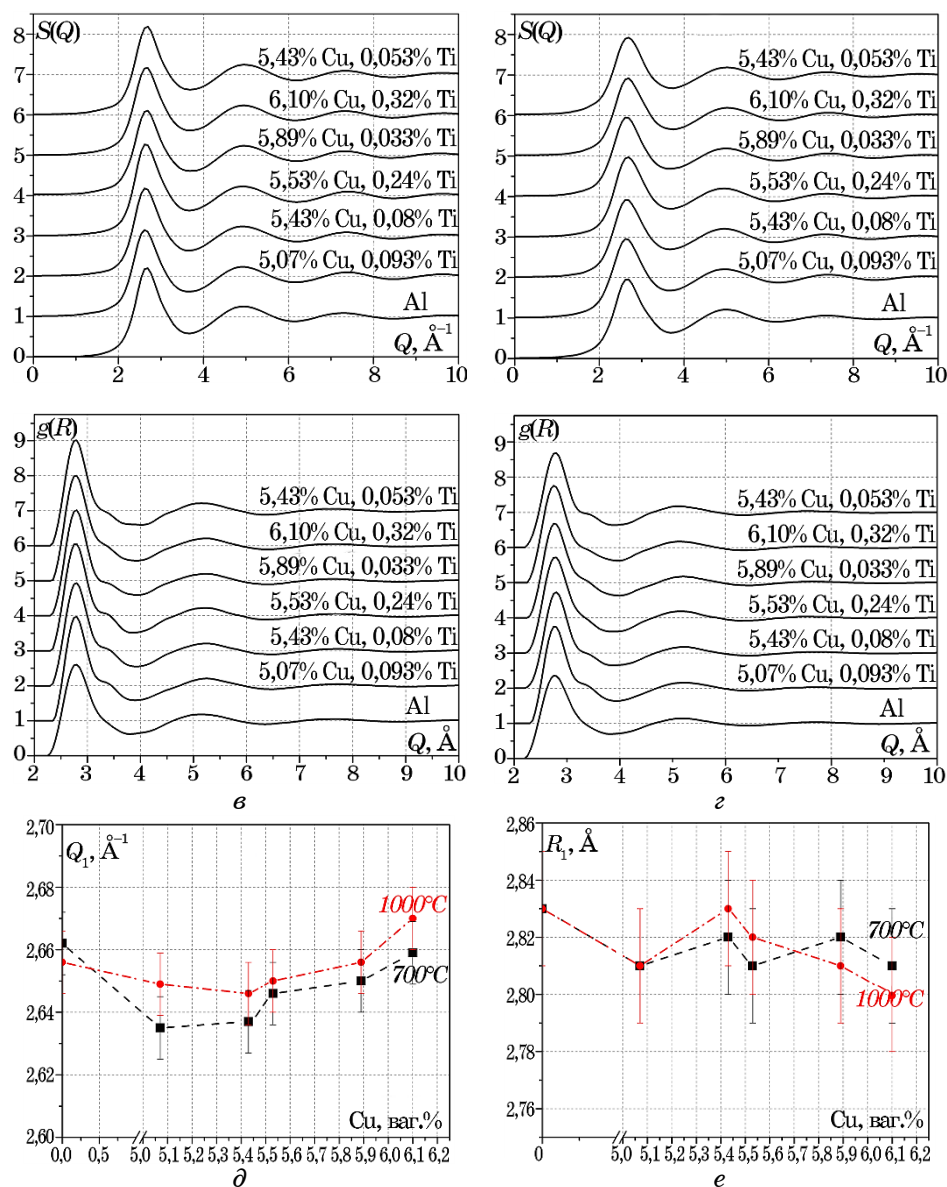


Рис. 1. Структурні фактори (а, б), функції парного розподілу (в, г) за 700°C (а, в) і 1000°C (б, г) та концентраційні залежності положення першого максимуму кривих структурного фактора (д) і функції парного розподілу (е) для досліджених розтопів. Дані для чистого алюмінію взято з [16].

