

УДК 66.017

М.Р. Онучина¹, А.А. Артамонов², В.Б. Евдокимов³**ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИКИ РЕШЕТКИ В2 RuAl
ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ**

DOI: 10.18577/2307-6046-2018-0-1-12-12

С использованием методов первых принципов исследован фононный спектр и плотность фононных состояний В2 RuAl. Из фононного спектра вычислены: константа Грюнайзена, коэффициент объемного теплового расширения, температура Дебая, температурная зависимость теплоемкости; оценена температура плавления. Рассчитаны объемные модули упругости, равновесные значения параметров решетки для сплава RuAl. Показано хорошее совпадение полученных расчетных данных с экспериментальными данными. Проведено сравнение рассчитанных параметров с таковыми для жаропрочного сплава NiAl.

Ключевые слова: фононный спектр, плотность фононных состояний, параметры решетки, жаропрочные сплавы, константа Грюнайзена, тепловое расширение.

М.Р. Onuchina¹, А.А. Artamonov², V.B. Evdokimov³**STUDY OF THE LATTICE DYNAMICS OF B2 RuAl
BY THE FIRST PRINCIPLES METHODS**

The first-principle methods were used, the phonon spectrum and the density of the phonon states of B2 RuAl are studied. We used the phonon spectrum of RuAl for calculation: the Grüneisen constant, the volume coefficient of thermal expansion, the Debye temperature, the temperature dependence of the heat capacity, the melting temperature is estimated for RuAl. The bulk modulus of elasticity, the equilibrium values of lattice parameters for RuAl are calculated. It is shown that the calculated data agree well with the experimental data. The calculated parameters are compared with those for the NiAl superalloy.

Keywords: phonon spectrum, phonon density of states, super-alloys, parameters of cell, Grüneisen constant, coefficient of thermal expansion.

¹Федеральное государственное унитарное предприятие «Всероссийский научно-исследовательский институт авиационных материалов» Государственный научный центр Российской Федерации [Federal State Unitary Enterprise «All-Russian Scientific Research Institute of Aviation Materials» State Research Center of the Russian Federation]; e-mail: admin@viam.ru

²Научно-исследовательский институт космической медицины Федерального государственного бюджетного учреждения «Федеральный научно-клинический центр специализированных видов медицинской помощи и медицинских технологий Федерального медико-биологического агентства России» [Research Institute for Space Medicine Federal Research Clinical Center of Federal Biomedical Agency of Russia]; e-mail: spacemedcenter@yandex.ru

³Акционерное общество «Научно-производственный центр газотурбостроения „Салют“» [Joint-stock company «Gas-turbine engineering research and production center „Salut“»]; e-mail: info@salut.ru

Введение

Интерметаллический сплав RuAl представляет большой интерес для исследования из-за редкой комбинации физических свойств: высокой температуры плавления, широкой области гомогенности при высоких температурах [1], прочностной и термодинамической стабильности. В связи с этим данный материал является перспективным для разработки нового поколения жаропрочных сплавов с комплексом свойств, превосходящим современные аналоги [2]. В настоящее время во всем мире в ракетной

технике, турбиностроении и авиастроении в силу своих подходящих механических свойств широко применяются жаропрочные сплавы на основе NiAl [3, 4] со структурой В2. Однако к жаропрочным сплавам предъявляют все более высокие требования, основное из которых – высокая рабочая температура в сочетании с высокими прочностными свойствами [5–7]. В настоящее время основные усилия прикладываются к тому, чтобы повысить рабочую температуру деталей из сплавов на основе NiAl, но это значение уже близко к пределу. Увеличить температуру, например, на поверхности лопатки удастся благодаря новой конфигурации каналов для проникающего охлаждения и защитным покрытиями [8, 9]. Несмотря на высокую плотность и стоимость, интерметаллический сплав RuAl может помочь в решении проблемы повышения рабочей температуры жаропрочных сплавов, так как обладает рядом несомненных преимуществ. Сплавы с большим содержанием рутения имеют чрезвычайно высокую ударную вязкость при высоком сопротивлении ползучести и низком температурном значении напряжения пластического течения. В сравнении со сплавом на основе NiAl, сплав RuAl обладает более высокой стойкостью к окислению и большей температурой плавления. Кроме того, сплав RuAl имеет низкий коэффициент объемного теплового расширения (α_V) [10], который является важным параметром для уменьшения механических напряжений в деталях при работе в большом интервале температур.

Исследования материалов этого класса крайне затратны и сопряжены с рядом технологических трудностей. Некоторые характеристики невозможно полностью или частично исследовать, что приводит к необходимости проведения численных расчетов с использованием соответствующих теоретических моделей. Такие расчеты позволяют охватить многие физические параметры и условия использования материалов, недоступные для изучения опытным путем. Известно значительное число работ, в которых изучаются термодинамические и механические свойства RuAl и сплавов на его основе [11–15]. Исследования физических свойств интерметаллида RuAl начинаются с расчета электронной структуры, равновесных параметров сплава и входящих в него компонентов с последующим сравнением с экспериментальными значениями и ранее произведенными вычислениями. Этот этап является основой для дальнейшего теоретического исследования термодинамических свойств сплава – например, их зависимости от температуры. Следующим этапом работы явилось исследование динамики кристаллической решетки сплава RuAl. Несмотря на большое количество работ, посвященных интерметаллиду RuAl, динамика решетки еще мало изучена.