Fig. 1. Structure factors (a, б) and pair distribution functions (в, г) at 700°C (a, в) and 1000°C (б, г), concentration dependences of first maximum position of structure factor curves (д) and pair distribution functions (е) for the studied melts. Data for pure aluminium are taken from Ref. [16].

Значення експериментальної похибки положення першого максимуму на кривих ФПР ($\pm 0,01 \text{ \AA}^{-1}$) не дає змогу говорити про залежність R_1 від вмісту Cu чи Ti. Можна зауважити, що положення першого максимуму на кривих СФ (Q_1) за 700°C зменшується з переходом від рідкого алюмінію до розтопу з 5,07% мас. Cu, а з подальшим збільшенням концентрації Cu в розтопі відбувається збільшення Q_1 до $2,60 \text{ \AA}^{-1}$. Подібні зміни Q_1 за 1000°C є менш явними: зменшення положення першого максимуму СФ з переходом від чистого рідкого алюмінію до розтопу з 5,43% мас. Cu відбувається в межах експериментальних похибок.

Але подальше збільшення Q_1 зі зростанням концентрації Cu до 6,1% мас. є статистично вірогідним.

Найбільш очевидні зміни зі збільшенням вмісту Купруму мають місце для середнього координаційного числа атомів у досліджених розтопах (рис. 2). Зменшення значення CN із зростанням концентрації Купруму можна пояснити тим, що в міру збільшення в розтопі кількості атомів з більшим радіусом, аніж у Алюмінію, кількість атомів в оточенні кожного атому Алюмінію зменшується. Різницю між значеннями CN для розтопів одного складу, але за різних температур, можна пояснити розупорядкуванням за перегріву, що також проявляється через зменшення висот перших максимумів СФ і ФПР та збільшення півширини першого максимуму СФ. Цікавим є той факт, що різниця між CN за 700°C та 1000°C є найменшою для розтопів із 5,89 і 6,10% мас. Купруму. Це може бути інтерпретовано, як збереження з перегрівом атомових кластерів із певним локальним атомарним впорядкуванням.

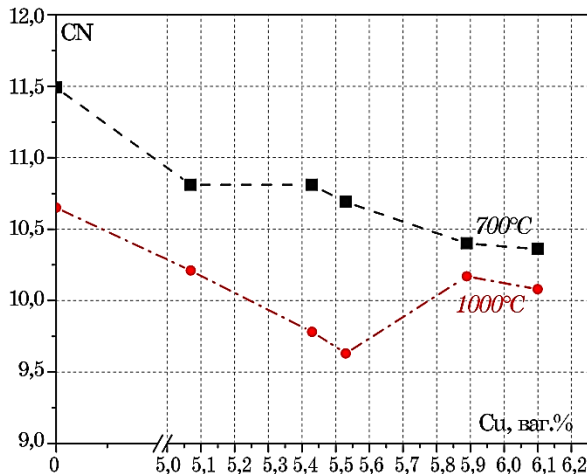


Рис. 2. Кількість атомів у найближчому оточенні в досліджених розтопах.

Fig. 2. Number of atoms in nearest environment in the investigated melts.

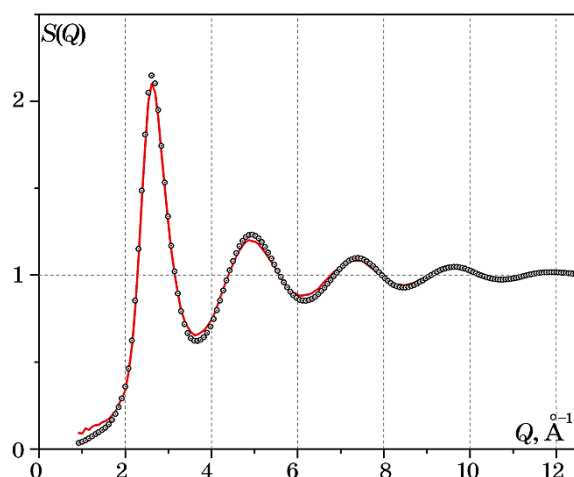


Рис. 3. Порівняння експериментального (точки) та модельного (крива) структурного фактора 1-го розтопу за 700°C.

Fig. 3. Comparison of the experimental (scatter) and model (line) structure factors for the 1st melt at 700°C.

Розраховані методом ОМК структури мали СФ, що узгоджується з експериментальним в межах експериментальної похибки (рис. 3).

Парціальні криві $S_{\text{Al-Al}}(Q)$ та $S_{\text{Al-Cu}}(Q)$ (рис. 4) практично не залежать від вмісту Купруму в розтопах. Слабке затухання осциляцій $S_{\text{Al-Cu}}(Q)$ за високих значень Q порівняно із $S_{\text{Al-Al}}(Q)$ вказує на більш високий ступінь впорядкування у парних взаємодіях Al–Cu. Низький вміст Титану унеможливорює одержати якісні парціальні криві $S_{\text{Al-Ti}}(Q)$. Особливо це проявляється у випадку 0,08% мас. Ті. Лише для 0,24 та 0,32% мас. Титану криві $S_{\text{Al-Ti}}(Q)$ можна порівнювати з СФ для інших атомових пар. Для прикладу на рис. 5 наведено порівняння парціальних функцій $S_{\text{Al-Al}}(Q)$, $S_{\text{Al-Cu}}(Q)$ та $S_{\text{Al-Ti}}(Q)$ для 5-го стопу.

Одержані дані виявляють у випадку парних взаємодій Al–Ti і Al–Cu більш високий ступінь локального атомарного впорядкування (слабке затухання осциляцій).

Співставлення парціальних функцій парного розподілу (рис. 6) вказує, що у розтопах віддалі у парах Al–Al, Al–Cu та Al–Ti є приблизно однаковими в межах похибки визначення їх незалежно від вмісту Купруму та Титану в розтопі. Однак перші максимуми кривих ФПР у випадку $g_{\text{Al-Cu}}(R)$ для всіх досліджених розтопів і $g_{\text{Al-Ti}}(R)$ за винятком розтопу із 0,08% мас. Ті мають меншу півширину у порівнянні із $g_{\text{Al-Al}}(R)$. Це також може вказувати на формування у розтопах навколо атомів перехідних металів атомових кластерів, які відмінні від структури рідкого алюмінію.