В данной работе фононные спектры найдены из первых принципов в рамках теории функционала плотности методом линейного отклика и ультрамягких псевдопотенциалов. Работа выполнена в рамках реализации комплексного научного направления 2.1. «Фундаментально-ориентированные исследования» («Стратегические направления развития материалов и технологий их переработки на период до 2030 года») [16].

Материалы и методы

Методом функционала плотности рассчитывали полную энергию системы, параметр решетки, закон дисперсии, распределение электронной плотности и плотности состояний.

Поиск равновесного значения параметра ячейки основан на исследовании зависимости полной энергии системы от параметра ячейки. Полная энергия описывается выражением [17]:

$$E_{\text{полн}} = E_{i-i} + T_0[n] + E_{e-i} + E_{e-e} + E_{xc}, \quad (1)$$

где $E_{\text{полн}}$ – полная энергия; E_{i-i} – энергия ион-ионного взаимодействия; $T_0[n]$ – кинетическая энергия электронов; E_{e-i} – энергия электрон-ионного взаимодействия; E_{e-e} – энергия электрон-электронного взаимодействия; E_{xc} – обмен-корреляционная энергия.

Для таких расчетов необходима высокая точность, поэтому в данном случае варьируемыми параметрами в поисках оптимальных значений, а критерием точности была сходимость по энергии в шестом знаке после запятой, такая точность позволяет учесть энергию смещения. Базисные функции – плоские волны с максимальной энергией 30 Ry. Фурье-компоненты зарядовой плотности использовались меньше 750 Ry. Для интегрирования по зоне Бриллюэна использовалась сетка k -точек с набором $16 \times 16 \times 16$, при этом суммирование по зонам велось при помощи функции Гаусса–Эрмита первого порядка шириной 10 mRy. Для генерации и проведения обратного Фурье-преобразования матриц силовых констант использовали q -точки с набором $6 \times 6 \times 6$. Используемые псевдопотенциалы – ультрамягкие. Все расчеты проводили с помощью пакета PWSCF (Quantum-ESPRESSO).

Результаты

На графике дисперсионной зависимости видна щель между оптическими и акустическими ветвями (рис. 1, а). Ширина щели составляет 57 см^{-1} . Щель возникает в результате разделения оптических и акустических ветвей из-за различия атомных масс ($M_{\text{Ru}}/M_{\text{Al}} \approx 4$). Верхние оптические ветви колебаний связаны с легкими атомами алюминия. Кристаллографическим направлениям GX, GM и GR отвечает вырожденная поперечная мода с двумя направлениями вектора поляризации, перпендикулярными волновому вектору, и невырожденная продольная мода. В кристаллографическом направлении XM симметрия не приводит к вырождению, и три моды разделяются. В кристаллографических направлениях XM, GM и MR частота продольных колебаний ниже, чем частота поперечной волны, это соответствует такой ситуации, когда при продольных колебаниях вещество сжимается и растягивается меньшей квазиупругой силой, чем сила, приводящая к изгибу, связанная с поперечными волнами.

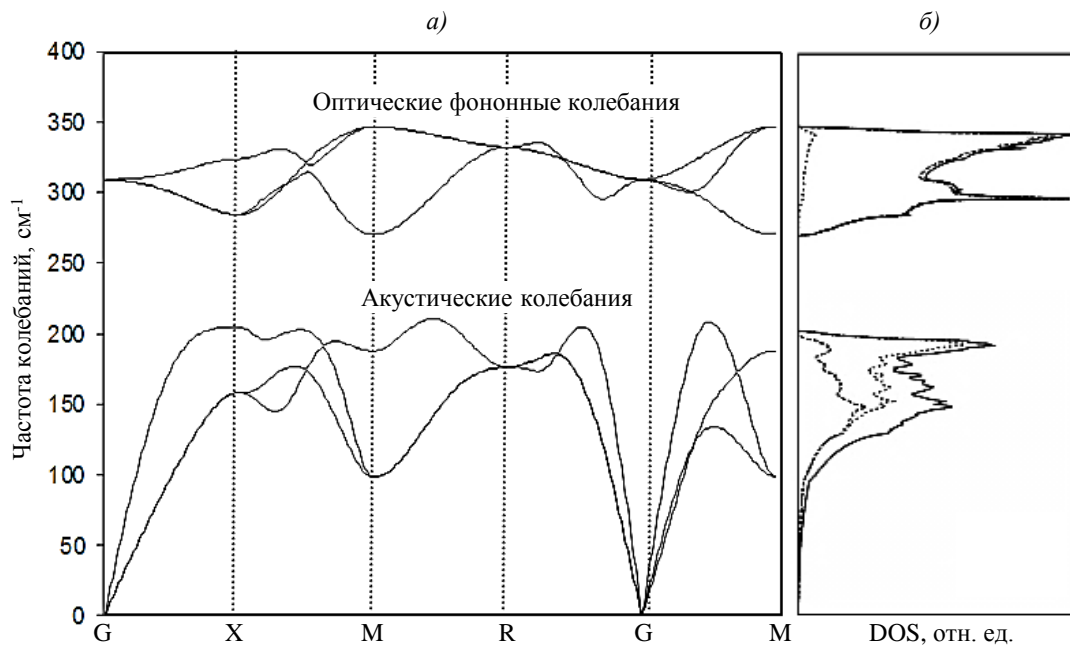


Рис. 1. Фононный спектр RuAl (а) и плотность фононных состояний (DOS) (б) с частичным вкладом Ru (····) и Al (---) в общую плотность фононных состояний RuAl (—)

Для определения значений микроскопической константы Грюнайзена $\gamma(jk)$ использовали соотношение:

$$\gamma(jk) = -\frac{\partial \ln(\omega(jk))}{\partial \ln V}, \quad (2)$$

которое после упрощения принимает вид:

$$\gamma(jk) = -\frac{V_0 \Delta\omega(jk)}{\omega_0(jk) \Delta V}, \quad (3)$$

где $\Delta\omega(jk)$ – разница в частотах фоновых колебаний, рассчитанных для каждого k -вектора при равновесном объеме V_0 и объеме большем на 2,7%.