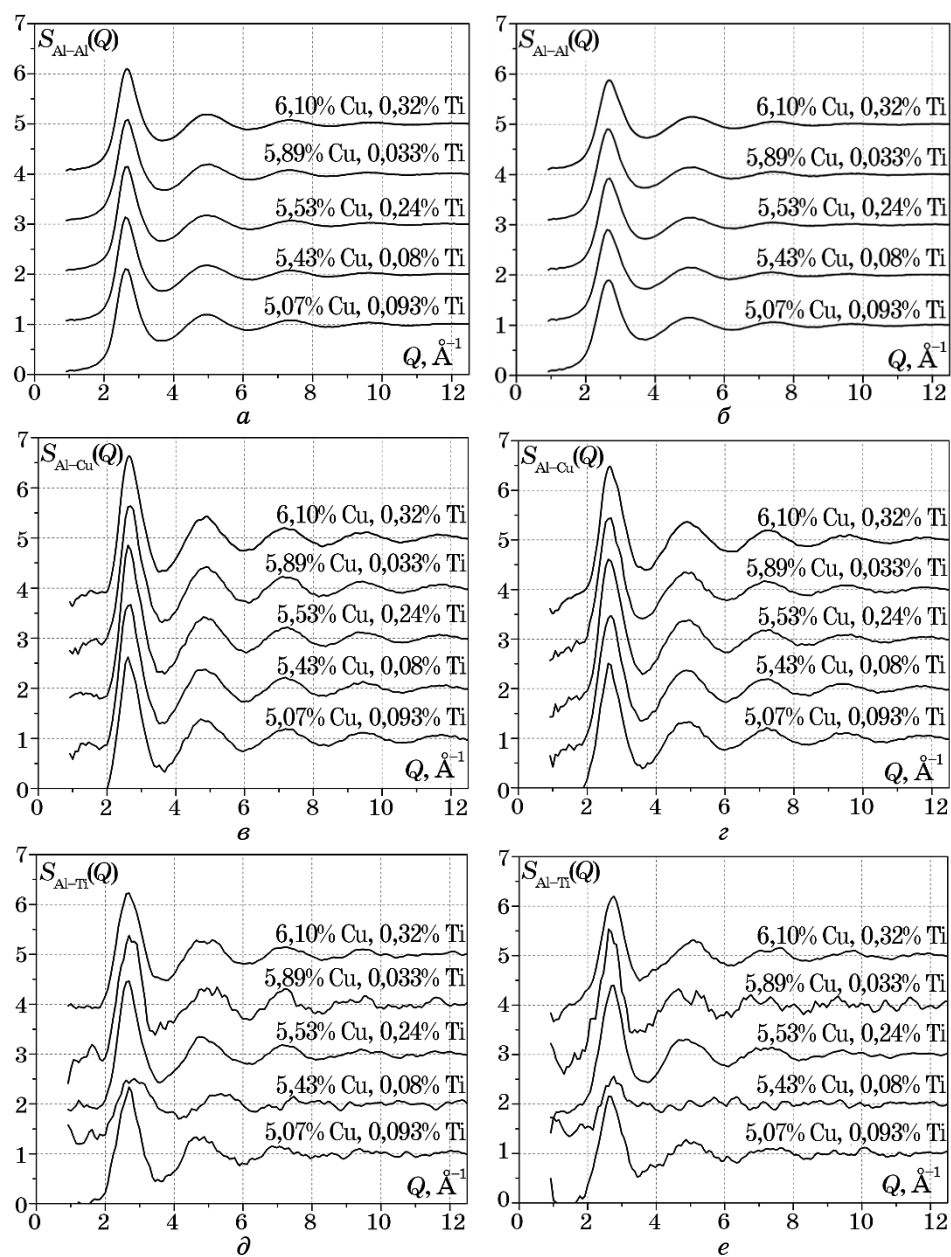


Рис. 4. Парціальні структурні фактори досліджених розтопів за 700°C (*a*, *в*, *д*) і 1000°C (*б*, *з*, *е*).

Fig. 4. Partial structural factors of the investigated melts at 700°C (*a*, *в*, *д*) and 1000°C (*б*, *з*, *е*).

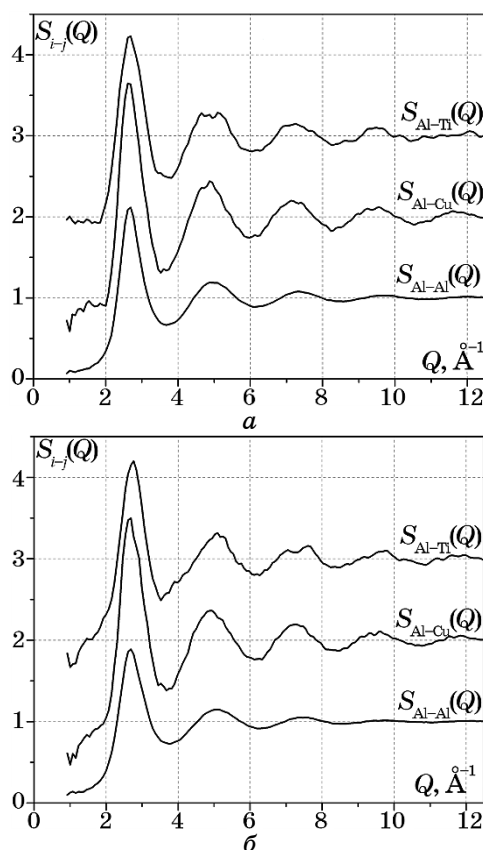


Рис. 5. Парціальні структурні фактори для 5-го розтопу за 700°C (а) та 1000°C (б).