Далее в приближении Эйнштейна находили среднее значение константы Грюнайзена (γ_G) по формуле:

$$\gamma_G = \frac{1}{n} \sum \gamma(jk), \quad (4)$$

где n – число используемых k -векторов.

Значение константы, полученное таким образом, составляет 1,72. На рис. 2, б показан вклад каждой фоновых ветви в значение константы Грюнайзена. Акустические ветви дают меньший вклад, чем оптические, поскольку оптические ветви появляются в результате колебаний более легкого алюминия. Расчет константы Грюнайзена для сравнения результатов также производился через температуру Дебая.

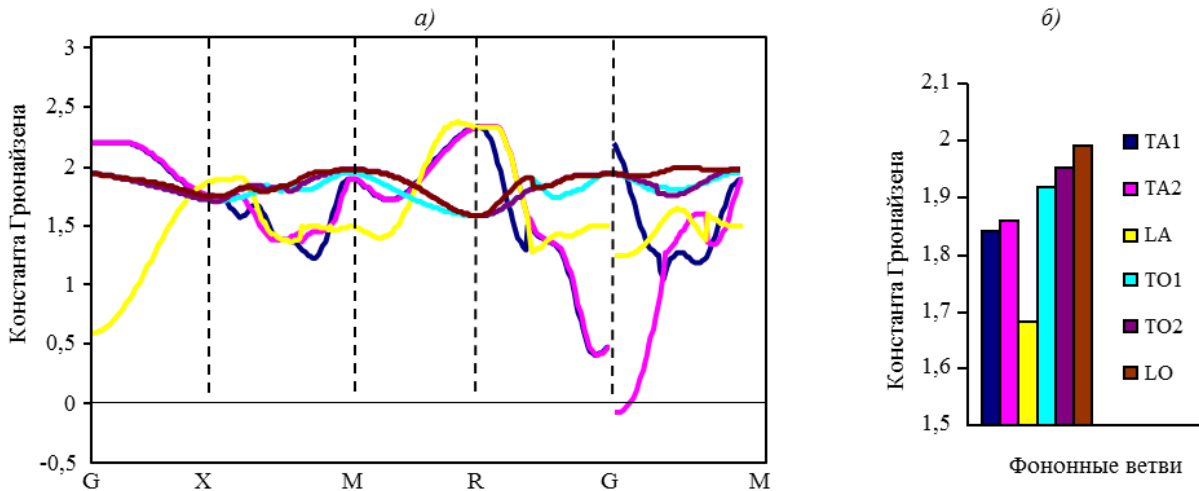


Рис. 2. Микроскопические значения константы Грюнайзена для всех ветвей фоновых колебаний (а) и ее значения для отдельных фоновых ветвей (б): TA1 и TA2 (TO1 и TO2) – две поперечные акустические (оптические) ветви; LA (LO) – продольная акустическая (оптическая) ветвь

Для 15 различных объемов (по семь справа и слева от равновесного объема с шагом 2,7%) находили температуру Дебая, и по формуле определяли константу Грюнайзена:

$$\gamma(jk) = -\frac{\partial \ln(\Theta_D)}{\partial \ln V}. \quad (5)$$

Такой способ дает значение 1,66. Приближенная зависимость между высокотемпературным значением константы Грюнайзена (γ_{HT}) и низкотемпературным значением (γ_{LT}):

$$\gamma_{HT} - \gamma_{LT} \approx \frac{1}{3}. \quad (6)$$

По этой формуле можно оценить значение константы Грюнайзена при высокой температуре:

$$\gamma_{HT} \approx 2,05.$$

В силу того, что расчет константы $\gamma(jk)$ производился как для акустических, так и для оптических ветвей, можно оценить, какой вклад дают оптические фононы в значение константы Грюнайзена:

$$\gamma_A = 1,60, \gamma_{A+O} = 1,72,$$

где γ_A – значение с учетом акустических ветвей; γ_{A+O} – значение константы с учетом акустических и оптических *мод*.

В результате включения оптических *мод* константа Грюнайзена увеличивается на 7,5%. Константа Грюнайзена для NiAl составляет 1,42 – если сравнивать с RuAl, то у алюмината никеля константа меньше. Зная значения объемного модуля упругости и константы Грюнайзена, можно найти коэффициенты в формуле Морзе для приближенного вычисления полной энергии в зависимости от параметра решетки:

$$E_{\text{полн}} = A - 2D \cdot e^{-\lambda(r-r_0)} + D \cdot e^{-\lambda(r-r_0)}, \quad (7)$$

$$\text{где } \lambda = \frac{2\gamma_G}{r_0}; \quad r_0 = -\frac{\ln(x_0)}{\lambda}; \quad B(r_0) = -\frac{cx_0^2\lambda^3}{6\pi\ln(x_0)}; \quad x_0 = \frac{-b}{2c}; \quad x = e^{-\lambda r}; \quad D = \frac{b^2}{4c}; \quad (8)$$

A – коэффициент, зависящий от сплава; D – глубина потенциальной ямы; r – расстояние между атомами; r_0 – радиус координационной сферы; x_0 – координата атома в положении равновесия; $B(r_0)$ – объемный модуль упругости; c, b – параметры, связанные с глубиной потенциальной ямы.