Fig. 5. Partial structure factors for the 5th melt at 700°C (a) and 1000°C (б).

З формуванням структури розтопів істотну роль відіграють два чинники: інтенсивність міжатомової взаємодії, що зв'язана із хімічним локальним впорядкуванням і реалізація щільного некристалічного пакування атомів [17]. Щільне пакування у кристалічних тілах характеризується наявністю великої кількості пустот, що мають форму правильних тетраедра й октаедра. Щільне некристалічне пакування у розтопах має значну кількість симплексів Делоне у вигляді слабо деформованих тетраедрів, що схильні об'єднуватися по гранях, утворюючи політетраедричні кластери: лінійні, розгалужені формування, об'єднання у вигляді п'ятичленних кілець.

Останньому випадку, тобто формуванню з п'ятих слабо деформованих тетраедрів, відповідає декагональна біпіраміда (декаедр). Декаедр є складовою частиною ікосаедричного атомового кластера: центральний атом є оточеним дванадцятьма сусідами.

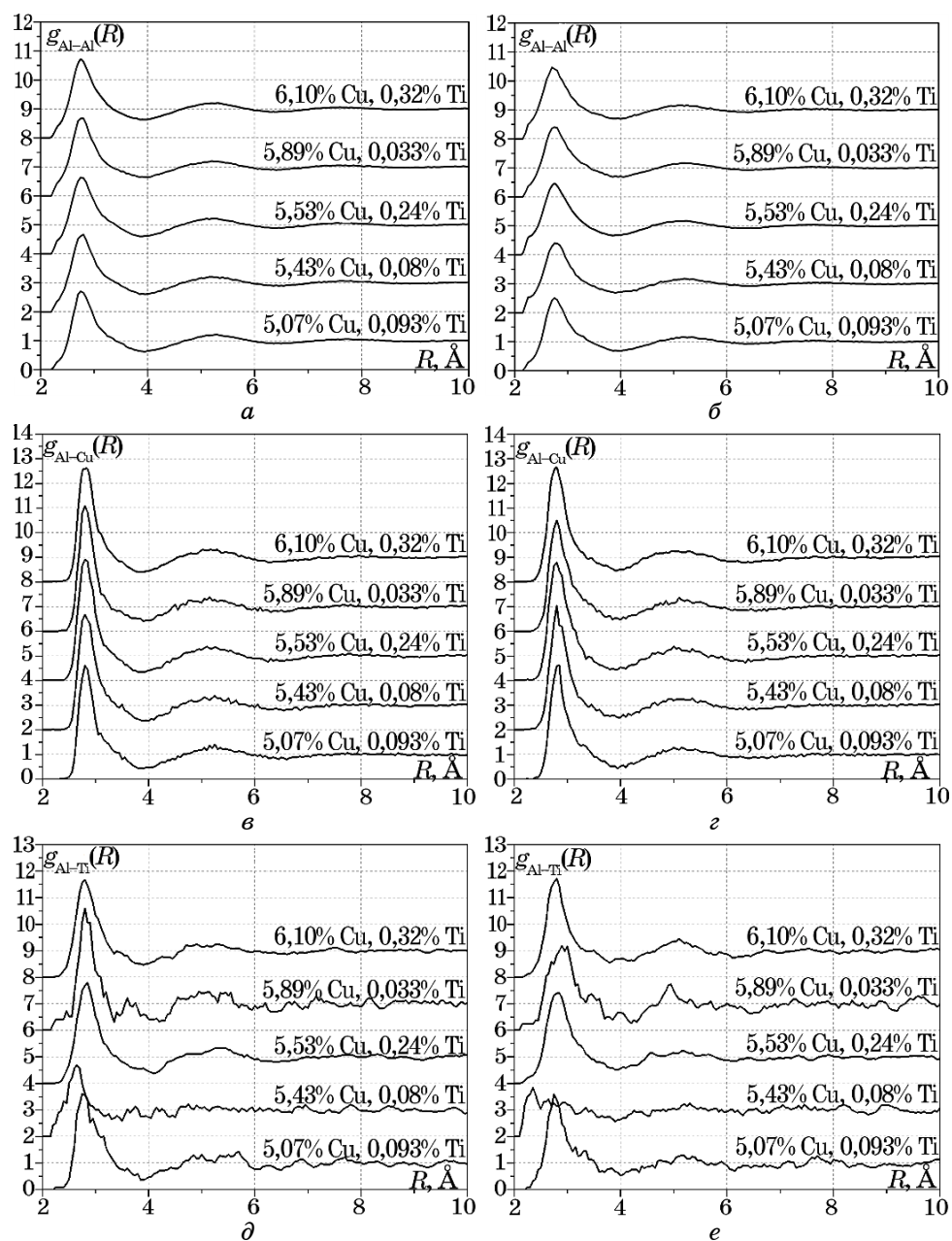


Рис. 6. Парціальні функції парного розподілу досліджених розтопів за 700° (а, в, д) і 1000°С (б, з, е).