Из формул (8) получаем неизвестные параметры λ и D :

$$\lambda = 0,651 \text{ а.е.}^{-1} \quad \text{и} \quad D = 1,024 \cdot 10^{-3} \text{ Ry.}$$

В области температур $T < 40$ К кривая (рис. 3) имеет обычную форму (температура Дебая сначала убывает с увеличением T , а затем проходит через минимум). Если бы колебания были строго гармоническими, то можно было бы ожидать, что при высоких температурах кривая будет более пологой. Причиной постоянного возрастания, которое наблюдается вплоть до 150 К, является ангармонический вклад. При высоких температурах значение характеристической температуры стремится к 528 К. Сплав NiAl обладает более низкой температурой Дебая (462 К). Поскольку численные значения характеристических температур отличаются друг от друга, необходимо привести их к такому виду, чтобы было удобно сравнивать. На рис. 4 представлены две температурные зависимости – для сплавов RuAl и NiAl. По оси абсцисс отложены значения T/Θ_{D_0} , а по оси ординат отношение Θ_D/Θ_{D_0} , где Θ_{D_0} – температура Дебая при 0 К.

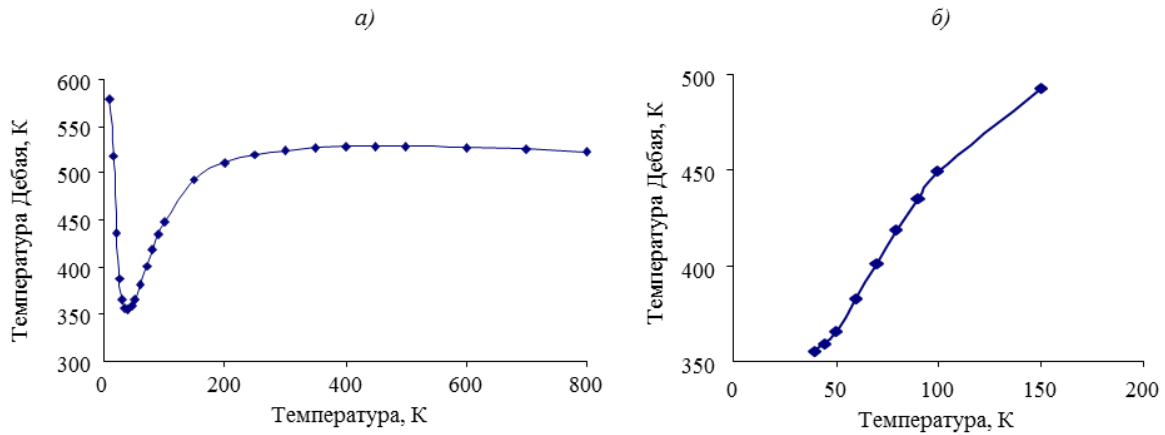


Рис. 3. Температурная зависимость температуры Дебая в диапазоне температур 0–800 К (а) и часть этой зависимости в температурном интервале от 40 до 150 К (б)

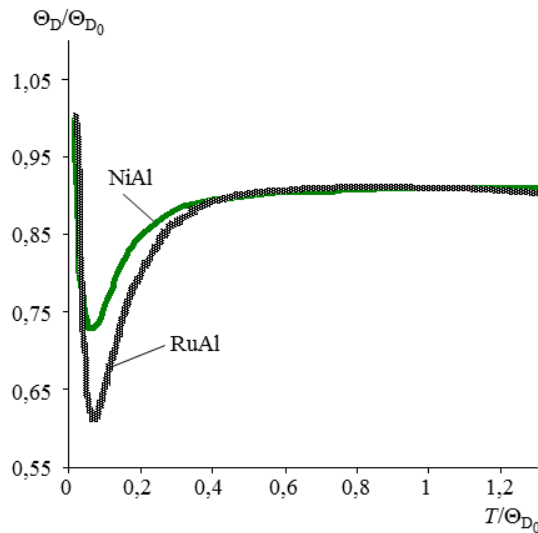


Рис. 4. Температурная зависимость температуры Дебая (Θ_D) для сплавов RuAl и NiAl

Крутизна убывания кривой $\Theta_D(T)$ по мере роста температуры с 0 К соответствует скорости отклонения действительного частотного распределения от дебаевского распределения, а глубина минимума указывает на величину этого отклонения. Проанализировав вид зависимости на рис. 4, можно сделать заключение об одинаковости типов частотного распределения, но различности численного значения плотности мод. Зная эту величину, можно найти среднее значение второго момента частоты $\overline{\omega^2}$ фоновых колебаний:

$$\Theta_D = \sqrt{\frac{5}{3} \cdot \overline{\omega^2}}. \quad (9)$$

Результат вычислений: $\overline{\omega^2} = 7,22 \cdot 10^{25} \text{ с}^{-2}$; значение квадрата частоты, найденного из фоновых спектров, $\overline{\omega^2} = 4,037 \cdot 10^{25} \text{ с}^{-2}$.

Необходимо также вычислить скорость звука:

$$\omega_D = \left(\frac{6\pi^2 N}{V} \right)^{1/3} \cdot c, \quad (10)$$

где c – скорость звука; V – объем кристалла; N – полное число мод.

Скорость звука получается равной $2,337 \cdot 10^3 \text{ м/с}$.

Теплоемкость вычисляется по формуле:

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V = k_B \sum_{kj} \left[\frac{\hbar\omega(kj)}{k_B T} \right]^2 \frac{\exp \left\{ \frac{\hbar\omega(kj)}{k_B T} \right\}}{\left(\exp \left\{ \frac{\hbar\omega(kj)}{k_B T} \right\} - 1 \right)^2}, \quad (11)$$

где E – энергия; k_B – константа Больцмана; \hbar – постоянная Планка.

При комнатной температуре значение теплоемкости близко значению $3Nk_B \approx 6$ кал/(моль·К), где N – полное число мод. Представленная на рис. 5, а зависимость теплоемкости от температуры в промежутке от 0 до 60 К аппроксимируется кубическим уравнением:

$$C_V(T) = 4 \cdot 10^{-6} T^3 + 3 \cdot 10^{-3} T. \quad (12)$$

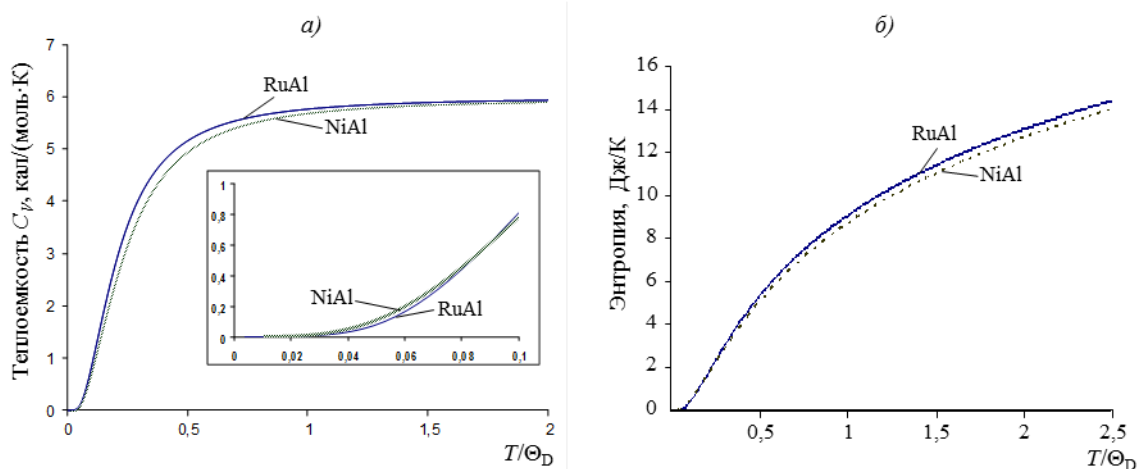


Рис. 5. Температурная зависимость теплоемкости при постоянном объеме (а) и температурная зависимость энтропии (б)

Численный коэффициент при слагаемом T^3 можно спрогнозировать с достаточно хорошей точностью

$$\Theta_0 = \left(\frac{12\pi^4 N k_B}{5a} \right)^{1/3}, \quad (13)$$

где Θ_0 – температура Дебая при 0 К, численное значение в данном случае равно 579 К; N – число атомов; k_B – постоянная Больцмана; a – коэффициент в уравнении (12) при слагаемом T^3 .

Значение, полученное по формуле (12): $a = 2,394 \cdot 10^{-6}$ кал/(моль·К⁴), немного отличается от значения, приведенного в формуле (13), из-за того, что взято значение Θ_0 не при температуре 0 К, а при значении 2 К, но все равно демонстрирует хорошее соответствие вычисленным результатам. В аппроксимирующей формуле можно найти электронный вклад в теплоемкость (γ_e), это коэффициент, стоящий перед слагаемым T в формуле (12). Значение $\gamma_e = 3 \cdot 10^{-3}$ кал/(моль·К²) не велико, это объясняется небольшой величиной плотности электронных состояний на уровне Ферми. Поскольку известна зависимость теплоемкости от температуры, есть возможность оценить энергию нулевых колебаний. Колебательная энергия определяется как сумма энергии нулевых и тепловых колебаний:

$$E_T = \int_0^T C_V dT.$$

По данным зависимости $C_V(T)$ можно построить график $E_T(T)$. С другой стороны, при больших температурах тепловую энергию можно представить как:

$$E_T = -E_Z + 3Nk_B T \left[1 + \frac{1}{2!} |B_2| \overline{\omega^2} \left(\frac{h}{k_B T} \right)^2 - \dots \right], \quad (14)$$

где E_T – тепловая энергия; E_Z – энергия нулевых колебаний; B_n – числа Бернулли; $\overline{\omega^2}$ – момент частоты.

Если температура высока, член в квадратных скобках приближается к единице, в результате график зависимости E_T от температуры будет прямой линией, что и показано на рис. 6. Отрезок, отсекаемый этой прямой, при $T=0$ будет равен E_Z .