Fig. 6. Partial pair distribution functions of studied melts at 700°C (a, в, д) and 1000°C (б, з, е).

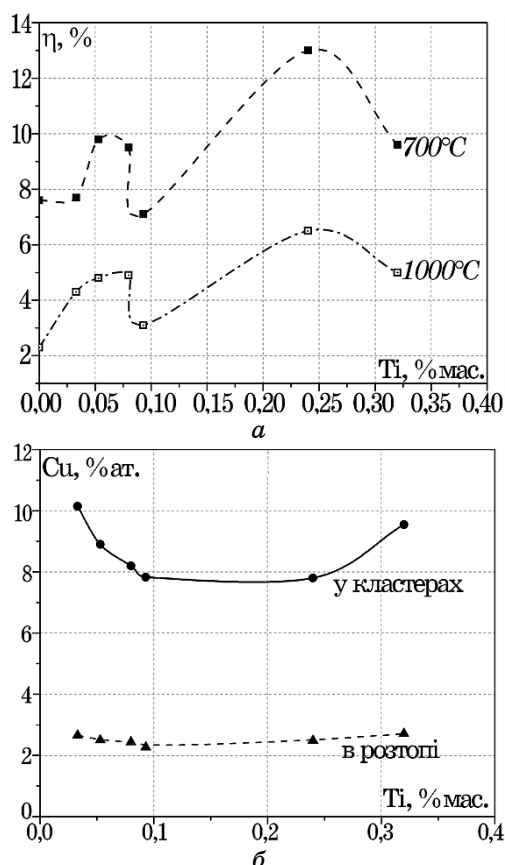


Рис. 7. Залежності відсотка атомів у політетраедричних кластерах ікосаедричного типу (*a*) та Купруму у кластерах (суцільна крива) і в розтопах (пунктир) (*б*) від концентрації Титану в розтопі.

Fig. 7. Dependences of atoms' percentage in icosahedral-type polytetrahedral clusters (*a*) and copper in the clusters (solid line) and in the melts (dash line) (*б*) on titanium concentration in the melt.

З об'єднанням декількох декаедрів утворюються політетраедричні кластери ікосаедричного типу, розмір яких може сягати декількох нанометрів.

На рисунку 7, *a* наведено залежність відсотка атомів (η), що формують політетраедричні атомові кластери ікосаедричного типу, від вмісту Титану в розтопі. Одержана залежність має екстремальний характер із локальним мінімумом для 0,08% мас. Ti та максимумом для 0,24% мас. Ti. Підвищення температури до 1000°C однозначно зменшує кількість атомів, що утворюють кластери, вказуючи на чутливість до перегріву над лінією ліквідусу.

Додатково було проведено аналізу складу таких кластерів з використанням одержаних структурних моделей. Виявилося, що у вказаних кластерах вміст Купруму в 3–4 рази вищий, аніж загальний вміст у досліджуваному розтопі (рис. 7, б), тобто Купрум має схильність входити у політетраедричні кластери ікосаедричного типу.

4. ВИСНОВКИ

1. Положення першого максимуму інтегральної кривої структурного фактора спочатку трохи зменшується з переходом від чистого алюмінію до стопів з 5,1–5,4% мас. Cu, а потім зростає зі збільшенням концентрації Купруму до 6,1% мас.
2. Із зростанням концентрації Купруму зменшуються середнє координаційне число в розтопі та різниця між координаційними числами для 700°C та 1000°C.
3. Парціальні криві структурного фактора $S_{\text{Al-Al}}(Q)$ й $S_{\text{Al-Cu}}(Q)$ практично не залежать від вмісту Купруму у розтопах для всіх досліджених стопів. Слабке затухання осциляцій $S_{\text{Al-Cu}}(Q)$ й $S_{\text{Al-Ti}}(Q)$ за високих значень Q порівняно із $S_{\text{Al-Al}}(Q)$ вказує на більш високий ступінь впорядкування для парних взаємочинів Al–Cu та Al–Ti, аніж для пар атомів Al–Al.
4. Із парціальних характеристик структурних параметрів для кожного із компонентів було встановлено, що локальне оточення атомів перехідних елементів, особливо Купруму, характеризується вищим ступенем впорядкованості порівняно із локальним оточенням Алюмінію.
5. Розраховані за оберненим методом Монте-Карло структурні моделі розтопів, що узгоджуються з експериментальними рентгеноструктурними даними, характеризуються наявністю атомарних угруповань з реалізацією щільного некристалічного пакування — політетраедричних кластерів ікосаедричного типу. Вміст Купруму у таких кластерах у 3–4 рази вищий, аніж стехіометричний вміст Купруму в досліджуваних стопах.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. I. Polmear, *Light Alloys — From Traditional Alloys to Nanocrystals* (Amsterdam: Elsevier: 2005).
2. D. Batalu, G. Coşmeleaţă, and A. Aloman, *U.P.B. Sci. Bull., Ser. B*, **68**, No. 4: 77 (2006).
3. O. Zobac, A. Kroupa, A. Zemanova, and K. W. Richter, *Metall. Mater. Trans. A*, **50**, No. 8: 3805 (2019).
4. D. S. Kanibolotsky, O. A. Bieloborodova, N. V. Kotova, and V. V. Lisnyak, *J. Therm. Anal. Calorim.*, **70**: 975 (2002).

5. Ю. О. Есин, Н. П. Бобров, М. С. Петрушевский, П. В. Гельд, *Изв. Акад. наук СССР. Металлы*, № 5: 104 (1974).
6. L. H. Xiong, X. D. Wang, Q. P. Cao, D. X. Zhang, H. L. Xie, T. Q. Xiao, and J. Z. Jiang, *J. Phys. Condens. Matter*, **29**, No. 3: 035101 (2017).
7. H. Maeda, T. Tanimoto, H. Terauchi, and M. Hida, *phys. status solidi A*, **58**, No. 2: 629 (1980).
8. A. Fontaine, P. Lagarde, A. Naudon, D. Raoux, and D. Spanjaard, *Philos. Mag. B*, **40**, No. 1: 17 (1979).
9. D. Waasmaier and A. Kirfel, *Acta Crystallogr. Sec. A*, **51**: 416 (1995).
10. А. С. Лашко, *Вопросы физики металлов и металловедения*, **6**: 66 (1955).
11. R. L. McGreevy, *J. Phys. Condens. Matter*, **13**, No. 46: 877 (2001).
12. Н. Ю. Константинова, А. Р. Курочкин, А. В. Борисенко, В. В. Филиппов, П. С. Попель, *Металлы*, № 2: 157 (2016).
13. Y. Plevachuk, V. Sklyarchuk, A. Yakymovych, S. Eckert, B. Willers, and K. Eigenfeld, *Metall. Mater. Trans. A*, **39**, No. 12: 3040 (2008).
14. Н. Н. Медведев, В. П. Волошин, Ю. И. Наберухин, *ЖСХ*, **30**, № 2: 98 (1989).
15. Yu. I. Naberukhin, V. P. Voloshin, and N. N. Medvedev, *Mol. Phys.*, **73**, No. 4: 917 (1991).
16. O. S. Roik, O. V. Samsonnikov, V. P. Kazimirov, and V. E. Sokolskii, *J. Mol. Liq.*, **145**, No. 3: 129 (2009).
17. O. S. Roik, V. P. Kazimirov, V. E. Sokolskii, and S. M. Galushko, *J. Non-Cryst. Solids*, **364**: 34 (2013).