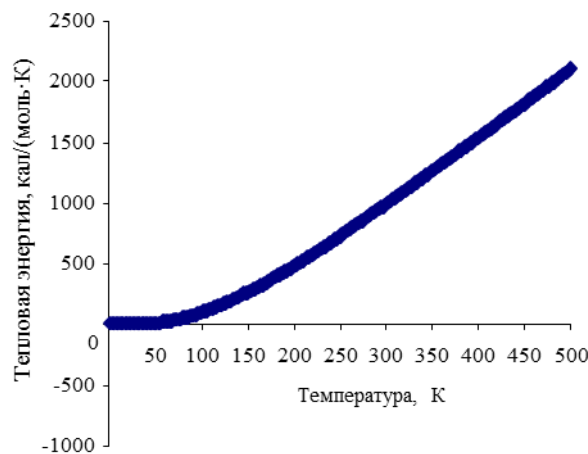


Рис. 6. Температурная зависимость тепловой энергии

Вычисления дают значение $E_Z=0,00544$ Ру на ячейку, это значение немного отличается от значения, непосредственно вычисленного из фононного спектра $E_Z=0,00654$ Ру на ячейку, для NiAl – $E_Z=0,00633$ Ру на ячейку.

Можно также оценить теплоту сублимации – $\Delta H_{\text{суб}}$ (при 0 К), зная статическую энергию решетки E_0 , которая вычисляется в результате самосогласованного расчета:

$$E_0 = -E_Z - \Delta H_{\text{суб}}, \quad (15)$$

таким образом, теплота сублимации (при 0 К) $\Delta H_{\text{суб}}=204,31$ Ру на ячейку.

Поскольку, даже при температурах сравнимых с 0 К, существуют нулевые колебания, то имеется расширение решетки, связанное с этими колебаниями:

$$\frac{\Delta V}{V(0 \text{ К})} = \frac{\chi_T(0 \text{ К})}{V(0 \text{ К})} \gamma_G E_Z, \quad (16)$$

где $V(0 \text{ К})$ – объем решетки при 0 К; $\chi_T(0 \text{ К})$ – показатель сжимаемости решетки.

Объемное расширение решетки в результате нулевых колебаний составляет 0,43%.

Вид зависимости на рис. 7, а отражает вклад в энтропию каждого элемента сплава RuAl. Рутений дает больший вклад в энтропию благодаря своей массе – как указывалось ранее, масса рутения в ~4 раза больше, чем у алюминия, при этом рутений

менее подвижен, чем алюминий, а это сказывается на колебательных свойствах, которые приведены в таблице.

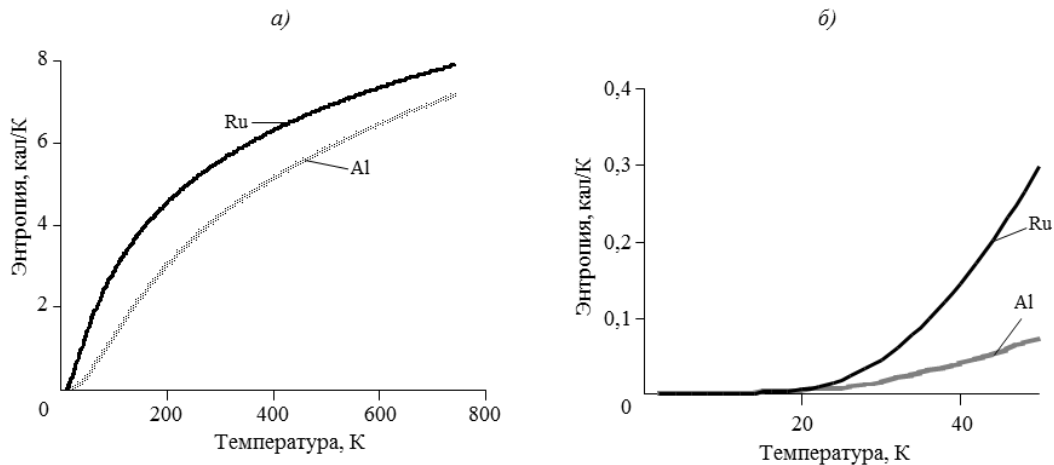


Рис. 7. Парциальная энтропия в зависимости от температуры (а) и в температурном интервале от 2 до 60 К (б)

Парциальный вклад Ru и Al, а также Ni и Al в энергию нулевых колебаний и фононную плотность состояний в сплавах RuAl и NiAl соответственно

Элемент	Парциальный вклад в энергию нулевых колебаний, Ридберг/атом	Парциальный вклад в фононную плотность состояний
Al (RuAl)	0,005430	3,374703
Ru (RuAl)	0,001659	2,628610
Al (NiAl)	0,001875	2,550468
Ni (NiAl)	0,004454	3,450039

В сплаве NiAl обратная ситуация, больший вклад в колебания и в фононную плотность состояний дает Ni.

Важной характеристикой для жаропрочных материалов является тепловое расширение. Для сплава RuAl [18] экспериментально определен коэффициент объемного теплового расширения в широком диапазоне температур – от 400 до 1773 К. Граничные значения коэффициента объемного теплового расширения соответственно равны $5,5 \cdot 10^{-6}$ и $11 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$. Такое низкое значение можно объяснить слабым вкладом колебаний решетки в тепловое расширение. В работе [18] приведены данные для соединений NiAl, Ni(Pt)Al, FeAl и CoAl, для которых коэффициент объемного теплового расширения в среднем на порядок меньше, чем для приведенных ранее сплавов.

В данной работе тепловое расширение определяли через фононный спектр. Значения коэффициента объемного теплового расширения составили:

Температура, К	$\alpha_V \cdot 10^6, \text{ K}^{-1}$
400	7,2
1773	8,7

Можно оценить значения коэффициента объемного теплового расширения, зная модуль упругости и константу Грюнайзена:

$$\alpha = \frac{2k_B \gamma}{BV}, \quad (17)$$

где k_B – константа Больцмана; γ – константа Грюнайзена; B – объемный модуль упругости; V – объем ячейки.

Такой способ оценки дает значение $\alpha_V=8,5 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$.

Если предположить, что колебательный и электронный вклад в объемное расширение аддитивны, можно разделить их и найти численные значения – достаточно спрямить в координатах $\alpha(T)/T$ от T^2 :

$$\alpha(T)=\zeta T+\zeta T^3, \quad (18)$$

где $\zeta=10^{-8} \text{ K}^{-1}$ – электронный вклад; $\zeta=9 \cdot 10^{-13} \text{ K}^{-3}$ – вклад колебаний.

На рис. 8, а показана зависимость коэффициента объемного теплового расширения от температуры. Связь между коэффициентом объемного теплового расширения и температурным коэффициентом модуля упругости можно выразить формулой:

$$\alpha_B(T)=2\gamma\alpha_V(T), \quad (19)$$

где $\alpha_B(T)$ – температурный коэффициент модуля упругости; $\alpha_V(T)$ – коэффициент объемного теплового расширения.

Вид зависимости температурного коэффициента модуля упругости от температуры показан на рис. 8, б.

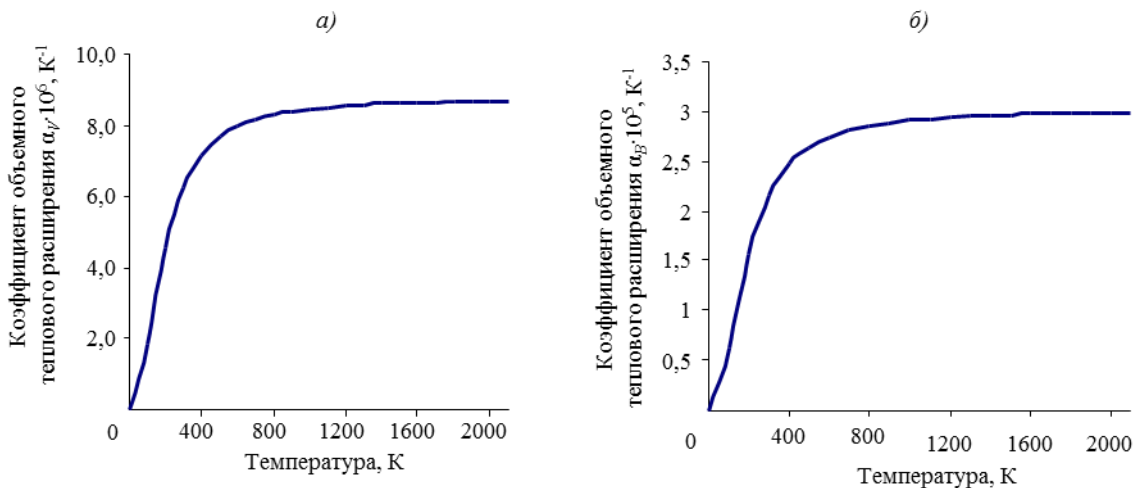


Рис. 8. Температурные зависимости коэффициента объемного теплового расширения (а) и температурного коэффициента модуля упругости (б)

Важнейшей характеристикой жаропрочного материала является температура плавления. Существует несколько полуэмпирических способов оценки температуры плавления. Один из способов оценки нижнего предела температуры плавления через температуру Дебая:

$$T_L > \frac{T_D}{0,3}. \quad (20)$$

Нижний предел температуры плавления для RuAl составляет 1927 К, для NiAl: 1540 К. Высокое значение температуры плавления для RuAl выделяет этот сплав из всех остальных жаропрочных сплавов.

Обсуждение и заключения

Показано, что данные методики расчета хорошо согласуются с экспериментальными данными и могут быть использованы для прогнозирования свойств разрабатываемых новых сплавов типа RuAl с решеткой В2. Данные методики можно применять

также для оценки свойств других соединений с решеткой В2 в сочетании с другими оценочными методиками – например, моделирующими коррозионные характеристики [19, 20], или при использовании теории физико-химического анализа сплавов [21] в том случае, когда сплав не изучен.