REFERENCES

1. I. Polmear, *Light Alloys — From Traditional Alloys to Nanocrystals* (Amsterdam: Elsevier: 2005).
2. D. Batalu, G. Coşmeleaţă, and A. Aloman, *U.P.B. Sci. Bull., Ser. B*, **68**, No. 4: 77 (2006).
3. O. Zobac, A. Kroupa, A. Zemanova, and K. W. Richter, *Metall. Mater. Trans. A*, **50**, No. 8: 3805 (2019).
4. D. S. Kanibolotsky, O. A. Bieloborodova, N. V. Kotova, and V. V. Lisnyak, *J. Therm. Anal. Calorim.*, **70**: 975 (2002).
5. Yu. O. Esin, N. P. Bobrov, M. S. Petrushevskii, and P. V. Gel'd, *Izv. Akad. Nauk SSSR. Metall.*, No. 5: 104 (1974) (in Russian).
6. L. H. Xiong, X. D. Wang, Q. P. Cao, D. X. Zhang, H. L. Xie, T. Q. Xiao, and J. Z. Jiang, *J. Phys. Condens. Matter*, **29**, No. 3: 035101 (2017).
7. H. Maeda, T. Tanimoto, H. Terauchi, and M. Hida, *phys. status solidi A*, **58**, No. 2: 629 (1980).
8. A. Fontaine, P. Lagarde, A. Naudon, D. Raoux, and D. Spanjaard, *Philos. Mag. B*, **40**, No. 1: 17 (1979).
9. D. Waasmaier and A. Kirfel, *Acta Crystallogr. Sec. A*, **51**: 416 (1995).
10. А. С. Лашко, *Voprosy Fiziki Metallov i Metallovedeniya* [Problems of Metal Physics and Metal Science], **6**: 66 (1955) (in Russian).
11. R. L. McGreevy, *J. Phys. Condens. Matter*, **13**, No. 46: 877 (2001).
12. Н. Ю. Константинова, А. Р. Курочкин, А. В. Борисенко, В. В. Филиппов, and П. С. Попель, *Metally*, No. 2: 144 (2016) (in Russian).
13. Y. Plevachuk, V. Sklyarchuk, A. Yakymovych, S. Eckert, B. Willers, and K. Eigenfeld, *Metall. Mater. Trans. A*, **39**, No. 12: 3040 (2008).

14. N. N. Medvedev, V. P. Voloshin, and Yu. I. Naberukhin, *J. Struct. Chem.*, **30**, No. 2: 253 (1989).
15. Yu. I. Naberukhin, V. P. Voloshin, and N. N. Medvedev, *Mol. Phys.*, **73**, No. 4: 917 (1991).
16. O. S. Roik, O. V. Samsonnikov, V. P. Kazimirov, and V. E. Sokolskii, *J. Mol. Liq.*, **145**, No. 3: 129 (2009).
17. O. S. Roik, V. P. Kazimirov, V. E. Sokolskii, and S. M. Galushko, *J. Non-Cryst. Solids*, **364**: 34 (2013).