Благодарности

Авторы благодарят сотрудников кафедры теоретической физики МИСиС Э.И. Исаева, Ю.Х. Векилова и И.Д. Блескова за ценные замечания при обсуждении результатов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Obrowski W. Uber Legierungen, des Rutheniums mit Bor, Beryllium und Aluminium // Metallwissenschaft und Technik. 1963. Vol. 17. P. 108–112.
2. Povarova K.B., Padalko A.G., Drozdov A.A. et al. Differential barothermal analysis in the course of reactive powder barothermal processing of RuAl alloys // Journal of Thermal Analysis and Calorimetry. 2005. Vol. 80. Issue. 3. P. 607–612. DOI: 10.1007/s10973-005-0701-y.
3. Назаркин Р.М., Колодочкина В.Г., Оспенникова О.Г., Орлов. М.Р. Изменения микроструктуры монокристаллов жаропрочных никелевых сплавов в процессе длительной эксплуатации турбинных лопаток // Авиационные материалы и технологии. 2016. №4 (45). С. 9–17. DOI: 10.18577/2071-9140-2016-0-4-9-17.
4. Каблов Е.Н., Петрушин Н.В., Светлов И.Л., Демонис И.М. Никелевые литейные жаропрочные сплавы нового поколения // Авиационные материалы и технологии. 2012. №5. С. 36–52.
5. Каблов Е.Н., Оспенникова О.Г., Петрушин Н.В. Новый монокристаллический интерметаллидный жаропрочный сплав на основе γ' -фазы для лопаток ГТД // Авиационные материалы и технологии. 2015. №1 (34). С. 34–40. DOI: 10.18577/2071-9140-2015-0-1-34-40.
6. Оспенникова О.Г. Тенденции создания жаропрочных никелевых сплавов низкой плотности с поликристаллической и монокристаллической структурой (обзор) // Авиационные материалы и технологии. 2016. №1 (40). С. 3–19. DOI: 10.18577/2071-9140-2016-0-1-3-19.
7. Базылева О.А., Оспенникова О.Г., Аргинбаева Э.Г., Летникова Е.Ю., Шестаков А.В. Тенденции развития интерметаллидных сплавов на основе никеля // Авиационные материалы и технологии. 2017. №5. С. 104–115. DOI: 10.18577/2071-9140-2017-0-S-104-115.
8. Каблов Е.Н., Оспенникова О.Г., Светлов И.Л. Высокоэффективное охлаждение лопаток горячего тракта ГТД // Авиационные материалы и технологии. 2017. №2 (47). С. 3–14. DOI: 10.18577/2071-9140-2017-0-2-3-14.
9. Петрушин Н.В., Оспенникова О.Г., Светлов И.Л. Монокристаллические жаропрочные никелевые сплавы для турбинных лопаток перспективных ГТД // Авиационные материалы и технологии. 2017. №5. С. 72–103. DOI: 10.18577/2071-9140-2017-0-S-72-103.
10. Guitar M.A., Mücklich F. Isothermal Oxidation Behaviour of Nanocrystalline RuAl Intermetallic Thin Films // Oxidation of Metals. 2013. Vol. 80. I. 3–4. P. 423–436. DOI: 10.1007/s11085-013-9409-8.
11. Borah A., Robi P.S., Srinivasan A. Synthesis of nano-crystalline RuAl by mechanical alloying // Metals and Materials International. 2007. Vol. 13. I. 4. P. 293–302. DOI: 10.1007/BF03027885.
12. Povarova K.B., Morozov A.E., Skachkov O.A. et al. Effect of mechanical activation on the characteristics of ruthenium and aluminum powder mixtures // Russian Metallurgy (Metally). 2008. No. 3. P. 60–67. DOI: 10.1134/S0036029508030099.
13. Tryon B., Cao F., Murphy K.S., Levi C.G., Pollock T.M. Ruthenium-containing bond coats for thermal barrier coating systems // The Journal of The Minerals, Metals & Materials Society. 2006. Vol. 58. I. 1. P. 53–59. DOI: 10.1007/s11837-006-0069-x.

14. Bleskov I.D., Isaev E.I., Vekilov Yu.Kh. Electronic structure and ground parameters of $Ru_{1-x}Me_xAl$ refractory alloys // *Physics of the Solid State*. 2010. Vol. 52. No. 9. P. 1803–1809. DOI: 10.1134/S1063783410090039.
15. Borah A., Robi P.S., Mujumdar A.L. et al. Microstructural evolution and hardening behaviour of cast and heat-treated Ru–Al and Ru–Al–Ni alloys // *Metals and Materials International*. 2008. Vol. 14. Issue 1. P. 123–132. DOI: 10.3365/met.mat.2008.02.123.
16. Каблов Е.Н. Инновационные разработки ФГУП «ВИАМ» ГНЦ РФ по реализации «Стратегических направлений развития материалов и технологий их переработки на период до 2030 года» // *Авиационные материалы и технологии*. 2015. №1 (34). С. 3–33. DOI: 10.18577/2071-9140-2015-0-1-3-33.
17. Mehl M.J., Klein B.M., Papaconstantopoulos D.A. *Intermetallic Compounds: Principles and Practice*. London: Wiley, 1995. Vol. 1: Principles. P. 195–210.
18. Duane C.W. A Review of the Stratified Charge Engine Concept // *Physical Review*. 1965. Vol. 37. No. 3A. P. 37–43.
19. Чесноков Д.В., Антипов В.В., Кулюшина Н.В. Метод ускоренных лабораторных испытаний алюминиевых сплавов с целью прогнозирования их коррозионной стойкости в условиях морской атмосферы // *Труды ВИАМ: электрон. науч.-технич. журн.* 2016. №5 (41). Ст. 10. URL: <http://www.viam-works.ru> (дата обращения: 27.11.2017). DOI: 10.18577/2307-6046-2016-0-5-10-10.
20. Павловская Т.Г., Дешевая Е.А., Зайцев С.Н., Козлов И.А. и др. Коррозионная стойкость алюминиевых сплавов в условиях, имитирующих факторы космического полета // *Труды ВИАМ: электрон. науч.-технич. журн.* 2016. №3. Ст. 11. URL: <http://www.viam-works.ru> (дата обращения: 27.11.2017). DOI: 10.18577/2307-6046-2016-0-3-11-11.
21. Морозова Г.И. Значение метода физико-химического фазового анализа в развитии авиационного металловедения и создании жаропрочных никелевых сплавов // *Труды ВИАМ: электрон. науч.-технич. журн.* 2016. №1 (37). Ст. 07. URL: <http://www.viam-works.ru> (дата обращения: 27.11.2017). DOI: 10.18577/2307-6046-2016-0-1-50-55.